

ESTUDIO DE UN MODELO CINÉTICO DE GAS GRANULAR CONFINADO CASI-BIDIMENSIONALMENTE

Vicente Buzón Díaz



Universidad de Granada

Programa de Doctorado en Física y Matemáticas
Escuela de Doctorado de Ciencias, Tecnologías e Ingeniería

TESIS DOCTORAL

MEMORIA PRESENTADA PARA OPTAR AL GRADO DE
DOCTOR EN FÍSICA POR LA UNIVERSIDAD DE
GRANADA.

por

Vicente Buzón Díaz

dirigida por

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

Dra. María José Ruiz Montero
Catedrática de Física Teórica de la Universidad de
Sevilla

Editor: Universidad de Granada. Tesis Doctorales
Autor: Vicente Buzón Díaz
ISBN: 978-84-9163-900-8
URI: <http://hdl.handle.net/10481/51842>

Impreso en Sevilla en mayo de 2017

Este trabajo ha sido posible gracias a una beca del Ministerio de Economía, Industria y Competitividad, a través del programa de Formación de Personal Investigador en la convocatoria de 2012, además de las contribución económica del proyecto del Plan Nacional FIS2011-24460.

a la Old y los gorriones

Índice

Agradecimientos	xi
1 Introducción	1
2 Fenomenología de los medios granulares	7
2.1 Medios granulares fluidizados	9
2.2 Vibrado vertical de sistemas casi bidimensionales	12
3 Modelo colisional efectivo y estado homogéneo	21
3.1 Descripción del modelo	21
3.2 Ecuación de Liouville	24
3.3 Estado estacionario homogéneo	29
3.4 Simulaciones	34
4 Dinámica homogénea y efectos no lineales	39
4.1 Hidrodinámica homogénea	40
4.2 Estudio de la validez del modelo	47
4.3 Efecto Kovacs	53
5 Hidrodinámica en el modelo colisional y estabilidad	59
5.1 Ecuaciones de Navier-Stokes	59
5.2 Estabilidad de la hidrodinámica homogénea	69
6 Intruso en un medio granular vibrado confinado	81
6.1 Resultados	82
6.2 Análisis del sistema	93
7 Conclusiones	97

A	Cálculo de \bar{L}_+	99
B	Simulaciones de dinámica molecular	103
C	Cálculo de ν_η, ν_κ y ν_μ	107
D	Cálculo de ζ_1	109
	Lista de publicaciones	111
	Bibliografía	113

Agradecimientos

En primer lugar agradecer a mis directores J. Javier Brey Abalo y María José Ruiz Montero por todo el trabajo realizado y la paciencia demostrada durante la elaboración de esta memoria. Su guía y consejos han sido básicos en estos primeros pasos en el mundo de la investigación.

También quiero agradecer a todos los compañeros del grupo por su apoyo y su trato siempre amable, en especial a Pablo y Maribel, con los que he trabajado en la elaboración de mis primeros artículos, y a mis compañeros de despacho y faena Antonio y Carlos.

En el ámbito personal tengo que agradecer sobre todo a mis padres y mis hermanas los ánimos que me han dado en todo momento a lo largo del doctorado, sin olvidar su paciencia a la hora de escuchar mis tonterías. Entre mis amigos me tengo que acordar de Rafa, Migue, Manu y Pedro, gracias por estar siempre ahí para desconectar y tomarnos una cerveza en los pisos o donde fuera. A Rafa Tierno y Curro, gracias por comprenderme tan bien, por nuestras charlas y por sacar al ogro a pasear. También a Ambra, por haberme acompañado a lo largo de este episodio y especialmente al final, gracias por estar siempre ahí con cariño y tu buen juicio.

Por último pero no menos importante, a la gente de la facultad de Física. A Jose Luis, del departamento; a Adela, Rosa y Juan del grupo de conserjería de por la tarde y a las de la unidad de limpieza, gracias a todos por estar siempre con una sonrisa. También a la gente de cultura, por máquinas y por mantener tan bien un lugar donde he estado muchos años como en casa.

Muchas gracias a todos.

Vicente Buzón Díaz
Sevilla, mayo de 2017

Capítulo 1

Introducción

Los medios granulares se definen como conjuntos de partículas macroscópicas que interactúan disipativamente. Debido al tamaño macroscópico de las partículas, las fluctuaciones causadas por efectos térmicos no son relevantes en estos sistemas. Además, su carácter disipativo hace que estén intrínsecamente fuera de equilibrio. Estas propiedades dan lugar a que dichos medios presenten una gran cantidad de comportamientos peculiares, y hacen de ellos buenos modelos para el desarrollo de la física estadística de no equilibrio. Por otra parte, estos medios aparecen por doquier en nuestro entorno. Arena, medicamentos, alimentos..., estos materiales son, después del agua, los más utilizados por nuestra sociedad, de modo que su estudio es también de interés práctico, pudiendo ayudar a optimizar su almacenamiento, transporte o manejo.

En general, más allá de los efectos generales asociados a la disipación y exclusión de volumen propios de estos sistemas, la dinámica de los granos depende de factores tales como su forma, material del que están compuestos, propiedades electromagnéticas, presencia de campos externos..., haciendo que en cada caso el sistema pueda presentar fenomenologías muy diferentes [1]. Por ello, dentro de los sistemas granulares encontramos varios tipos diferentes, dependiendo de las propiedades de la interacción entre los granos que los componen y de éstos con el medio que los rodea. Por ejemplo, en relación a la interacción entre partículas, podemos distinguir entre materiales cohesivos y no cohesivos dependiendo de si presentan interacciones atractivas o no. Con respecto al medio en el que se encuentran, si las

partículas están inmersas en un fluido cuya presencia afecta sensiblemente a la dinámica de éstas hablamos de medios granulares mojados, y de medios secos en el caso contrario.

El modelo o sistema ideal más sencillo de medio granular es un conjunto de esferas idénticas, secas y no cohesivas. Este sistema muestra ya distintos comportamientos muy característicos que empiezan por su semejanza con los materiales sólidos y fluidos, dependiendo de la energía de los granos. En reposo, las partículas se agrupan estando en continuo contacto entre ellas y el sistema se asemeja a un sólido. Cuando pueden moverse libremente, aunque las interacciones de contacto más o menos permanente puedan seguir siendo comunes, el sistema recuerda a un fluido. Dentro del comportamiento fluido, se distingue el régimen de flujo rápido, donde las colisiones binarias dominan la interacción y entre las cuales los granos se mueven libremente: en este límite hablamos de un gas granular. Estas analogías son, no obstante, de uso limitado, pues estos medios muestran peculiaridades que los diferencian de sus análogos moleculares. Por ejemplo, cuando el sistema recuerda a un sólido aparecen fuerzas distribuidas heterogéneamente en cadenas a lo largo de las cuales la tensión es especialmente intensa, la dilatación de Reynolds [2], que implica que estos sistemas se expanden al sufrir deformaciones desde el reposo, y la formación de avalanchas semejantes a los corrimientos de tierra. También en el caso en el que el medio se asemeja a un fluido surgen fenómenos peculiares de los medios granulares, siendo un ejemplo los atascos, en los que el flujo de granos a través de un orificio se ve interrumpido por la aparición de arcos estables de partículas.

Debido a la disipación intrínseca, para que un medio granular alcance un estado estacionario con energía cinética no nula, es necesario administrarle energía continuamente. Esta inyección de energía puede hacerse a través de las fronteras del sistema o en todo el volumen, dando lugar el primer método típicamente a inhomogeneidades. Experimentalmente, un método que aporta energía en todo el volumen es la aplicación de campos electromagnéticos a granos metálicos dando lugar esta configuración tanto a estados homogéneos como ordenados [3]. Por otra parte, como modelo teórico para este tipo de inyección de energía tenemos el termostato estocástico, donde a las partículas se les aplica una fuerza estocástica a modo de baño térmico, y se alcanza un estacionario homogéneo y estable [4]. Como ejemplo de inyección a través de las fronteras, en el modelo bidimensional de flujo

de tensiones uniformes (del inglés *uniform shear flow*) [5], el medio se encuentra entre dos paredes y una se mueve con velocidad constante arrastrando a las partículas por la fricción con éstas pudiendo dar lugar a movimientos convectivos.

Uno de los métodos experimentales de inyección de energía a través de las fronteras más utilizados en los medios granulares es el vibrado de las mismas o de parte de ellas, de modo que los granos pueden ganar energía en las colisiones con las paredes. Cuando hay muchas partículas, éstas muestran un comportamiento muy semejante al de los fluidos ordinarios, incluido la formación de ondas de Faraday en su superficie [6] aunque, de nuevo, con particularidades como la segregación de diferentes tipos de partículas. Si solo se vibra una capa fina de partículas, surgen una gran variedad de comportamientos peculiares, incluyendo una fase en la que aparecen de forma duradera zonas más densas, donde los granos se ordenan compacta y hexagonalmente, rodeadas de un gas más caliente [7].

En esta memoria nos centramos en el estudio de una capa fina de partículas esféricas idénticas, confinadas de modo que la longitud del sistema en la dirección del vibrado es menor que dos veces el diámetro de éstas. Este tipo de sistema se denomina casi bidimensional pues las partículas no pueden ocupar la misma posición en el plano perpendicular al vibrado, mostrando un comportamiento bidimensional efectivo para el cual la inyección de energía se produce (prácticamente) en todo el volumen del sistema. Estos sistemas presentan fases desordenadas tipo gas y también, para altas densidades y bajas aceleraciones del vibrado, agregados de partículas que pueden organizarse en distintos patrones dependiendo de los parámetros de inyección de energía [8].

Las herramientas para estudiar los medios granulares las encontramos en la teoría cinética y en particular en la ecuación de Boltzmann. Esta ecuación integro-diferencial proporciona la evolución de la función de distribución de un sistema, introduciendo los efectos de las colisiones entre partículas, si se admite la hipótesis de caos molecular que admite que las partículas no están correlacionadas antes de su colisión, lo cual restringe su uso al caso del límite diluido. El modelo más sencillo para describir los medios granulares consiste en un conjunto de esferas duras inelásticas idénticas, donde la disipación viene caracterizada por un coeficiente de restitución normal que, por simplicidad, se toma independiente de la velocidad de las partículas. Este

coeficiente, definido como la razón entre el módulo de las componentes normales de la velocidad relativa después y antes de la colisión, puede tomar valores entre 0 y 1 correspondiendo estos valores a los casos totalmente inelástico y elástico respectivamente.

Definido el modelo y fijada la regla de colisión entre las partículas, podemos obtener a partir de la ecuación de Boltzmann las ecuaciones para la evolución de los campos de densidad, velocidad y energía del sistema. Éstas incluyen al tensor de presiones y al flujo de calor como en los fluidos moleculares habituales, pero también un nuevo término, la velocidad de enfriamiento, que da cuenta de los efectos de disipación sobre la evolución de la energía. Éstos términos vienen dados por funcionales de la función de distribución del sistema, siendo demasiado difícil el análisis matemático directo de estas ecuaciones, de modo que suele hacerse un desarrollo en gradientes para estudiar el problema. En el caso libre, en el que no hay aplicados campos externos, el modelo de esferas duras presenta un estado de referencia homogéneo en el que los campos de densidad y velocidad son constantes, y la temperatura granular, definida como la desviación cuadrática media de la velocidad de las partículas, disminuye en el tiempo de acuerdo con la ley de Haff [10]. Este estado de enfriamiento homogéneo resulta ser inestable bajo ciertas condiciones formándose vórtices y terminando con el colapso de los granos inertes agrupados en agregados [9].

Para poder estudiar teóricamente este sistema confinado sin tener que introducir las condiciones de contorno de las paredes, lo que complica de forma importante su análisis, se han propuesto reglas de colisión bidimensionales efectivas, que intentan incluir el efecto del vibrado en la interacción entre partículas. Centrándonos en la propuesta por Brito et al. [11], se parte de la ecuación de Boltzmann para este sistema y se obtienen las ecuaciones hidrodinámicas. Desarrollándolas hasta primer orden en los gradientes de los flujos macroscópicos, orden de Navier-Stokes, y aunque no podamos describir con éstas las fases densas y ordenadas debido a la limitación a baja densidad, hemos realizado el estudio de la estabilidad de los estados homogéneos, analizando la posibilidad de que se den inestabilidades que lleven a situaciones inhomogéneas como las que se observan en el sistema real.

La estructura de la memoria es la siguiente. En el Capítulo 2 hacemos una revisión de fenómenos que aparecen en los medios granulares, poniendo especial hincapié en las distintas fases que se han observado tanto experimentalmente como mediante simulación en gases vibrados

y, en particular, en sistemas confinados a casi dos dimensiones.

En el Capítulo 3, presentamos el modelo utilizado para modelar el efecto de la vibración del sistema, así como el desarrollo teórico que lleva a las ecuaciones hidrodinámicas. Se analiza la existencia de un estado estacionario homogéneo, y se estudian propiedades del mismo, tales como su temperatura y la distribución de velocidades.

En el siguiente capítulo, utilizando las ecuaciones hidrodinámicas, estudiamos la hidrodinámica homogénea asociada a la evolución macroscópica del sistema. En esta dinámica solo puede variar la temperatura al estar fijos de partida los campos de densidad y velocidad del sistema por la condición de homogeneidad. Se observa una clara diferencia entre el comportamiento del gas en proceso de calentamiento y de enfriamiento, tanto en la distribución de velocidades así como en los efectos no lineales que muestra, semejantes al efecto Kovacs.

En el Capítulo 5 se obtienen los coeficientes de transporte y las ecuaciones hidrodinámicas hasta el orden de Navier-Stokes. Ello nos permite realizar el análisis de la estabilidad lineal de los estados hidrodinámicos homogéneos y la posibilidad de una transición de fase de no equilibrio a un estado inhomogéneo.

Por último, estudiamos mediante métodos de simulación la interacción entre las partículas en un sistema vibrado confinado casi bidimensionalmente en el que se introduce un intruso de masa superior. Dependiendo de la densidad se observa como el sistema puede desarrollar inhomogeneidades debido a la presencia del intruso. Mediante el análisis de este sistema buscamos comprender la dinámica de las partículas en este tipo de sistemas y los mecanismos que llevan a la distribución inhomogénea de las partículas, viendo como podría alterarse la regla de colisión efectiva para que esta reproduzca mejor el comportamiento de este tipo de sistema.

Para concluir, se resumen las principales conclusiones de nuestro trabajo. Los apéndices recogen distintos cálculos complementarios a los mostrados en el texto principal.

Capítulo 2

Fenomenología de los medios granulares

Debido a la disipación, los medios granulares no sometidos a una inyección continua de energía tienden a asentarse rápidamente debido al efecto de la gravedad, alcanzando un estado que recuerda al de un sólido. Por otro lado y como ya hemos comentado, mediante el suministro de energía al medio éste puede también asemejarse en su comportamiento a un fluido. Como ejemplo de comportamiento típico de sólido tenemos que al agitar durante un periodo de tiempo y dejar reposar después a un conjunto de granos, la fracción de volumen que éstos ocupan en reposo tiende a alcanzar un valor estacionario, que depende de la intensidad de la vibración aplicada y también del estado inicial, de modo que se obtienen diferentes valores al realizar la experiencia, aumentando o disminuyendo la fuerza. Este comportamiento recuerda a los fenómenos de histéresis observados en vidrios estructurales [12]. Cuando un medio granular se comporta como un fluido, puede mostrar flujos y ondas superficiales análogos a los de un fluido molecular convencional. A pesar de estas semejanzas, los medios granulares presentan una gran cantidad de fenómenos peculiares, demostrando que son radicalmente diferentes a sus análogos moleculares. En este capítulo comentamos algunos ejemplos de estos comportamientos peculiares observados en experimentos.

En los medios granulares en reposo, se observa que las fuerzas entre los granos presenta una distribución muy heterogénea, apareciendo cadenas o arcos de fuerza a lo largo de las cuales las ten-

siones son especialmente grandes, como puede verse en la figura 2.1. Esto hace que el sistema muestre una gran sensibilidad a la posición exacta de las partículas en procesos como la transmisión de ondas de presión [13]. Cuando los granos están apilados verticalmente en un silo o en un recipiente suficientemente ancho, se encuentra que la presión aumenta con la profundidad hasta que alcanza un valor máximo y constante [14], en contraste con los fluidos comunes donde varía linealmente con la profundidad. Esto es debido a que los arcos de fuerza hacen que aumente la presión sobre las paredes del contenedor, y por tanto las fuerzas de fricción estáticas, de modo que son las paredes las que sostienen el exceso de peso. Otro ejemplo de comportamiento atípico con respecto a los medios moleculares ocurre al echar lentamente arena sobre una superficie horizontal de forma que se va formando una montaña cuya pendiente va aumentando. El proceso continúa hasta que el ángulo que ésta forma con la horizontal alcanza un valor máximo, denominado de estabilidad marginal, para el cual se produce una avalancha de granos que termina al alcanzar este ángulo un valor de reposo, relacionado con el inicial por la diferencia entre los coeficientes de fricción dinámicos y estáticos. Este proceso tiene lugar en una delgada capa superficial del sistema de partículas, de modo que aunque el movimiento de la capa superior parezca fluido, la mayor parte del volumen del sistema se encuentra en reposo (ver figura 2.1).

Los sistemas granulares fluidizados, esto es, a los que se les suministra energía continuamente como para que muestren un comportamiento fluido, pueden también exhibir una gran variedad de comportamientos peculiares dependiendo de su configuración y del método de inyección de energía utilizado. Por ejemplo, estos medios tienden a segregar partículas de distinto tamaño, a diferencia de lo que ocurre en los fluidos convencionales en los que al agitarse se favorece la mezcla de sus componentes. Otra peculiaridad es que bajo ciertas condiciones presentan formación de patrones, es decir, estructuras no triviales y no uniformes espacialmente, que dependen débilmente de las condiciones iniciales y de contorno.

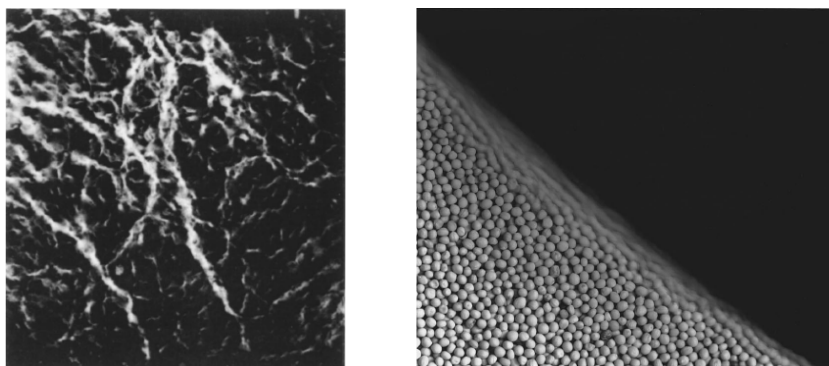


FIGURA 2.1: Izquierda: Distribución de tensiones en un sólido granular. Las zonas más claras corresponden a fuerzas más intensas. Derecha: Avalancha en la que se puede apreciar la delgada capa donde tiene lugar el movimiento de los granos. Figuras tomadas de la referencia [15].

2.1 Medios granulares fluidizados

La forma en la que se suministra energía al sistema granular es de gran importancia en la dinámica y fenómenos que éste muestra. Así, por ejemplo, en las avalanchas, donde el sistema puede aprovechar la energía potencial para transformarla en cinética, se ve que su forma y duración dependen del ángulo de inclinación de la superficie y de la anchura de la capa involucrada. En sistemas en los que se aplican flujos de aire o agua al medio granular a fin de fluidizarlo, aparecen una gran variedad de patrones e inestabilidades. Aunque la interacción fluido-grano es muy relevante, en los sistemas secos y no cohesivos se observan muchos fenómenos muy similares. En esta tesis nos centramos en estos medios ya que, a pesar de ser los más simples de los medios granulares, muestran una rica fenomenología, de la que comentamos algunos ejemplos a continuación.

Una primera posibilidad es suministrar energía al sistema mediante paredes móviles. En contenedores cilíndricos que rotan, la energía se transmite a las partículas a través de la fricción con las paredes. Cuando el eje del cilindro se sitúa verticalmente, la configuración estacionaria, para velocidades de rotación moderadas, consiste en un movimiento parecido al de sólido rígido en la zona central, y una capa fluida, cuyo tamaño crece con la velocidad de rotación, formada por las

partículas cercanas a las paredes. La configuración donde el cilindro rota alrededor de un eje situado horizontalmente suele utilizarse para estudiar la segregación en mezclas binarias distinguiéndose dos tipos, la radial y la axial. En el caso de la segregación radial las partículas mayores son rápidamente expulsadas hacia las paredes [16]. Por otra parte, la axial aprovecha este efecto y ordena en capas a lo largo del eje los distintos tipos de granos en una escala de tiempo mucho más lenta [17], pudiendo llegar a mostrar estas capas un comportamiento oscilatorio y ondas viajeras [18].

Un medio granular vibrado verticalmente, si la altura del sistema es suficiente, presenta movimientos convectivos que, en el caso de un contenedor cilíndrico, consisten en un movimiento descendente cerca de las paredes y ascendente en el centro. Este efecto se debe a que las colisiones de las partículas con las paredes crean una fina capa fluida en su cercanía, de modo que su evolución es más rápida que la de la zona central. No obstante, mediante el cambio de la forma del contenedor, puede alterarse el sentido del movimiento que pasa a ser ascendente en las paredes y descendente en el centro. Este tipo de inyección de energía da lugar también a segregación, debida a distintos mecanismos como el tamizado de las partículas, en el que las más pequeñas pasan entre los huecos de las mayores, reorganizaciones locales inducidas en la fase de dilatación del vibrado, o los mismos movimientos convectivos, que ayudan a transportar a la superficie las partículas más grandes, como ocurre en el efecto 'nuez de Brasil' [19].

Los sistemas granulares multicapa vibrados verticalmente muestran una gran variedad de patrones coherentes, observados inicialmente por Chladni [20] y Faraday [21], siendo necesario solo un grosor del sistema de unas 10-30 partículas. Estos patrones guardan ciertas similitudes con los observados en fluidos ordinarios. Las primeras experiencias con este sistema se realizaron excitando una membrana tensa con un arco de violín, y se observó que las partículas se concentraban cerca de las líneas nodales de las oscilaciones de la membrana. El fenómeno observado se conoce como apilamiento, y se debe al efecto del aire que circula entre los granos y que los arrastra al fluir hacia las regiones antinodales de la vibración. De hecho, el efecto desaparece al hacer el vacío o aumentar el tamaño de las partículas, siendo éste, por lo tanto, un ejemplo de un comportamiento peculiar de gas granular mojado.

En experimentos en vacío se ha visto como los sistemas multi-

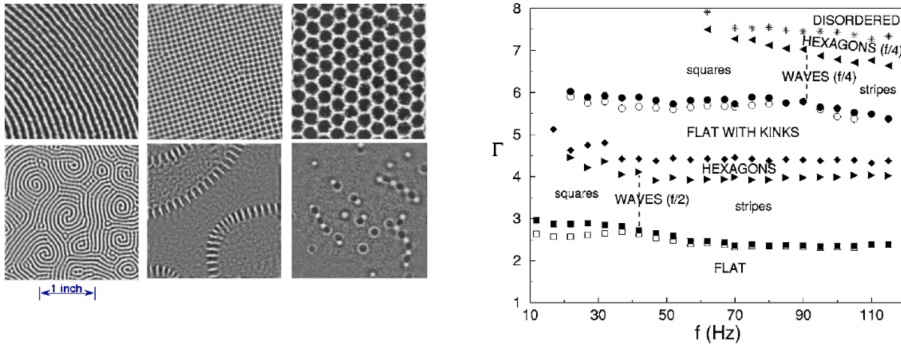


FIGURA 2.2: Izquierda: Patrones representativos de capas granulares vibradas verticalmente. Derecha: Diagrama de fases, en función de la aceleración y la frecuencia del vibrado, típico de este tipo de sistemas. Γ es un parámetro adimensional que introduce la intensidad de la vibración y su frecuencia. Figuras tomadas de la referencia [6].

capa muestran, a partir de cierta aceleración de la vibración, ondas estacionarias en su superficie como se muestra en la figura 2.2 [6]. Inicialmente aparecen ondas subarmónicas en la superficie del medio, en las que valles y crestas se alternan en el tiempo a la mitad de frecuencia que las oscilaciones de la superficie sobre la que se encuentran. Al aumentar la aceleración del vibrado, aparecen distintas estructuras que oscilan con la misma frecuencia que las anteriores. En orden creciente de frecuencia aplicada, aparecen patrones que incluyen redes cuadradas o hexagonales, oscilones y líneas. Los oscilones son excitaciones localizadas semejantes a los solitones, salvo por su carácter estacionario, y son semejantes a las que se pueden formar en líquidos como el agua. Con un comportamiento parecido al de las partículas, pueden interactuar entre ellas a una distancia del orden del tamaño de la estructura, de modo que si están en fase se repelen y se atraen en el caso contrario, pudiendo formar estados ligados (figura 2.3) [22]. Al seguir aumentando la aceleración del vibrado, y para un amplio rango de frecuencias, aparece una fase ordenada hexagonalmente, seguida de otra compuesta por distintas zonas planas que vibran en contrafase, pudiendo aparecer patrones periódicos en las fronteras entre regiones. A mayores fuerzas de vibrado vuelven a aparecer los patrones cuadrados, oscilones y líneas, pero vibrando a un cuarto de la frecuencia de la inyección en vez de a la mitad. Finalmente, al seguir aumentando

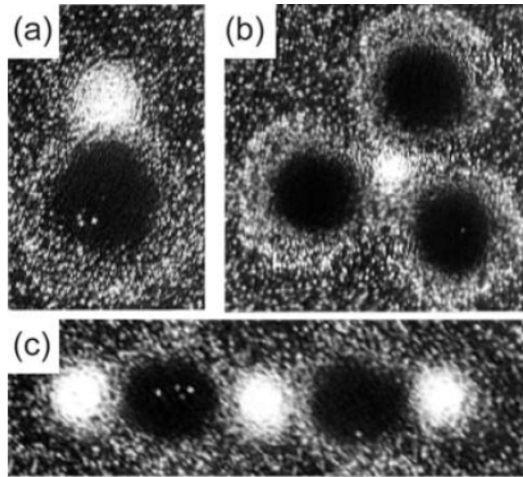


FIGURA 2.3: Oscilones formando diferentes estados ligados. Las zonas más claras corresponden a zonas más densas y las negras a huecos en el fluido, puede verse como los oscilones se encuentran en contrafase. Figuras tomadas de la referencia [1].

la aceleración, el sistema muestra una fase desordenada.

Los sistemas vibrados horizontalmente muestran una menor riqueza de comportamientos que cuando la inyección es vertical, aunque siguen mostrando segregación y patrones ortogonales a la dirección de vibración en su superficie.

2.2 Vibrado vertical de sistemas casi bidimensionales

En lo que sigue nos restringimos a experimentos de submonocapas de partículas idénticas y esféricas vibradas verticalmente. Hablamos de una submonocapa en un vibrado cuando las partículas en reposo sobre la superficie horizontal en configuración hexagonal compacta no llegan a cubrirla del todo. Si la superficie vibra verticalmente de modo que la dinámica del gas, ya sea por limitaciones de los parámetros de la vibración aplicada o por confinamiento de las partículas, tiene un comportamiento bidimensional efectivo al no poder saltar unas sobre otras, decimos que la submonocapa es casi bidimensional. Es-

tos sistemas se pueden estudiar experimentalmente mediante el uso de cámaras de alta resolución y alta velocidad de captura, o mediante simulaciones de dinámica molecular, con modelos realistas de colisiones entre las partículas y de éstas con las fronteras. En los experimentos, además de poder observar la dinámica del sistema, con las imágenes obtenidas con las cámaras se pueden obtener resultados de las trayectorias de todas las partículas y sus velocidades, gracias a las dimensiones del sistema. Para esto, las cámaras de alta velocidad tienen que tener una frecuencia de captura mucho mayor que la típica entre colisiones, aunque siempre existe una fuente de error al poder darse más de una colisión entre capturas. Por otro lado, las simulaciones sirven, por ejemplo, para comprobar que los efectos dinámicos observados no se deben a errores de la configuración experimental, o para estudiar estos sistemas en configuraciones inaccesibles o demasiado complejas experimentalmente. También pueden ayudarnos a identificar los factores de la interacción entre partículas o con las fronteras más relevantes en la dinámica real del sistema. Finalmente, son un elemento esencial para contrastar y valorar las hipótesis introducidas en el desarrollo de nuestra teoría.

Un comportamiento llamativo que tienen las submonocapas vibradas verticalmente es que presentan distintas fases, tanto ordenadas como desordenadas, y que aparecen para diferentes valores de los parámetros de vibrado. Dado el tipo de granos, la aparición de los distintos patrones depende principalmente de la densidad de partículas y de la dinámica de la superficie. La densidad se suele medir mediante la fracción de llenado $\rho = N/N_{Max}$, siendo N es el número de partículas del experimento y N_{Max} el número máximo de partículas que caben en la superficie empaquetadas hexagonalmente. Los factores más relevantes que caracterizan el movimiento de la superficie vibrante son la amplitud A y la frecuencia angular ω , no siendo muy relevante la forma específica en la que se realiza la vibración. La onda sinusoidal es la más típica en experimentos y simulaciones. En vez de la amplitud y para introducir el efecto de la gravedad se suele utilizar la aceleración adimensional $\Gamma = A\omega^2/g$. La relación entre la temperatura granular y este parámetro es en general directa, de modo que al aumentar o disminuir la aceleración de vibración también lo hace la temperatura. En el caso en el que el sistema se confina mediante una tapa superior, es importante también la distancia reducida $h = H - \sigma$, donde H es la distancia de separación entre las tapas y σ el diámetro

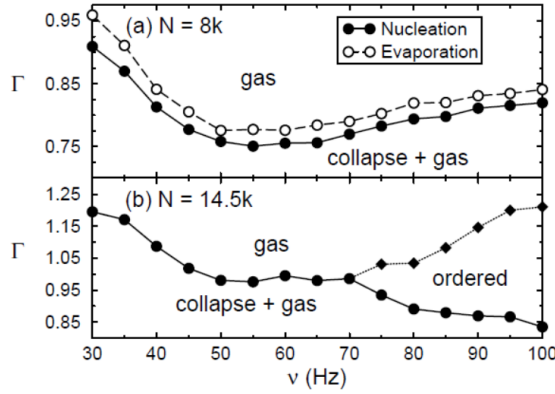


FIGURA 2.4: Diagrama de fases de una submonocapa de granos no confinada y vibrada verticalmente para dos fracciones de llenado diferentes, $\rho = 0.463$ en el superior y $\rho = 0.839$ para la inferior. Para la segunda se produce una transición a una fase hexagonal ordenada. Figuras tomadas de la referencia [7].

de las partículas, al estar directamente relacionado con la velocidad a la que los granos ganan energía como consecuencia de la vibración.

En ausencia de una tapa que confine verticalmente el sistema, si la amplitud de la vibración no es muy grande, las partículas no alcanzan suficiente altura para pasar unas sobre otras y el sistema presenta un comportamiento casi bidimensional. En estos sistemas, para densidades bajas las colisiones entre partículas no son suficientes como para que la energía transferida a los grados de libertad horizontales supere a la disipada por fricción con la superficie, de modo que el sistema no muestra ningún movimiento horizontal relevante. Si la densidad es suficiente como para que no se dé este efecto y para aceleraciones altas, el sistema se comporta como un gas, mostrando las partículas un movimiento errático. Para frecuencias bajas, a medida que se disminuye la aceleración empiezan a aparecer pequeños agregados de unas pocas partículas de diámetro que se disuelven en cuestión de un cierto tiempo. Al continuar reduciendo la aceleración, los agregados empiezan a aumentar de tamaño, volviéndose estables y agrupándose en uno estacionario mayor, que coexiste con un gas formado por partículas con mayor energía cinética, siendo la transición semejante a la de condensación que se observa para sistemas mole-

culares elásticos en equilibrio. En esta fase, denominada de colapso, las partículas del agregado están ordenadas hexagonalmente, y se encuentran prácticamente en contacto continuo entre ellas y con la base. Esta configuración es posible gracias a la biestabilidad que surge de la interacción partícula-superficie de manera que, en esta situación, los granos pueden mantenerse en reposo sobre la superficie, como pasa en la zona ordenada, o rebotar periódicamente, como en el gas. Para fracciones de llenado superiores y a frecuencias altas, aparece al variar la aceleración de la vibración otra fase ordenada entre la gaseosa y la de colapso, en la que las partículas también se ordenan con una disposición hexagonal monocapa, pero en este caso el cambio afecta a todo el sistema, eliminándose la coexistencia de fases. Además, las partículas se encuentran continuamente en movimiento con respecto a la superficie (figura 2.4) [7].

Para aceleraciones pequeñas comparadas con la gravedad, la distribución de velocidades horizontal de las partículas, al escalarla con una velocidad característica $v_0 \equiv (2\langle v^2 \rangle/m)^{1/2}$, donde $\langle v^2 \rangle$ es el segundo momento, muestra el mismo comportamiento en todas las fases con desviaciones respecto a la distribución de Maxwell-Boltzmann. Por otra parte, se observa una clara diferencia entre las energías cinéticas asociadas al movimiento vertical y horizontal, estando esta última relacionada con el inverso de la densidad [23]. En comparación, estas distribuciones están más pobladas para velocidades bajas, y presentan colas proporcionales a $\exp(-|v|^{3/2})$ pero, al aumentar la aceleración del vibrado, se encuentra que la distribución se acerca suavemente a la de Maxwell-Boltzmann a la vez que desaparece la anisotropía en las temperaturas. La función de correlación de pares del sistema muestra más variación en las distintas fases al dar cuenta de los efectos de orden, aunque cabe señalar que en la fase gaseosa encontramos que la distribución es muy parecida a la de un sistema bidimensional de esferas duras en equilibrio, donde las correlaciones se deben únicamente a factores geométricos por exclusión de volumen. A bajas aceleraciones, cuando aparecen las fases ordenadas, la estructura de la función da cuenta de ellas, aumentando su estructura. Si se aumenta la aceleración de vibrado muy por encima de la aceleración de la gravedad, la función de correlación pierde su estructura y cambia a un comportamiento tridimensional, como puede apreciarse en el aumento de ésta para $r < \sigma$ en la figura 2.5. Esto se debe a que, al poder alcanzar alturas mayores, pueden producirse colisiones más ver-

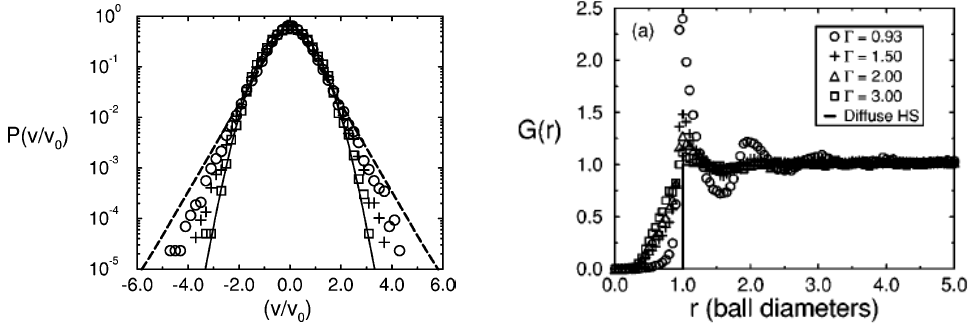


FIGURA 2.5: Distribución de velocidades (izquierda) y función de correlación de pares (derecha) para una submonocapa vibrada verticalmente para distintos valores de la aceleración, la leyenda coincide para ambas. Figuras tomadas de la referencia [23].

tales entre las partículas y también a una reducción de la densidad bidimensional efectiva del sistema.

Para eliminar en la medida de lo posible los complicados efectos introducidos por la acción de la gravedad sobre las partículas, en muchos experimentos se limita la altura del sistema confinándolo con una tapa superior. Si se sitúa ésta de modo que se encuentre separada de la base una distancia menor que dos veces el diámetro de las partículas, se tiene lo que se denomina un sistema confinado en una geometría casi bidimensional. Para amplitudes de vibración pequeñas, el sistema se comporta como en el caso sin tapa superior, pero en esta configuración podemos aumentar la fuerza del vibrado sin perder el comportamiento bidimensional efectivo, dando lugar a un mayor número de fases (figura 2.6) [24].

En los sistemas confinados superiormente, a bajas aceleraciones de vibración, se observa un colapso con las partículas densamente empaquetadas y en reposo como en la configuración sin tapa e, igualmente, al ir aumentando la intensidad de vibración, las partículas se reordenan en una monocapa hexagonal salvo que ahora ocurre a frecuencias mucho más bajas. Esta diferencia se debe a que, en ausencia de confinamiento, al aumentar la frecuencia a aceleración constante las partículas consiguen alturas máximas menores, siendo el comportamiento más semejante al de un gas bidimensional. Al seguir aumentando la aceleración del vibrado, el sistema alcanza un estado fluido y homogéneo, para un gran rango de frecuencias y empaquetamien-

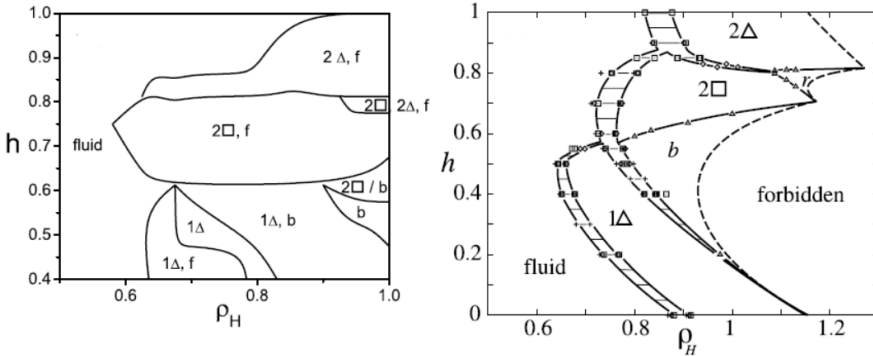


FIGURA 2.6: Izquierda: Diagrama de fases para un gas granular confinado casi bidimensional vibrado verticalmente en función de la fracción de llenado y la altura reducida. Derecha: Diagrama de fases para un coloide de esferas duras en equilibrio. Figuras tomadas de la referencia [24].

tos, hasta que empiezan a aparecer pequeños agregados de breve duración. Éstos terminan generando una fase estacionaria, formada por una bicapa de partículas ordenadas con simetría cuadrada que vibran, rodeada de un gas con mayor temperatura. Aparece también una fase denominada *buckling* a densidades muy altas en la que las partículas se ordenan en zig-zag. Para diferentes valores de la fracción de llenado, y variando la altura reducida o la aceleración adimensional, las distintas fases aparecen coexistiendo entre ellas o con los agregados ordenados en una o dos capas (figura 2.7), teniendo estos siempre una energía cinética mucho menor que el gas circundante [24].

El diagrama de fases de este sistema guarda cierto parecido con el de los sistemas coloidales de esferas duras en equilibrio para densidades y confinados semejantes (Figura 2.6). Por ejemplo, en los coloides también aparece la fase de bicapa cuadrada, en este caso debido a que en estos sistemas maximizar la entropía es equivalente a maximizar el volumen libre, lo que se consigue con esta configuración. La principal diferencia entre ambos diagramas son las amplias zonas de coexistencia de fases en el caso de la submonocapa. Ésta se debe a que en el sistema granular las zonas más densas disipan energía más rápidamente, comprimiéndose así más los patrones que en el sistema coloidal y por tanto requiriendo un mayor aumento de la densidad general del experimento para que la fase pueda abarcar todo el sis-

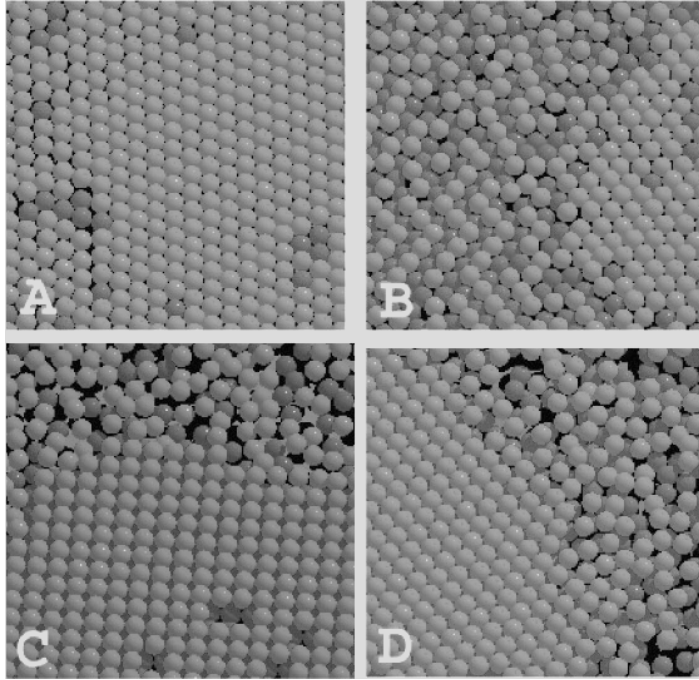


FIGURA 2.7: Imágenes obtenidas mediante simulación de distintas fases que aparecen en las submonocapas confinadas vibradas verticalmente. (A) Hexagonal monocapa. (B) Hexagonal bicapa en coexistencia con *buckling*. (C) Cuadrada bicapa en coexistencia con gas. (D) Hexagonal bicapa en coexistencia con gas. Figuras tomadas de la referencia [24].

tema.

La distribución de velocidades para la monocapa confinada también es típicamente no maxwelliana, además de presentar diferencias entre las temperaturas en las diferentes direcciones como en el sistema sin confinar, aunque en este caso no se observa la transición a la distribución de Maxwell para amplitudes de vibración altas, aunque se observa que la distribución se termina volviendo independiente de ésta. Como en el caso no confinado, tenemos que la energía de la fase ordenada es mucho menor que la del gas y que la energía asociada al movimiento vertical es superior a la horizontal, salvo que aquí el resultado no se limita a amplitudes de vibración pequeñas.

La estructura de la función de correlación de pares en este caso es, salvo en las situaciones cercanas al colapso, prácticamente indis-

tinguible de la de un gas bidimensional de discos duros con la misma densidad en el plano, lo que indica que las correlaciones se deben únicamente a efectos de exclusión de volumen entre partículas. Al igual que la distribución de velocidades, la función de correlación de pares se vuelve independiente de la aceleración del vibrado para valores altos de ésta, mostrando una mayor estructura cuando se forman los agregados, como en el sistema no confinado.

Podemos concluir que los medios granulares en general muestran una gran variedad de comportamientos, yendo desde su comportamiento semejante al de sólidos o fluidos moleculares hasta los fenómenos particulares como los atascos o formación de patrones. En esta línea es interesante notar como, a pesar de su aparente simplicidad, un medio granular consistente en un conjunto de esferas idénticas, no cohesivas y secas, puede mostrar una gran variedad de fases y comportamientos, para las que no existe un modelo matemático consistente hasta la fecha.

Capítulo 3

Modelo colisional efectivo y estado homogéneo

3.1 Descripción del modelo

En este capítulo planteamos las bases teóricas para nuestro estudio del gas granular vibrado confinado casi bidimensionalmente. Como modelo para el medio granular utilizamos un sistema de esferas duras idénticas de masa m y diámetro σ , no cohesivas y con un coeficiente de restitución normal α , de modo que el resultado de la colisión entre partículas viene caracterizado por la conservación de la cantidad de movimiento y la relación

$$\mathbf{v}'_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\alpha \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (3.1)$$

En esta expresión, que no es más que la definición del coeficiente de restitución normal α , que puede tomar valores entre 0 y 1 correspondiendo este último al caso elástico, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ es el vector unitario que apunta del centro de la partícula 2 al de la 1 cuando éstas se encuentran en contacto, y \mathbf{v}_{12} y \mathbf{v}'_{12} son las velocidades relativas antes y después de la colisión respectivamente. En la figura 3.1 se representa esquemáticamente la descripción de una colisión.

La definición a efectos de la colisión es equivalente a:

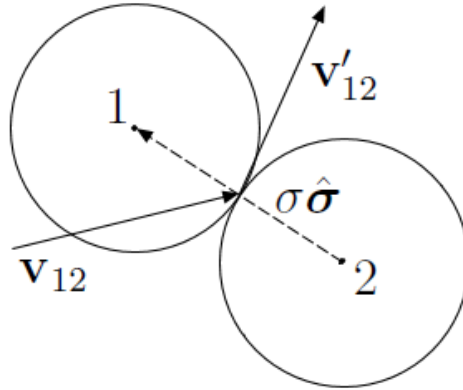


FIGURA 3.1: Colisión inelástica entre partículas idénticas con la ley de reflexión dada en (3.1).

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &\rightarrow \mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 - \frac{1+\alpha}{2}(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \\ \mathbf{v}_2 &\rightarrow \mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_2 + \frac{1+\alpha}{2}(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

A partir de aquí, se obtiene fácilmente que la variación de energía cinética Δe en una colisión viene dada por

$$\Delta e = -m \frac{1-\alpha^2}{4} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2, \quad (3.3)$$

donde podemos ver que para $0 \leq \alpha < 1$ esta variación es negativa. Por lo tanto, es necesario inyectar energía al sistema para obtener un estado estacionario no trivial, y tenemos que estudiar cómo afecta a las partículas el método de inyección de energía que usemos. Un primer ejemplo de modelo teórico de inyección de energía en un sistema de este tipo es el termostato estocástico, propuesto por Williams y MacKintosh [25], donde las partículas son calentadas uniformemente por un baño estocástico que actúa de forma independiente sobre cada una. Con este método de inyección, se ve que el sistema alcanza un estado estacionario en el que surgen espontáneamente zonas más densas que, en general, desaparecen paulatinamente [26–28]. Aunque el modelo resulta relevante teóricamente al permitirnos estudiar las propiedades

del sistema en un estado estacionario de no equilibrio, tiene el inconveniente de que no conserva la cantidad de movimiento, y, además, es difícil de relacionar con los estudios experimentales. Centrándonos en los sistemas vibrados confinados casi-bidimensionalmente, la transmisión de energía de los grados de libertad paralelos a la vibración a los perpendiculares ocurre a través de las colisiones entre partículas. Basándose en ello se ha formulado otro modelo [29] en el que, para un sistema de partículas que interactúan según (3.2), se considera el coeficiente de restitución normal como una variable aleatoria, pudiendo tomar valores superiores a 1. De esta forma vemos en (3.3) que se puede ganar energía en las colisiones, además de que si, promediando sobre la distribución de valores de α , se cumple $\overline{\alpha^2} = 1$, el valor medio de la energía se mantiene constante. Con este modelo, sin embargo, el sistema carece de una escala intrínseca de energía, y la energía total del sistema se comporta como un caminante aleatorio, de modo que no se alcanza un estado estacionario.

En general, si queremos una regla de colisión efectiva que introduzca el efecto de la vibración directamente en las colisiones, ésta debe reproducir lo más fielmente posible la dinámica del sistema en el plano perpendicular al vibrado, eliminando además las variables paralelas a éste. Separando en la regla de colisión (3.2) los grados de libertad perpendiculares a la dirección del vibrado y los paralelos para la partícula 1, obtenemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}'_{1\perp} &= \mathbf{v}_{1\perp} - \frac{1+\alpha}{2}(1-\sigma_{\parallel}^2)(\mathbf{v}_{12\perp} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp})\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp} - \frac{1+\alpha}{2}\sqrt{1-\sigma_{\parallel}^2}(\mathbf{v}_{12\parallel}\sigma_{\parallel})\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp}, \\ v'_{1\parallel} &= v_{1\parallel} - \frac{1+\alpha}{2}\sigma_{\parallel}^2 v_{12\parallel} - \frac{1+\alpha}{2}\sqrt{1-\sigma_{\parallel}^2}(\mathbf{v}_{12\perp} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp})\sigma_{\parallel}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde σ_{\perp} y σ_{\parallel} son las componentes de $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ perpendicular y paralela a la dirección del vibrado, cumpliéndose que $\sigma_{\perp}^2 + \sigma_{\parallel}^2 = 1$. En la regla de colisión para las distintas direcciones los dos primeros términos son el análogo, en dimensión menor, a la regla de colisión (3.2) con la diferencia de los factores que dependen de σ_{\parallel}^2 en el segundo. El tercer término es el que corresponde a la transferencia de momento entre la dirección paralela al vibrado y la perpendicular que, como es lógico, se anula para colisiones totalmente paralelas u ortogonales al vibrado. El modelo en el que basamos nuestro estudio, propuesto por Brito et al. [11], propone la regla de colisión efectiva:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}'_{1\perp} &= \mathbf{v}_{1\perp} - \frac{1+\alpha}{2}(\mathbf{v}_{12\perp} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp})\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp} + \Delta\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp}, \\ \mathbf{v}'_{2\perp} &= \mathbf{v}_{2\perp} + \frac{1+\alpha}{2}(\mathbf{v}_{12\perp} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp})\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp} - \Delta\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\perp},\end{aligned}\quad (3.5)$$

siendo Δ un parámetro positivo con dimensiones de velocidad. Comparando con (3.4) vemos que, a diferencia de en el modelo del coeficiente de restitución aleatorio, en este caso aparecen tanto los términos de colisión habituales como el término de transmisión de energía a los grados de libertad perpendiculares. En estos términos las variables asociadas a la dirección de vibración, σ_{\parallel} y $v_{12\parallel}$, son sustituidas por el parámetro efectivo Δ , que está asociado con la inyección de energía. La validez de esta aproximación es difícil de justificar a priori, aunque el hecho de que el modelo se formule como un modelo colisional efectivo lo hacen atractivo y apropiado para su estudio teórico mediante técnicas de mecánica estadística de no equilibrio y teoría cinética.

Con la regla de colisión (3.5), en la que a partir de ahora obviamos el subíndice \perp al restringirnos en lo que sigue al movimiento en el plano, se tiene

$$\mathbf{v}'_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\alpha\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + 2\Delta, \quad (3.6)$$

de forma que la velocidad relativa de dos partículas que chocan siempre aumenta en 2Δ en la dirección de la colisión con relación al caso puramente inelástico (sin inyección de energía). Por otra parte, la variación de energía en una colisión viene dada por

$$\Delta e = m \left[\Delta^2 - \alpha\Delta\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{1-\alpha^2}{4}(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 \right]. \quad (3.7)$$

Puede verse que, con esta regla de colisión, el sistema gana energía en aquellas colisiones con $\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} < 2\Delta/(1-\alpha)$, perdiéndola en caso contrario. De este modo es posible alcanzar un estado estacionario.

3.2 Ecuación de Liouville

En esta sección nos centramos en presentar la formulación de Liouville [30] para la dinámica de un sistema de esferas duras e inelásticas que interactúan según la regla de colisión (3.5). Como la condición

para que se dé una colisión entre esferas duras, esto es, la identificación del cilindro de colisión, es la misma independientemente de la regla de colisión entre las partículas siempre y cuando la interacción sea de tipo esfera dura, tenemos que el generador de la dinámica de un punto del espacio fásico del sistema compuesto por N partículas $\Gamma \equiv \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$, con $\mathbf{x}_i = \{\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i\}$, es el mismo que para un sistema de partículas elásticas [31, 32]. De este modo, la evolución de una función del espacio fásico $A(\Gamma)$ viene dada por:

$$A(\Gamma, t) \equiv A(\Gamma(t)) \equiv \exp^{tL_+(\Gamma)} A(\Gamma), \quad (3.8)$$

donde el sistema se encuentra inicialmente en el punto Γ . El generador de la dinámica, L_+ , para un sistema de N esferas duras y lisas en d (2 ó 3) dimensiones tiene la forma:

$$L_+(\Gamma) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} T_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), \quad (3.9)$$

con

$$T_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sigma^{d-1} \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) [b_{\boldsymbol{\sigma}}(i, j) - 1]. \quad (3.10)$$

Aquí, $\theta(x)$ es la función escalón de Heaviside, que vale 1 cuando el argumento es positivo o nulo y 0 en otro caso, y $b_{\boldsymbol{\sigma}}(i, j)$ es un operador que sustituye las velocidades de las partículas i y j por sus valores postcolisionales, dados en nuestro caso por (3.5), y es el único punto donde aparecen los detalles de la regla de colisión. En el operador (3.9), el primer término corresponde al movimiento libre de las partículas, mientras que el segundo, donde aparece el operador de colisión $T_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, describe las interacciones binarias entre ellas. Aunque esto nos da la evolución general del sistema a partir de una configuración dada, físicamente es necesario introducir una función $W(\{\mathbf{r}_i\})$ de modo que entre los estados iniciales no se incluyan configuraciones físicamente imposibles, en que las partículas se solapen. Esta función se define entonces como:

$$W(\{\mathbf{r}_i\}) = \prod_{1 \leq i < j \leq N} \theta(r_{ij} - \sigma), \quad (3.11)$$

de forma que solo tenemos que considerar:

$$A(\Gamma, t) \equiv W(\{\mathbf{r}_i\}) \exp^{tL_+(\Gamma)} A(\Gamma). \quad (3.12)$$

En general, a partir de la función de distribución del sistema de N partículas $\rho(\Gamma)$, el valor medio de una función del espacio fásico se obtiene mediante:

$$\langle A(t) \rangle = \int d\Gamma \rho(\Gamma) A(\Gamma, t) = \int d\Gamma \rho(\Gamma) W(\{\mathbf{r}_i\}) \exp^{tL_+(\Gamma)} A(\Gamma). \quad (3.13)$$

Aquí la dependencia temporal se encuentra en la función $A(\Gamma, t)$. Es conveniente hacer que la dependencia temporal se encuentre en la función de distribución definiendo otro generador $\bar{L}_+(\Gamma)$ que cumpla:

$$\int d\Gamma B(\Gamma) W(\{\mathbf{r}_i\}) L_+(\Gamma) A(\Gamma) = \int d\Gamma [\bar{L}_+(\Gamma) B(\Gamma) W(\{\mathbf{r}_i\})] A(\Gamma). \quad (3.14)$$

Para funciones arbitrarias $A(\Gamma)$ y $B(\Gamma)$. En el Apéndice A se describen los detalles que llevan a identificar este operador como

$$\bar{L}_+(\Gamma) = - \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \bar{T}_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), \quad (3.15)$$

donde ahora aparece el operador de colisión adjunto

$$\begin{aligned} \bar{T}_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = & \sigma^{d-1} \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} [\theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta) |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta| \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \times \\ & \times \alpha^{-2} b_{\sigma}^{-1}(i, j) - \theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \delta(\mathbf{r}_{ij} + \hat{\boldsymbol{\sigma}})]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Aquí $b_{\sigma}^{-1}(i, j)$ es el operador inverso de $b_{\sigma}(i, j)$ y sustituye las velocidades \mathbf{v}_i y \mathbf{v}_j por sus valores precolisionales, \mathbf{v}_i^* y \mathbf{v}_j^* :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i \rightarrow \mathbf{v}_i^* &= \mathbf{v}_i - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\Delta}{\alpha} \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \\ \mathbf{v}_j \rightarrow \mathbf{v}_j^* &= \mathbf{v}_j + \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{\Delta}{\alpha} \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Con este nuevo operador podemos pasar la dependencia temporal a la densidad de probabilidad

$$\begin{aligned}
\langle A(t) \rangle &= \int d\Gamma \rho(\Gamma) W(\{\mathbf{r}_i\}) \exp^{tL_+(\Gamma)} A(\Gamma) = \\
&= \int d\Gamma [\exp^{t\bar{L}_+(\Gamma)} \rho(\Gamma) W(\{\mathbf{r}_i\})] A(\Gamma) = \\
&= \int d\Gamma \rho(\Gamma, t) A(\Gamma). \tag{3.18}
\end{aligned}$$

En general, trabajando con esta expresión, podemos obviar la función $W(\{\mathbf{r}_i\})$ y considerarla introducida en la densidad de probabilidad inicial de modo que identificamos:

$$\rho(\Gamma, t) = \exp^{t\bar{L}_+(\Gamma)} \rho(\Gamma). \tag{3.19}$$

Derivando con respecto al tiempo, tenemos que la función de distribución del espacio fásico obedece la ecuación de pseudo-Liouville:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \bar{L}_+(\Gamma) \right] \rho(\Gamma, t) = 0. \tag{3.20}$$

A continuación pasaremos a una descripción en términos de funciones de distribución reducidas. Definimos f_l ($l = 1, \dots, N-1$) como:

$$f_l(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_l, t) = \frac{N!}{(N-l)!} \int d\mathbf{x}_{l+1} \dots d\mathbf{x}_N \rho(\Gamma, t). \tag{3.21}$$

A partir de la integración de las variables $\{\mathbf{x}_{l+1}, \dots, \mathbf{x}_N\}$ en la ecuación de evolución (3.19) obtenemos la jerarquía de ecuaciones BBGKY [33–35]:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\partial}{\partial t} - \bar{L}_+(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_l) \right] f_l(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_l, t) = \\
= \sum_{i=1}^l \int d\mathbf{x}_{l+1} \bar{T}_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_{l+1}) f_{l+1}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{l+1}, t). \tag{3.22}
\end{aligned}$$

La primera ecuación de esta jerarquía es

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \right] f_1(\mathbf{x}_1, t) = \int d\mathbf{x}_2 \bar{T}_+(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) f_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t). \tag{3.23}$$

Para obtener una ecuación cerrada para $f_1(\mathbf{x}_1, t)$ necesitamos una expresión que relacione $f_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ con ella. La aproximación más habitual es despreciar las correlaciones de velocidad entre dos partículas en el instante anterior a la colisión, lo que se conoce como hipótesis de "caos molecular" [36]. El hecho de que solo haya que tener en cuenta la contribución precolisional se puede apreciar reescribiendo el operador de colisión adjunto (3.16) como:

$$\begin{aligned} \bar{T}_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = & \sigma^{d-1} \int d\hat{\sigma} \delta(\mathbf{r}_{ij} - \boldsymbol{\sigma}) [|\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma} - 2\Delta|\alpha^2 b_{\sigma}^{-1}(i, j) - \\ & - |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}|] \Theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}), \end{aligned} \quad (3.24)$$

donde se ha utilizado que

$$\theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma} - 2\Delta) b_{\sigma}^{-1}(i, j) = b_{\sigma}^{-1}(i, j) \theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}), \quad (3.25)$$

resultado que se obtiene directamente de la acción del operador $b_{\sigma}^{-1}(i, j)$. En esta expresión se observa como, debido al factor $\delta(\mathbf{r}_{ij} - \boldsymbol{\sigma}) \Theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma})$ que aparece, solo es relevante la información anterior a la colisión. Con esto, en la teoría revisada de Enskog, para cerrar la ecuación para $f_1(\mathbf{x}_1, t)$ se utiliza la aproximación [37, 38]:

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{r}_{ij} - \boldsymbol{\sigma}) \Theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}) f_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) \approx & \delta(\mathbf{r}_{ij} - \boldsymbol{\sigma}) \Theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}) \times \\ & \times g_E[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | n(\mathbf{r}, t)] f_1(\mathbf{x}_1, t) f_1(\mathbf{x}_2, t), \end{aligned} \quad (3.26)$$

siendo g_E es la función de correlación de pares en equilibrio, que puede ser determinada en términos de la funcional de energía libre para un estado inhomogéneo [39], y $n(\mathbf{r}, t)$ el campo de densidad de no equilibrio en el instante t [40]. Introduciendo (3.26) en (3.23) obtenemos la ecuación de Enskog [41, 42]:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \right] f_1(\mathbf{x}_1, t) = & \int d\mathbf{x}_2 \bar{T}_+(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \times \\ & \times g_E[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | n(t)] f_1(\mathbf{x}_1, t) f_1(\mathbf{x}_2, t). \end{aligned} \quad (3.27)$$

3.3 Estado estacionario homogéneo

Una vez hemos obtenido la ecuación de Enskog (3.27), vamos a analizar si dicha ecuación predice la existencia de un estado estacionario homogéneo y cuales son sus propiedades en caso de existir. Comenzamos definiendo las variables adimensionales

$$\mathbf{q}_i \equiv \frac{\mathbf{r}_i}{\ell}, \quad \boldsymbol{\omega}_i \equiv \frac{\mathbf{v}_i}{\Delta}, \quad \tau \equiv \frac{\Delta}{\ell} t, \quad (3.28)$$

donde $\ell \equiv (n\sigma^{d-1})^{-1}$, siendo $n = N/V$ la densidad media del sistema. De este modo pasamos a trabajar en el espacio fásico $\tilde{\Gamma} \equiv \{\tilde{\mathbf{x}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_N\}$, con $\tilde{\mathbf{x}}_i \equiv \{\mathbf{q}_i, \boldsymbol{\omega}_i\}$. La función de distribución en el espacio fásico escalado se relaciona con la anterior mediante

$$\tilde{\rho}(\tilde{\Gamma}, \tau) = (\ell\Delta)^{dN} \rho(\Gamma, t), \quad (3.29)$$

y su ecuación de evolución podemos reescribirla como

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau} - \tilde{L}_+(\tilde{\Gamma}) \right] \tilde{\rho}(\tilde{\Gamma}, t) = 0. \quad (3.30)$$

Ahora el pseudo-operador de Liouville viene dado por

$$\tilde{L}_+(\tilde{\Gamma}) = - \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\omega}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_i} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \tilde{T}_+(\tilde{\mathbf{x}}_i, \tilde{\mathbf{x}}_j), \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \tilde{T}_+(\tilde{\mathbf{x}}_i, \tilde{\mathbf{x}}_j) = & \tilde{\sigma}^{d-1} \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} [\theta(\boldsymbol{\omega}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2) |\boldsymbol{\omega}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2| \delta(\mathbf{q}_{ij} - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) \times \\ & \times \alpha^{-2} b_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(i, j) - \theta(\boldsymbol{\omega}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\boldsymbol{\omega}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \delta(\mathbf{q}_{ij} + \tilde{\boldsymbol{\sigma}})]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Nótese que la regla de colisión no cambia con el escalamiento. Con esto hemos eliminado toda la dependencia en Δ de las ecuaciones, de modo que en un posible estado estacionario, la dependencia respecto de este parámetro del valor medio de una función homogénea de grado a de la velocidad viene dada por

$$\langle A(\{\mathbf{v}_i\}) \rangle_{st} = \langle A(\{\Delta \boldsymbol{\omega}_i\}) \rangle_{st} = \Delta^a \langle A(\{\boldsymbol{\omega}_i\}) \rangle_{st}. \quad (3.33)$$

En un estado homogéneo el campo de densidad vale n en todos los puntos y, al ser un estado traslacionalmente invariante, podemos

suponer que estamos en un sistema de referencia en el que el campo de velocidades es nulo. Finalmente, la temperatura está dada por:

$$\begin{aligned} \frac{dNT_s}{2} &= \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{m\mathbf{v}_i^2}{2} \right\rangle = \Delta^2 \sum_{i=1}^N \int d\tilde{\Gamma} \frac{m\omega_i^2}{2} \tilde{\rho}_s(\tilde{\Gamma}) = \\ &= \frac{m\Delta^2}{\tilde{n}d} \int d\omega_1 \omega_1^2 \tilde{f}_{1,s}(\omega_1), \end{aligned} \quad (3.34)$$

donde $\tilde{n} \equiv n\ell^d$, $\tilde{\rho}_s(\tilde{\Gamma})$ es la función de distribución adimensional del sistema en el estado estacionario. Las funciones de distribución reducidas se definen a partir de ρ_N como en la ecuación (3.22), salvo que utilizando las variables fásicas adimensionales. Por otra parte, vemos que T_{st}/Δ^2 es una función únicamente de α , de acuerdo al escalamiento del sistema realizado anteriormente. Para el valor medio de $\Delta^2 \sum_{i=1}^N \frac{m\omega_i^2}{2}$ tenemos a partir de (3.30) que en el estado estacionario:

$$\sum_{i=1}^N \int d\tilde{\Gamma} \frac{m\omega_i^2}{2} \tilde{L}_+(\tilde{\Gamma}) \tilde{\rho}_s(\tilde{\Gamma}) = 0, \quad (3.35)$$

lo cual, despreciando efectos de contorno, es equivalente para un estado homogéneo a

$$\int d\tilde{\mathbf{x}}_1 \int d\tilde{\mathbf{x}}_2 \left\{ \tilde{T}_+(\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2) \left[\frac{m}{2} (\omega_1^2 + \omega_2^2) \right] \right\} \tilde{f}_{2,s}(\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2) = 0, \quad (3.36)$$

donde

$$\tilde{T}_+(\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2) = \tilde{\sigma}^{d-1} \int d\hat{\sigma} \theta(-\omega_{ij} \cdot \hat{\sigma}) |\omega_{ij} \cdot \hat{\sigma}| \delta(\mathbf{q}_{12} - \tilde{\sigma}) [b_\sigma(1, 2) - 1]. \quad (3.37)$$

Utilizando la aproximación de Enskog en la ecuación (3.36), definiendo

$$\phi(\omega) = \tilde{f}_{1,s}(\tilde{\mathbf{x}})/\tilde{n}, \quad (3.38)$$

y realizando las integrales angulares en $\hat{\sigma}$, resulta

$$\int d\omega_1 \int d\omega_2 \left[\frac{\omega_{12}}{\Gamma \left(\frac{d+1}{2} \right)} + \frac{\pi^{1/2} \alpha \omega_{12}^2}{2\Gamma \left(\frac{d+2}{2} \right)} - \frac{(1-\alpha^2)\omega_{12}^3}{4\Gamma \left(\frac{d+3}{2} \right)} \right] \phi(\omega_1) \phi(\omega_2) = 0. \quad (3.39)$$

Para continuar nuestro estudio, tenemos que proponer una forma funcional para $\phi(\omega)$ a fin de realizar las integrales. Definimos la velocidad térmica estacionaria en unidades de Δ como $\omega_0 \equiv \sqrt{\frac{2T_{st}}{m\Delta^2}}$ y escalamos con ésta la función de distribución, obteniendo

$$\varphi(c) = \omega_0^d \phi(c\omega_0), \quad (3.40)$$

donde $\mathbf{c} = \mathbf{v}/v_{0,st}$, con $v_{0,st} = \sqrt{\frac{2T_{st}}{m}}$, es la velocidad en unidades de la velocidad térmica estacionaria. Tanto en sistemas granulares aislados como excitados se ha visto que, en ciertas condiciones, la función de distribución $\varphi(c)$ no difiere mucho de la distribución gaussiana [43–46]. Suponemos que ésto sigue aplicándose en el estado estacionario de nuestro sistema. Se trata de una aproximación que tendremos que comprobar posteriormente a partir de los resultados que obtengamos. Proponemos entonces un desarrollo de la función de distribución en polinomios de Sonine $S^{(j)}(x)$, relacionados con los polinomios generalizados de Laguerre mediante la relación $S^{(j)}(x) = L_j^{d/2-1}(x)$ [47]. Así pues, escribimos:

$$\varphi(c) = \varphi^{(0)}(c) \sum_{j=0}^{\infty} a_j S^{(j)}(c^2), \quad (3.41)$$

con

$$\varphi^{(0)}(c) = \pi^{-d/2} e^{-c^2}. \quad (3.42)$$

Los polinomios de Sonine pueden escribirse en la forma [48]

$$S^{(j)}(x) = \sum_{r=0}^j \frac{\Gamma(j+d/2)}{(j-r)!r!\Gamma(r+d/2)} (-x)^r, \quad (3.43)$$

y cumplen la relación de ortonormalidad

$$\int d\mathbf{c} \varphi^{(0)}(c) S^{(j)}(c^2) S^{(j')}(c^2) = \frac{\Gamma(j+d/2)}{\Gamma(d/2)j!} \delta_{j,j'}. \quad (3.44)$$

Por la condición de normalización de la función de distribución tenemos que ha de ser $a_0 = 1$, y por la definición de la temperatura ha de ser

$$\langle c^2 \rangle = \int d\mathbf{c} c^2 \phi(c) = \frac{d}{2}, \quad (3.45)$$

lo que lleva a que $a_1 = 0$. De este modo el primer coeficiente del desarrollo que no está identificado es a_2 . Este coeficiente está relacionado con el cuarto momento de la distribución mediante:

$$a_2 \equiv \frac{4\langle c^4 \rangle}{d(d+2)} - 1, \quad \langle c^4 \rangle = \int dc c^4 \phi(c). \quad (3.46)$$

Cortando en éste término el desarrollo en polinomios. Utilizamos en lo que sigue para la distribución de velocidades escalada la llamada primera aproximación de Sonine:

$$\varphi(c) \approx \varphi^{(0)}[1 + a_2 S^{(2)}(c^2)]. \quad (3.47)$$

Al haber eliminado toda dependencia explícita de Δ en la ecuación (3.39) tenemos que a_2 no puede depender de este parámetro, de modo que para el estado estacionario el valor de dicho coeficiente es una función únicamente de α . Suponemos en lo que sigue que $|a_2| \ll 1$, de modo que en los cálculos despreciamos los términos no lineales en a_2 . Hay que tener en cuenta que esta hipótesis tampoco es justificable a priori, y tendrá que comprobarse su consistencia al obtener los resultados. Con estas aproximaciones, puede realizarse la integral en la expresión (3.39) obteniendo:

$$\frac{1 - \alpha^2}{2} \left(1 + \frac{3a_2}{16}\right) \omega_0^2 - \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \alpha \omega_0 - 1 + \frac{a_2}{16} = 0. \quad (3.48)$$

A partir de aquí, podemos expresar ω_0 en función de a_2 y α . Reteniendo solo con los términos lineales en a_2 se llega a

$$\omega_0 \approx \frac{\pi^{1/2} \alpha}{2^{1/2}(1 - \alpha^2)} [A(\alpha) + a_2(\alpha)B(\alpha)], \quad (3.49)$$

con

$$A(\alpha) = 1 + \left[\frac{4 - (4 - \pi)\alpha^2}{\pi\alpha^2} \right]^{1/2} \quad (3.50)$$

y

$$B(\alpha) = -\frac{8(1 - \alpha^2) + 3\pi\alpha^2}{16\alpha} \left\{ \frac{1}{[4 - (4 - \pi)\alpha^2]\pi} \right\}^{1/2} - \frac{3}{16}. \quad (3.51)$$

Hace falta otra expresión que relacione ω_0 y a_2 para poder despejar ambas incógnitas. Para encontrar esta relación operamos de

forma similar a como hemos encontrado la expresión para ω_0 . La ecuación de Enskog para el estado estacionario homogéneo toma la forma:

$$\int d\omega_2 \int d\hat{\sigma} [\theta(\omega_{12} \cdot \hat{\sigma} - 2)(\omega_{12} \cdot \hat{\sigma} - 2)\alpha^{-2}b_{\sigma}(1, 2) - \theta(\omega_{12} \cdot \hat{\sigma})(\omega_{12} \cdot \hat{\sigma})] \phi(\omega_1)\phi(\omega_2) = 0. \quad (3.52)$$

Multiplicando esta ecuación por ω_1^4 e integrando para ω_1 resulta:

$$\int d\omega_1 \int d\omega_2 \int d\hat{\sigma} \phi(\omega_1)\phi(\omega_2)\theta(-\omega_{12} \cdot \hat{\sigma}) \times |\omega_{12} \cdot \hat{\sigma}| [b_{\sigma}(1, 2) - 1](\omega_1^4 + \omega_2^4) = 0. \quad (3.53)$$

Las integrales que aparecen en esta ecuación, se calculan utilizando de nuevo la primera aproximación de Sonine para la función de distribución de velocidades y despreciando los términos no lineales en a_2 . Con esto, tras unos cálculos directos pero tediosos, se obtiene una ecuación, lineal en a_2 y con diferentes potencias de ω_0 , que omitimos debido a su complejidad y a que aporta poco al desarrollo teórico. Sustituyendo la expresión que tenemos para ω_0 en la ecuación y despreciando siempre los términos no lineales en a_2 , se obtiene una expresión para $a_2(\alpha)$, la cual introducimos en (3.49) para obtener una expresión de ω_0 como función de α [49]. El resultado obtenido es matemáticamente complicado y poco puede apreciarse en la expresión completa de a_2 , de modo que únicamente presentamos su desarrollo hasta tercer orden en términos de $1 - \alpha^2$, válido para pequeñas inelasticidades:

$$a_2(\alpha) \approx p_1(1 - \alpha^2) + p_2(1 - \alpha^2)^2 + p_3(1 - \alpha^2)^3, \quad (3.54)$$

donde los coeficientes vienen dados por:

$$p_1 = -\frac{1}{4(d-1)}, \quad (3.55)$$

$$p_2 = \frac{-24 + d(24 - 7\pi) + 13\pi}{32(d-1)^2\pi}, \quad (3.56)$$

$$p_3 = \frac{-384 + 164\pi - 49\pi^2 + 2d(384 - 130\pi + \pi^2)}{256(d-1)^3\pi^2} + \frac{d^2(-384 + 96\pi + 11\pi^2)}{256(d-1)^3\pi^2}. \quad (3.57)$$

Las ecuaciones 3.49 y 3.54 proporcionan una expresión explícita para la temperatura estacionaria en el límite de bajas inelasticidades. Para valores pequeños de α , hay que utilizar la expresión completa de $a_2(\alpha)$ obtenida mediante el procedimiento indicado arriba.

3.4 Simulaciones

Para contrastar los resultados obtenidos realizamos simulaciones del sistema efectivo en dos dimensiones, con la regla de colisión (3.5), mediante el método desarrollado por Bird de simulación directa de Monte Carlo (DSMC) [50,51]. El método reproduce la dinámica de un gas diluido descrito por la ecuación de Boltzmann [52–54] generando trayectorias típicas que se dan en el gas a bajas densidades y no la dinámica Newtoniana del sistema como se hace en dinámica molecular. En la práctica, esto se consigue dividiendo el sistema en celdas, de modo que en cada una de ellas se reproduce de forma determinista el movimiento libre de las partículas, mientras que las colisiones se tratan de forma estocástica. En concreto, para estas simulaciones se han utilizado $N=1000$ partículas, aunque para las simulaciones del método DSMC esto solo implica una mejora de la estadística, pues el límite de baja densidad es inherente al algoritmo. Además, se ha promediado sobre distintas realizaciones o trayectorias independientes, yendo el número de éstas desde 10, para obtener los valores de distintos momentos de la velocidad, a 5000, para generar la distribución de velocidades.

En la figura 3.2 se representa la temperatura del sistema en el estado estacionario para distintos valores de α . Los puntos representan el cociente entre la temperatura obtenida de las simulaciones y la que se obtiene teóricamente suponiendo que la distribución de velocidades de las partículas es gaussiana, la línea discontinua es la predicción teórica para dicho cociente, obtenido de la ecuación (3.49) utilizando

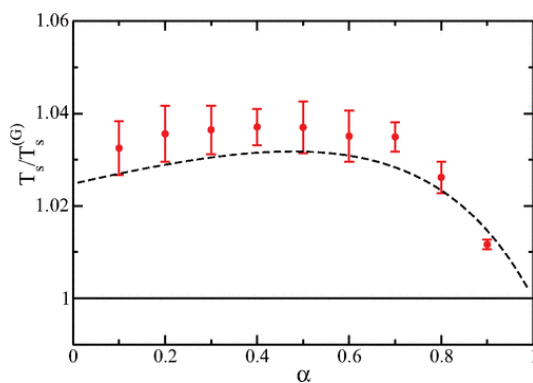


FIGURA 3.2: Temperatura estacionaria obtenida con la aproximación de Sonine, normalizada con la obtenida con una distribución gaussiana, en función de α . La línea a trazos corresponde a la predicción teórica obtenida y los puntos a los resultados de simulación.

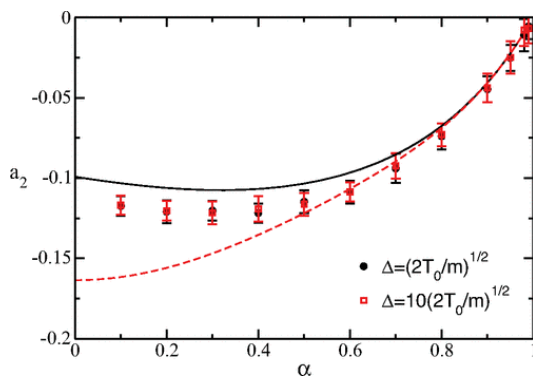


FIGURA 3.3: Valor estacionario del coeficiente a_2 como función de α . Los puntos corresponden a los resultados de simulación DSMC y la línea continua es la predicción teórica incluyendo toda la dependencia en α , mientras que la línea a trazos corresponde a la aproximación dada por la ecuación (3.54).

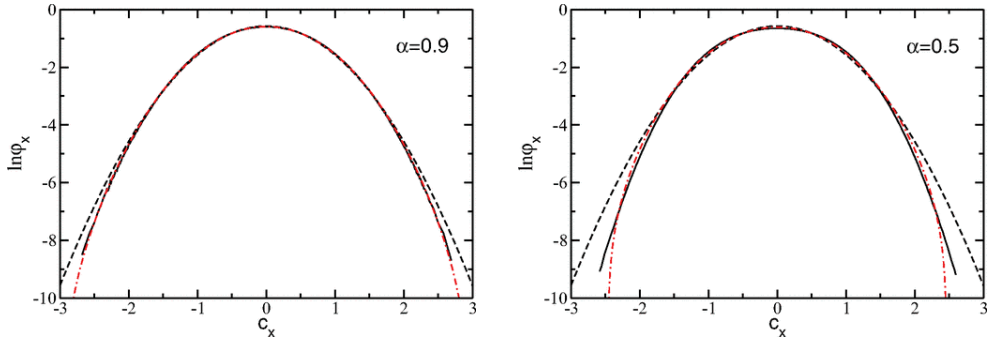


FIGURA 3.4: Distribución de velocidad marginal en el estacionario para $\alpha = 0.9$ (izquierda) y $\alpha = 0.5$ (derecha). La línea continua (negra) corresponde a los resultados de simulación, la línea a trazos (negra) a la distribución de Maxwell y la línea punto-trazo (roja) a la distribución obtenida con la primera corrección de Sonine (ecuación 3.47).

el valor teórico obtenido para $a_2(\alpha)$ (mediante el procedimiento descrito en el apartado anterior), y la línea continua solo se representa como guía. Los valores estacionarios de a_2 , en función de α , se representan en la figura 3.3. La línea continua corresponde a la predicción teórica y los puntos a resultados de la simulación. Se consideran distintos valores de Δ , poniéndose de manifiesto la independencia de a_2 respecto de dicho parámetro. La línea a trazos corresponde al desarrollo para bajas inelasticidades dado por (3.54).

Lo primero que observamos, tanto en los resultados analíticos como de simulación, es que el valor del coeficiente $a_2(\alpha)$ en el estado estacionario cumple, especialmente para valores cercanos al límite elástico, la condición de ser pequeño para todo el rango de valores de α . De este modo se valida la hipótesis utilizada en el desarrollo de la teoría. El acuerdo entre los resultados de simulación y los cálculos teóricos es bastante bueno para este valor del coeficiente de restitución, al igual que sucede con la temperatura estacionaria. Con respecto a esta última vemos como, aunque pequeña, la corrección debida al comportamiento no gaussiano de la distribución de velocidades es claramente identificable.

Con vistas a comprobar también la validez de la aproximación de Sonine para la distribución de velocidad, se ha obtenido en la simulación la función de distribución de velocidades marginal para una componente definida como,

$$\varphi_x(c_x) = \int_{-\infty}^{\infty} dc_y \varphi(c), \quad (3.58)$$

que en dicha aproximación toma la forma:

$$\varphi_x(c_x) \approx \varphi^{(0)}(c_x) \left[1 + \frac{a_2}{2} \left(c_x^4 - 3c_x^2 + \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (3.59)$$

Los resultados se presentan en la Figura 3.4, en la que se comparan las distribuciones obtenidas mediante simulación (línea continua) con la predicción teórica obtenida (línea punto-trazo) y con la distribución de Maxwell (línea a trazos). De nuevo puede apreciarse como la función de distribución se separa claramente del comportamiento gaussiano. Se observa también como esta desviación es en general satisfactoriamente descrita por nuestra aproximación, incluso para $\alpha = 0.5$ (derecha), valor aproximado para el cual $|a_2|$ es máximo disminuyendo a priori la validez de nuestro desarrollo. Se trata desde luego de un valor que corresponde a partículas muy inelásticas.

Capítulo 4

Dinámica homogénea y efectos no lineales

Una vez caracterizado el estado estacionario homogéneo mediante el valor de la temperatura y la desviación del comportamiento gaussiano a través del coeficiente a_2 del desarrollo en polinomios de Sonine de la distribución de velocidades, nos centramos en estudiar la posible existencia de estados homogéneos no estacionarios. En un fluido ordinario, donde la energía se conserva, tenemos que en un estado homogéneo los campos de densidad, velocidad y temperatura quedan determinados por la condición de homogeneidad, y ninguno de ellos puede depender del tiempo. En un medio granular, en el que se disipa energía en las colisiones, sí puede variar la temperatura en el tiempo en los estados homogéneos, y por lo tanto podemos hablar de hidrodinámica homogénea. Esta hidrodinámica ha sido estudiada en el caso de un medio granular libre, no confinado, existiendo un estado homogéneo de enfriamiento de referencia que resulta ser inestable en ciertas condiciones [9, 55]. En el caso del sistema bidimensional con la regla de colisión efectiva que estamos estudiando, al aparecer una temperatura estacionaria no nula, tenemos que se pueden observar estados homogéneos tanto de calentamiento como de enfriamiento, dependiendo de si el sistema tiene inicialmente una temperatura menor o superior a la del correspondiente estado estacionario.

4.1 Hidrodinámica homogénea

Como ya hemos comentado, si nuestro sistema se encuentra en un estado homogéneo, las ecuaciones de balance implican que el único campo hidrodinámico que puede variar en el tiempo es la temperatura, que en un estado de este tipo se define como:

$$T(t) \equiv \frac{1}{nd} \int d\mathbf{v}_1 m \mathbf{v}_1^2 f_1(\mathbf{v}_1, t). \quad (4.1)$$

Tomando segundo momento de la velocidad en (3.23) obtenemos la siguiente ecuación para la evolución de la temperatura:

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} = -\zeta(t)T(t), \quad (4.2)$$

donde $\zeta(t)$ es la velocidad de cambio de la temperatura, debida a la ganancia o pérdida de energía en las colisiones, y viene dada por la expresión:

$$\begin{aligned} \zeta(t) = & -\frac{m\sigma^{d-1}}{nT(t)d} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \\ & \times \left[\Delta^2 + \alpha \Delta \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{1-\alpha^2}{4} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 \right] f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}_2, t). \end{aligned} \quad (4.3)$$

El término que aparece entre corchetes en el integrando es el cambio de energía en la colisión por unidad de masa, como puede apreciarse comparando con la ecuación (3.7). Como ya comentamos esta cantidad puede ser positiva o negativa, dependiendo de la velocidad relativa de las partículas. Consecuentemente la velocidad de variación de la temperatura puede ser también positiva o negativa, en contraste con lo que sucede en sistemas granulares sin inyección de energía en los que solo se puede perder energía y $\zeta(t)$ se denomina por lo tanto velocidad de enfriamiento.

Una condición suficiente para la descripción hidrodinámica del sistema es que éste admita una solución normal, en la que toda dependencia temporal ocurre a través de los campos hidrodinámicos [48, 56]. En nuestro caso este campo es la temperatura, al ser el único que varía. Introducimos las variables adimensionales:

$$\mathbf{q} \equiv \frac{\mathbf{r}_i}{\ell}, \quad \mathbf{c}_i \equiv \frac{\mathbf{v}_i}{v_0(t)}, \quad \Delta^* \equiv \frac{\Delta}{v_0(t)}, \quad (4.4)$$

siendo $\ell = (n\sigma^{d-1})^{-1}$ y $v_0(t) = \sqrt{2T(t)/m}$. En estas unidades la densidad de probabilidad del sistema tiene la forma:

$$\rho_H^*(\{\mathbf{q}_i, \mathbf{c}_i\}, \Delta^*) = [\ell v_0(t)]^{Nd} \rho_H(\{\ell \mathbf{q}_i, v_0(t) \mathbf{c}_i\}, t), \quad (4.5)$$

donde el subíndice H indica que nos referimos a un resultado válido para la hidrodinámica homogénea. Del mismo modo las funciones de distribución reducidas de l partículas, definidas en (3.22), vienen dadas en estas unidades por:

$$f_{l,H}^*(\{\mathbf{q}_i, \mathbf{c}_i\}, \Delta^*) = [\ell v_0(t)]^{ld} f_{l,H}(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i\}, t). \quad i = 1, \dots, l. \quad (4.6)$$

Introduciendo la forma adimensional de ρ_H^* en la ecuación de pseudo Liouville obtenemos

$$\frac{\partial \rho_H^*}{\partial t} = \frac{\zeta^*(\alpha, \Delta)}{2} \left\{ \sum_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}_i} \cdot (\mathbf{c}_i \rho_H^*) + \Delta^* \frac{\partial \rho_H^*}{\partial \Delta^*} \right\} = \bar{L}_+(\Gamma^*) \rho_H^*, \quad (4.7)$$

donde se ha utilizado que toda la dependencia temporal ocurre a través de la temperatura y por tanto de las variables \mathbf{c} y Δ^* . Definiendo $\sigma^* = \sigma/\ell$ y $n^* = n\ell^d$, la velocidad de cambio de la temperatura queda:

$$\begin{aligned} \zeta^*(\alpha, \Delta^*) &\equiv \frac{\ell \zeta_H(t)}{v_0(t)} = -\frac{2\sigma^{*(d-1)}}{n^*d} \int d\mathbf{c}_1 \int d\mathbf{c}_2 \int d\hat{\sigma} \theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \\ &\quad \times |\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\sigma}| \left[\Delta^{*2} + \alpha \Delta^* \mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\sigma} - \frac{1 - \alpha^2}{4} (\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\sigma})^2 \right] \\ &\quad \times f_{2,H}^*(\mathbf{q}_1, \mathbf{c}_1, \mathbf{q}_1 + \sigma^*, \mathbf{c}_2, \Delta^*). \end{aligned} \quad (4.8)$$

El pseudo operador de Liouville y el operador de colisión toman la forma

$$\bar{L}_+(\Gamma^*) = - \sum_i \mathbf{c}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_i} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \bar{T}_+(i, j), \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \bar{T}_+^*(i, j) \equiv & \sigma^{*(d-1)} \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} [\theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta^*)(\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta^*)\delta(\mathbf{q}_{ij} - \boldsymbol{\sigma}^*) \\ & \times \alpha^{-2} b_{\sigma}^{-1}(1, 2) - \theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\delta(\mathbf{q}_{ij} + \boldsymbol{\sigma}^*)]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Por último, el cambio de velocidades en una colisión viene determinado por

$$\begin{aligned} b_{\sigma}^{-1}\mathbf{c}_1 &= \mathbf{c}_1^* = \mathbf{c}_1 - \frac{1+\alpha}{2\alpha}(\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\Delta^*}{\alpha}\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \\ b_{\sigma}^{-1}\mathbf{c}_2 &= \mathbf{c}_2^* = \mathbf{c}_2 + \frac{1+\alpha}{2\alpha}(\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{\Delta^*}{\alpha}\hat{\boldsymbol{\sigma}}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

A partir de la ecuación de evolución de la densidad de probabilidad del sistema obtenemos mediante integración la jerarquía de ecuaciones BBGKY para las funciones de distribución reducidas. La primera ecuación de esta jerarquía es:

$$\begin{aligned} \frac{\zeta^*(\alpha, \Delta^*)}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}_1} \cdot [\mathbf{c}_1 f_{1,H}^*(\mathbf{c}_1, \Delta^*)] + \Delta^* \frac{\partial}{\partial \Delta^*} f_{1,H}^*(\mathbf{c}_1, \Delta^*) \right\} = \\ \int d\mathbf{q}_2 \int d\mathbf{c}_2 \bar{T}_+^*(1, 2) f_{2,H}^*(\mathbf{q}_1, \mathbf{c}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{c}_2, \Delta^*). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Utilizamos para cerrar la ecuación para $f_{1,H}^*$ la aproximación de Enskog, que en este estado y unidades puede escribirse como

$$\begin{aligned} \delta(q_{12} - \sigma^*)\theta(-\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})f_{2,H}^*(\mathbf{q}_1, \mathbf{c}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{c}_2, \Delta^*) \approx \\ \delta(q_{12} - \sigma^*)\theta(-\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})g_e(\sigma, n)n^* \phi(\mathbf{c}_1, \Delta^*)\phi(\mathbf{c}_2, \Delta^*), \end{aligned} \quad (4.13)$$

donde hemos utilizado que en un estado homogéneo $f_{1,H}^*(\mathbf{q}, \mathbf{c}, \Delta^*) = n^*\phi(\mathbf{c}, \Delta^*)$ y $g_e(\sigma, n)$ es la función de correlación de pares homogénea en contacto y en equilibrio. Introduciendo (4.13) en (4.12), resulta

$$\frac{\zeta_B^*(\alpha, \Delta^*)}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} \cdot [\mathbf{c}\phi_{1,H}^*(\mathbf{c}_1, \Delta^*)] + \Delta^* \frac{\partial}{\partial \Delta^*} \phi_{1,H}^*(\mathbf{c}_1, \Delta^*) \right\} = n^* J_B[\mathbf{c}|\phi] \quad (4.14)$$

Aquí el subíndice B indica que la cantidad se calcula en el límite diluido de Boltzmann. Para la velocidad de cambio de la temperatura y el término de colisión obtenemos las expresiones:

$$\begin{aligned} \zeta_B^*(\alpha, \Delta^*) &= -\frac{2}{d} \int d\mathbf{c}_1 \int d\mathbf{c}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \\ &\times \left[\Delta^{*2} + \alpha \Delta^* \mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{1 - \alpha^2}{4} (\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 \right] \phi(\mathbf{c}_1, \Delta^*) \phi(\mathbf{c}_2, \Delta^*), \end{aligned} \quad (4.15)$$

y

$$\begin{aligned} J_B[\mathbf{c}_1 | \phi] &= \sigma^{*(d-1)} \int d\mathbf{c}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} [\theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta^*) (\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta^*) \\ &\times \alpha^{-2} b_{\sigma}^{-1}(1, 2) - \theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{c}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}] \phi(\mathbf{c}_1, \Delta^*) \phi(\mathbf{c}_2, \Delta^*). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Aunque en (4.14) no aparece la función de correlación de pares cabe señalar que la ecuación ha sido obtenida en la aproximación de Enskog. Para proseguir necesitamos una expresión para la función de distribución adimensional $\phi(\mathbf{c}, \Delta^*)$. Esperando de nuevo que la distribución no se desvíe mucho de la gaussiana, proponemos un desarrollo en polinomios de Sonine truncado en la primera corrección

$$\phi(\mathbf{c}, \Delta^*) \approx \phi^{(0)}(c) [1 + a_2(\alpha, \Delta^*) S^{(2)}(c^2)], \quad (4.17)$$

donde ahora a_2 depende de Δ^* , y para Δ_{st}^* debe corresponder al calculado en el capítulo anterior, válido en el estado estacionario. Con esta aproximación podemos calcular la expresión de la velocidad de cambio de la temperatura lo cual hacemos despreciando, como en el capítulo anterior, los términos no lineales en a_2 con lo que resulta

$$\begin{aligned} \zeta^*(\alpha, \Delta) &\approx \frac{2^{3/2} \pi^{(d-1)/2}}{\Gamma(d/2) d} \left[\frac{1 - \alpha^2}{2} \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) - \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} \alpha \Delta^* - \right. \\ &\quad \left. - \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) \Delta^{*2} \right]. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Introduciendo (4.18) en (4.2) obtenemos la función de evolución para la temperatura, a falta de una expresión para la evolución de $a_2(\alpha, \Delta^*)$. Para obtener ésta operamos de forma similar a como se obtuvo el valor de este coeficiente en el estado estacionario en el capítulo anterior: multiplicamos la ecuación (4.14) por c^4 e integramos en \mathbf{c} , consiguiendo una expresión para la evolución del cuarto momento de la distribución, que está relacionado con a_2 mediante (3.46) [57]. Tras

estos cálculos, directos pero tediosos, se obtiene el sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial \Delta^*}{\partial \tau} = \frac{2^{3/2} \pi^{(d-1)/2}}{d^2(d+2)\Gamma(d/2)} [A_0 + A_1 a_2(\tau)], \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial a_2}{\partial \tau} = \frac{2^{3/2} \pi^{(d-1)/2}}{d^2(d+2)\Gamma(d/2)\Delta^{*2}(\tau)} \{ [4A_0 + B_0] + [4(A_0 + A_1) + B_1] a_2(\tau) \}, \quad (4.20)$$

con

$$A_0(\alpha, \Delta^*) = (d+2) \left[\frac{1-\alpha^2}{2} - \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \alpha \Delta^* - \Delta^{*2} \right], \quad (4.21)$$

$$A_1(\alpha, \Delta^*) = \frac{(d+2)}{16} \left[\frac{3(1-\alpha^2)}{2} + \Delta^{*2} \right], \quad (4.22)$$

$$B_0(\alpha, \Delta^*) = (2\pi)^{1/2} (1 + 2d + 3\alpha^2 + 4\Delta^{*2}) \alpha \Delta^* - 3 + 4\Delta^{*4} + \alpha^2 + 2\alpha^4 - 2d(1 - \alpha^2 - 2\Delta^{*2}) + 2\Delta^{*2}(1 + 6\alpha^2), \quad (4.23)$$

$$B_1(\alpha, \Delta^*) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} [2 - 2d(1 - \alpha) + 7\alpha + 3\alpha^3] \Delta^* - \frac{1}{16} \{ 85 + 4\Delta^{*4} - 18(3 + 2\alpha^2)\Delta^{*2} - (32 + 87\alpha + 30\alpha^3)\alpha - 2d[6\Delta^{*2} - (1 + \alpha)(31 - 15\alpha)] \}. \quad (4.24)$$

En las expresiones dadas $\tau = \Delta n \sigma t$ y se han despreciado como es habitual los términos no lineales en a_2 . A partir de las ecuaciones (4.19) y (4.20) puede obtenerse una ecuación para $a_2(\Delta^*)$ en la cual despreciamos los términos no lineales en a_2 así como aquellos proporcionales a $a_2 \partial a_2 / \partial \Delta^*$, obteniendo:

$$\frac{\partial a_2}{\partial \Delta^*} = \left[\frac{4}{\Delta^*} + \frac{4A_1 + B_1}{A_0 \Delta^*} \right] a_2 + \left(\frac{4}{\Delta^*} + \frac{B_0}{A_0 \Delta^*} \right). \quad (4.25)$$

Esta ecuación se resuelve numéricamente, distinguiendo los casos en los que la temperatura inicial (Δ^* inicial) es mayor o menor que su valor estacionario. Al hacer esto puede observarse como, partiendo de una condición inicial arbitraria para a_2 , tanto para situaciones de calentamiento como de enfriamiento el coeficiente evoluciona rápidamente hacia una curva universal. Concluimos que esta curva,

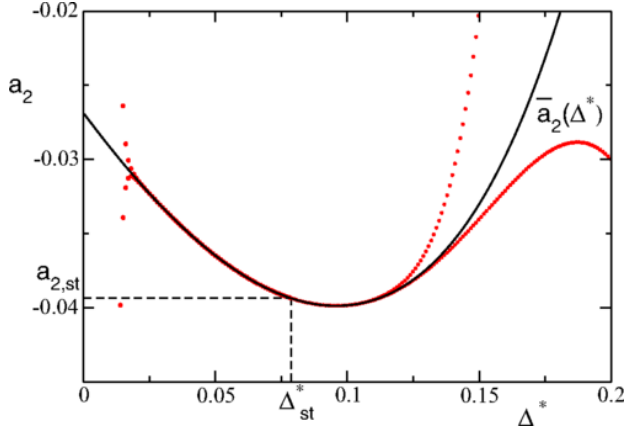


FIGURA 4.1: Coeficiente a_2 del desarrollo de Sonine de la función de distribución de velocidades en función de Δ^* para $\alpha = 0.9$. Las curvas de puntos son soluciones numéricas de la ecuación (4.25). La curva continua corresponde a los valores hidrodinámicos $\bar{a}_2(\alpha, \Delta^*)$.

a la que denominamos $\bar{a}_2(\alpha, \Delta^*)$, independiente de las condiciones iniciales y para la que toda dependencia temporal ocurre a través de la temperatura $T(t)$, corresponde a los valores hidrodinámicos del coeficiente. Esto se representa en la figura 4.1 donde se muestran distintas soluciones numéricas (puntos) así como la curva $\bar{a}_2(\alpha, \Delta^*)$ a la que tienden (línea continua). Las distintas trayectorias se recorren de manera que Δ^* evoluciona monótonamente hacia el valor estacionario.

Para comprobar la validez de nuestras predicciones teóricas se han realizado simulaciones del sistema con la regla de colisión efectiva para un sistema bidimensional ($d = 2$) utilizando el método de DSMC. Este método permite forzar la condición de homogeneidad, y por lo tanto evitar cualquier posible inestabilidad que pudiese llevar a alterar esta condición. En estas simulaciones, para las que utilizamos $\alpha = 0.9$, se han utilizado $N = 1000$ partículas y los resultados se han promediado sobre 5000 trayectorias. Lo primero que se observa de los resultados de estas simulaciones es que la temperatura del sistema evoluciona, como en las soluciones numéricas de la ecuación (4.25), rápidamente hacia una curva independiente de las condiciones iniciales, que identificamos como los valores hidrodinámicos del coeficiente a_2 , resultado que se muestra en la figura 4.2. En la figura se representan con símbolos distintas trayectorias obtenidas de las simulaciones para diferentes condi-

ciones iniciales, incluyendo casos de enfriamiento y calentamiento y distribuciones de velocidad iniciales gaussianas (símbolos vacíos) y cuadradas (reellenos). Las trayectorias se recorren de manera que Δ^* tiende al valor estacionario $\Delta_{st}^* \simeq 0.078$. La línea a trazos es la curva $\bar{a}_2(\alpha, \Delta^*)$, obtenida anteriormente y mostrada en la figura 4.1, y la línea continua es la traslación de esta de forma que el valor estacionario coincida con el de las trayectorias simuladas. La discrepancia entre los valores estacionarios se debe probablemente al hecho de que hayamos despreciado los términos no lineales en a_2 y sus derivadas en nuestros cálculos. Se observa como las trayectorias se ajustan bien a la curva desplazada en torno al valor estacionario. Podemos apreciar de ambos métodos que en las situaciones de calentamiento, si nos alejamos lo suficiente del estado estacionario, el coeficiente a_2 crece hasta invalidar la hipótesis $|a_2| \ll 1$ y por tanto nuestros cálculos, resultado que se observa también para otros valores del coeficiente de restitución. Por otro lado, para las situaciones de calentamiento cercanas al valor estacionario de la temperatura y para todas las de enfriamiento, tenemos que la hipótesis es válida y además que los resultados de simulación concuerdan en buen grado con los analíticos.

Hemos obtenido también la evolución de la temperatura del sistema para una situación de enfriamiento, en la que $T(0) = 200m\Delta^2$, y otra de calentamiento con $T(0) = 10m\Delta^2$ para $\alpha = 0.8$, utilizando en ambos casos como distribución de velocidades inicial una gaussiana. Esta se compara con el resultado obtenido mediante integración numérica de la ecuación (4.2) con las mismas condiciones iniciales, resultando un buen acuerdo entre ambos datos en los dos casos como puede observarse en la figura 4.3 (izquierda) donde los puntos corresponden a los resultados de simulación y las líneas continuas a las soluciones numéricas. Hemos representado también en la figura 4.3 (derecha) la curva de calentamiento obtenida de las simulaciones (puntos) y la solución numérica de (4.2) tomando $a_2 = 0$ (línea continua). Aunque pequeña, se aprecia claramente la influencia de la desviación de la función de distribución de velocidades respecto del comportamiento Gaussiano.

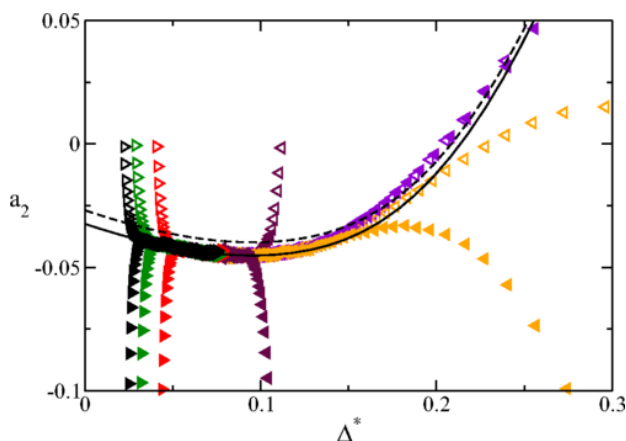


FIGURA 4.2: Coeficiente a_2 del desarrollo de Sonine de la función de distribución de velocidades en función de Δ^* para $\alpha = 0.9$. Las curvas con símbolos se han obtenido mediante simulación para distintas condiciones iniciales. La curva a trazos corresponde a la curva hidrodinámica universal $\bar{a}_2(\alpha, \Delta^*)$ obtenida anteriormente de la solución numérica de (4.25). La curva continua es un desplazamiento de la anterior para que coincidan los valores estacionarios de a_2 y Δ^* obtenidos por ambos métodos.

4.2 Estudio de la validez del modelo

Con vistas a comprobar la validez del modelo bidimensional efectivo para representar el sistema confinado casi-bidimensional, en el que las velocidades de las partículas cambian en las colisiones de acuerdo con la regla (3.5), hemos comparado los resultados teóricos obtenidos para la hidrodinámica homogénea del modelo con simulaciones de la evolución del sistema tridimensional utilizando el método de Dinámica Molecular. También hemos comparado los resultados de simulación con los obtenidos mediante otro modelo considerado en la bibliografía, concretamente el modelo del termostato estocástico [58–61], que pasamos a describir brevemente. Como ya se comentó, este modelo supone que a las partículas se les sule de energía mediante la acción de una fuerza estocástica con ruido blanco que actúa sobre cada una de ellas independientemente. De este modo, en el límite diluido y para estados homogéneos, la evolución del sistema puede describirse mediante una ecuación de Boltzmann-Fokker-Planck para

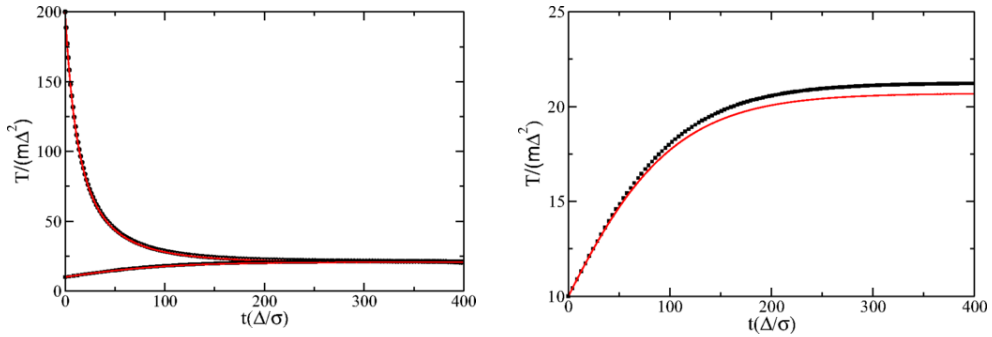


FIGURA 4.3: Izquierda: Evolución de la temperatura para $\alpha = 0.8$ con condiciones iniciales por encima y por debajo del valor estacionario de ésta. Los símbolos corresponden a los datos de simulación y las curvas continuas a la solución numérica de (4.2). Derecha: La misma curva de calentamiento mostrada en la figura de la izquierda. Aquí la curva teórica se ha obtenido forzando $a_2 = 0$.

la función de distribución de velocidades de una partícula [4]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}_1, t) = & \sigma \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} [\alpha^{-2} b_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(1, 2) - 1] \\ & \times f(\mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{v}_2, t) + \frac{\xi_0^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_1^2} f(\mathbf{v}_1, t). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Aquí ξ_0 es un parámetro del modelo que mide la intensidad de la fuerza estocástica y $b_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(1, 2)$ es el operador de cambio a velocidades precolisionales que en este caso opera del modo usual para esferas inelásticas,

$$\begin{aligned} b_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(1, 2) \mathbf{v}_1 &= \mathbf{v}_1 - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \\ b_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(1, 2) \mathbf{v}_2 &= \mathbf{v}_2 + \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Con esto, tomando segundo momento en la ecuación (4.26) y aproximando la función de distribución de una partícula por una gaussiana, se llega a una ecuación para la evolución de la temperatura

$$\frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{(1 - \alpha^2) \pi^{1/2} n \sigma}{m^{1/2}} T^{3/2} + m \xi_0^2. \quad (4.28)$$

Por tanto, la temperatura estacionaria es

$$T_{st} = m \left[\frac{\xi_0^2}{\pi^{1/2}(1-\alpha^2)n\sigma} \right]^{2/3}. \quad (4.29)$$

Por otra parte, la temperatura estacionaria en el modelo colisional de Brito, supuesto que la función de distribución es una gaussiana, viene dada por

$$T_{st} = \frac{\pi m \alpha^2}{4(1-\alpha^2)^2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4(1-\alpha^2)}{\pi \alpha^2}} \right]^2 \Delta^2, \quad (4.30)$$

que corresponde a la temperatura obtenida en la ecuación (3.49) eliminando el término proporcional a a_2 .

Nuestro próximo objetivo es comparar los resultados de ambos modelos con simulaciones del sistema confinado tridimensional. El método de Dinámica Molecular que usamos para simular el sistema confinado se presenta en el Apéndice B [62, 63]. Las simulaciones del sistema confinado se realizan para un sistema en el que las paredes confinantes están separadas una distancia $h = 1.5\sigma$ y la celda unidad es una caja cuadrada con lado $L = 129\sigma$ y se usan $N = 500$ partículas, de modo que la densidad tridimensional es $n = 0.02\sigma^{-3}$. El coeficiente de restitución es $\alpha = 0.8$ y en las dimensiones no confinadas se han impuesto condiciones periódicas de contorno.

En primer lugar, hemos estudiado la evolución de la temperatura, comparando la predicción teórica de cada modelo con la obtenida de las simulaciones. Para esto necesitamos relacionar los parámetros asociados a la inyección de energía en los dos modelos, ξ_0 y Δ , con la velocidad de vibración de las paredes en las simulaciones del sistema confinado, de modo que podamos imponer valores de estos parámetros para estudiar trayectorias que den lugar a la misma temperatura estacionaria. Esto lo hemos llevado a cabo obteniendo los valores de ξ_0 en el termostato estocástico y de Δ en el modelo colisional como función de v_b , la velocidad de vibración de las paredes en el modelo del sistema confinado, de forma que den lugar a la misma temperatura estacionaria. Los resultados obtenidos para la relación entre los parámetros pueden verse en la gráfica 4.4.

Una vez obtenida relación entre los parámetros de los modelos teóricos y del sistema vibrado tridimensional, podemos comparar la evolución de la temperatura obtenida por los distintos métodos. Los

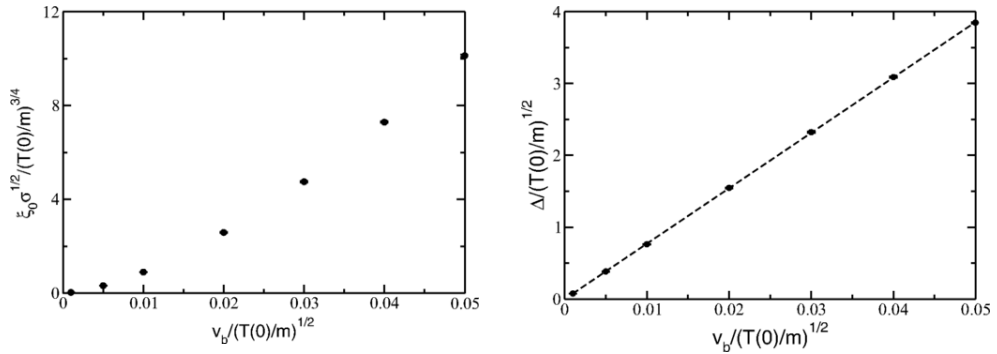


FIGURA 4.4: Relaciones entre la intensidad de ruido ξ_0 (izquierda) y la velocidad característica Δ (derecha) con la velocidad de vibración v_b de modo que se obtenga en todos los sistemas la misma temperatura estacionaria. La recta a trazos en la gráfica de Δ frente a v_b se representa únicamente como guía, pues la dependencia de Δ con v_b resulta ser lineal.

resultados se presentan en la figura 4.5 para la que se ha utilizado el mismo valor de los parámetros del sistema en las simulaciones de Dinámica Molecular que en el caso anterior pero solo para los valores de la velocidad de vibración $v_b = 10^{-3}(T(0)/m)^{1/2}$ (izquierda) y $v_b = 10^{-2}(T(0)/m)^{1/2}$ (derecha), siendo $T(0)$ la temperatura inicial del sistema. Los resultados de la simulación se representan con la línea continua (en negro) mientras que las obtenidas de los modelos colisional y estocástico vienen representados por las líneas a trazos (en rojo) y punto-guión (en azul) respectivamente. En general podemos ver que el modelo colisional representa con aceptable acuerdo la evolución de la temperatura del sistema, mientras que el modelo estocástico evoluciona sensiblemente más rápido hacia el estado estacionario. En cualquier caso, se ha comprobado que el modelo del termostato estocástico lleva en algunos casos a predicciones en buen acuerdo con los resultados obtenidos para un gas vibrado de esferas o discos inelásticos [64, 65].

A fin de comprobar la validez de la segunda aproximación de Sonine se ha obtenido de las simulaciones de dinámica molecular el valor del coeficiente a_2 en el estado estacionario mediante la regla

$$a_{2,st} \equiv \frac{4\langle c^4 \rangle}{d(d+2)} - 1. \quad (4.31)$$

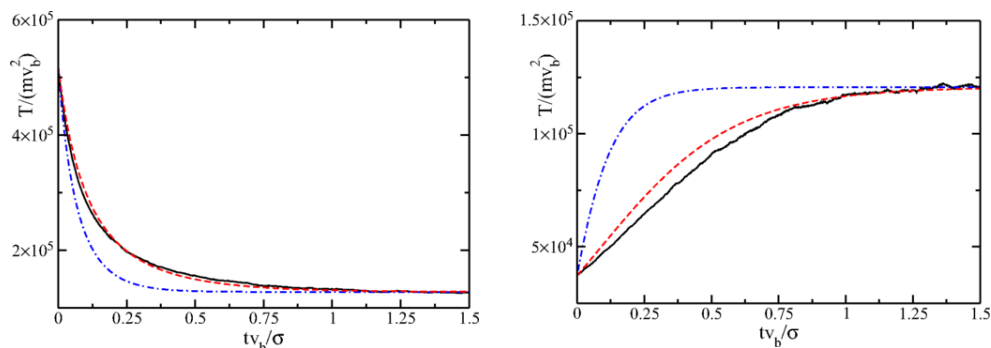


FIGURA 4.5: Evolución de la temperatura en un sistema enfriándose (izquierda) y otro calentándose (derecha) con $\alpha = 0.8$. La curva continua son los resultados de las simulaciones de dinámica molecular, la línea a trazos es la que se obtiene del modelo colisional y la punto-guión la correspondiente al termostato estocástico.

Los resultados obtenidos para $\alpha \geq 0.6$ se muestran en la figura 4.6. La principal característica que se deriva es que el coeficiente toma valores positivos en todo el rango de valores de α estudiado. Por otra parte, para inelasticidades moderadas, aproximadamente $\alpha \geq 0.8$, $a_{2,st}$ mantiene un valor pequeño mientras que a partir de éste crece bastante rápido. Esto contrasta de entrada con los resultados obtenidos para el modelo colisional, para el que vimos que este coeficiente solo tomaba valores negativos y se mantiene con un módulo moderado. En el modelo del termostato estocástico tenemos que $a_{2,st}$ toma valores negativos para $\alpha \geq 0.7$, creciendo lentamente para valores menores [28]. En general vemos que ambos modelos fallan a la hora de reproducir esta característica del sistema, razón por la que no representamos los valores de estos modelos en las figuras. También se ha analizado la dependencia de $a_{2,st}$ con la velocidad de vibración de la pared v_b en el sistema confinado. Los resultados se muestran en la figura 4.6, y puede verse que $a_{2,st}$ parece ser independiente de v_b .

Por último, se ha estudiado la distribución marginal de velocidades $\varphi_x(c_x)$ y se compara con la segunda aproximación de Sonine utilizando los valores obtenidos de la propia simulación. Con esto buscamos comprobar que no es necesario considerar términos superiores a a_2 y que la expansión en polinomios de Sonine no diverge [66]. Los resultados se muestran en la figura 4.7 para $\alpha = 0.8$, donde los puntos son los datos obtenidos de las simulaciones, la línea continua es la aproximación de

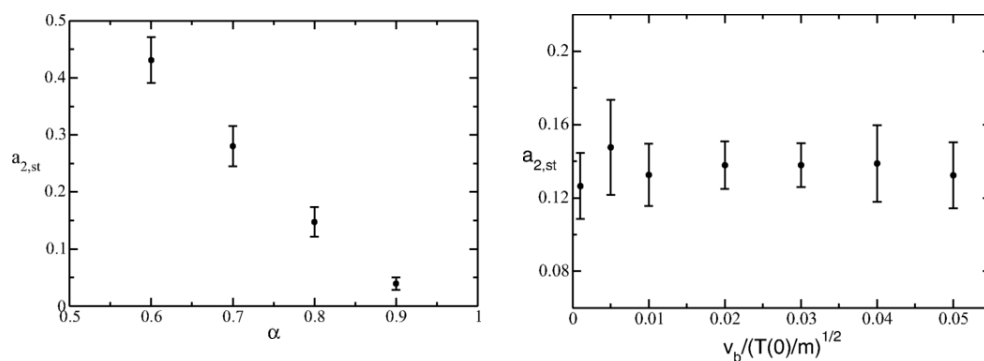


FIGURA 4.6: Izquierda: Valor estacionario del coeficiente a_2 en función de α obtenido mediante simulaciones de dinámica molecular. Derecha: Dependencia del valor de $a_{2,st}$ con la velocidad de vibración de la pared v_b .

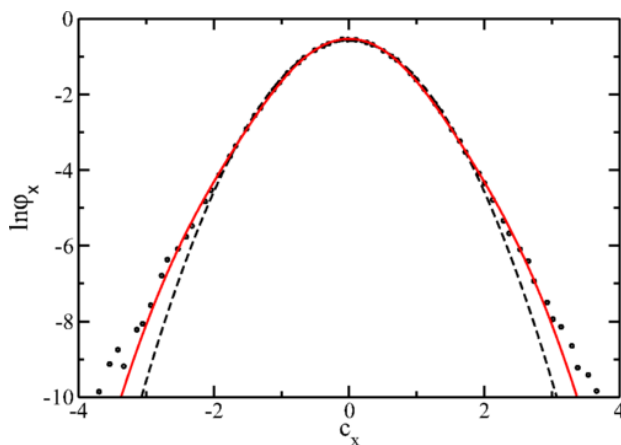


FIGURA 4.7: Distribución marginal de velocidades $\varphi_x(c_x)$. Los puntos corresponden a los datos de simulación de dinámica molecular, la línea continua a la segunda aproximación de Sonine, utilizando el valor de $a_{2,st}$ obtenido de la propia simulación de dinámica molecular, y la línea a trazos con la distribución gaussiana.

Sonine y la línea a trazos la distribución gaussiana. Vemos que, a pesar de que los modelos no reproduzcan correctamente el valor de $a_{2,st}$, la aproximación es válida en muy buen grado pudiendo apreciarse claramente la desviación del comportamiento gaussiano. En cualquier caso, para valorar los resultados mostrados en la figura hay que tener en cuenta que el valor del coeficiente de restitución considerado es relativamente alto y la discrepancia entre los valores predichos y de simulación de $a_{2,st}$ no son muy grandes.

4.3 Efecto Kovacs

En general se habla de estados hidrodinámicos cuando podemos describir el sistema y su evolución en función de unos pocos campos, como la temperatura o la densidad. En el contexto de la teoría cinética, una descripción hidrodinámica se sigue de la existencia de una solución normal, esto es, una solución en la que toda la dependencia temporal y espacial tiene lugar a través de los campos hidrodinámicos. En nuestro caso, en el que el sistema es homogéneo, el único campo macroscópico que puede variar en el tiempo es la temperatura, y de hecho hemos visto que existe una curva universal $\bar{a}_2(\alpha, \Delta^*)$ la cual identificamos con el comportamiento hidrodinámico, independiente de las condiciones iniciales del sistema. Por otra parte, el que el estado del sistema venga determinado por los valores de estos campos contrasta con los efectos de memoria que se observan en ciertos sistemas macroscópicos, y particularmente en los medios granulares.

Para comprobar la validez de la solución normal de nuestro sistema aplicamos un protocolo como el considerado por Kovacs en sus estudios de polímeros [67]. En estos estudios, estando la muestra en equilibrio con un baño térmico, se reduce drásticamente la temperatura del baño, de modo que la temperatura de la muestra comienza a disminuir. Manteniendo en todo el proceso la presión constante, y mientras la muestra se sigue enfriando, se cambia de nuevo rápidamente la temperatura del baño al valor que tenga en la muestra en ese instante. Con esto, si el estado de la muestra estuviese determinado por el valor de los campos hidrodinámicos, en este caso por la temperatura, el sistema debería encontrarse en el estado estacionario, y por lo tanto no evolucionar más. No es esto sin embargo lo que se observa, sino que

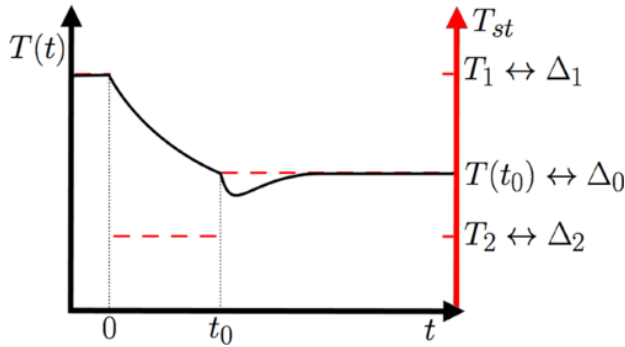


FIGURA 4.8: Esquema del protocolo utilizado para reproducir el efecto Kovacs en nuestro sistema.

el volumen de la muestra continúa evolucionando, indicando que el estado del sistema no está totalmente determinado por los campos hidrodinámicos.

En el caso del modelo colisional que estamos estudiando el protocolo que hemos seguido se representa en la figura 4.8 [68]. Se comienza con el sistema en estado estacionario homogéneo, y se cambia de forma instantánea el valor de Δ desde Δ_1 a Δ_2 , de modo que la temperatura del sistema empieza a evolucionar hacia el nuevo valor estacionario. Antes de que se alcance dicho estado, de forma análoga a las experiencias de Kovacs, se cambia el valor de la velocidad característica a Δ_0 de modo que la temperatura que tiene en ese instante el sistema coincida con el valor estacionario y analizamos su evolución posterior. Señalamos en este punto que un estudio similar ha sido realizado para el modelo del termostato estocástico [69,70]. En el caso bidimensional ($d = 2$), la función de distribución para un estado homogéneo tiene la forma

$$f_H(\mathbf{v}, t) = nv_0(t)^{-2} \varphi(\mathbf{c}, \Delta^*). \quad (4.32)$$

Vamos a utilizar la primera aproximación de Sonine para $\varphi(\mathbf{c}, \Delta^*)$. Ya hemos comentado que el coeficiente a_2 depende del tiempo a través de la temperatura, y toma el valor \bar{a}_2

$$\bar{a}_2(\alpha, \Delta^*(t)) = \bar{a}_2 \left(\alpha, \sqrt{\frac{2T(t)}{m\Delta^2}} \right). \quad (4.33)$$

Supongamos que tenemos el sistema bidimensional en el estado estacionario homogéneo con una velocidad característica $\Delta = \Delta_1$, de modo que la temperatura viene dada por

$$\frac{\Delta_1}{v_{01,st}} = \Delta_{st}^*, \quad (4.34)$$

con

$$v_{01,st} \equiv \left(\frac{2T_{1,st}}{m} \right)^{1/2}. \quad (4.35)$$

Por la condición de estado estacionario tenemos

$$\zeta^*(\alpha, \Delta_{st}^*) = 0, \quad (4.36)$$

siendo

$$\begin{aligned} \zeta^*(\alpha, \Delta^*) = (2\pi)^{1/2} & \left[\frac{1 - \alpha^2}{2} \left(1 + \frac{3\bar{a}_2(\Delta^*)}{16} \right) - \alpha \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} \Delta^* \right. \\ & \left. - \left(1 - \frac{\bar{a}_2(\Delta^*)}{16} \right) \Delta^{*2} \right]. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Si ahora cambiamos la velocidad característica del sistema a otra $\Delta_2 < \Delta_1$ la temperatura estacionaria del sistema pasa a ser

$$\left(\frac{2T_{2,st}}{m} \right)^{1/2} = \frac{\Delta_2}{\Delta_{st}^*} < \frac{\Delta_1}{\Delta_{st}^*} = \left(\frac{2T_{1,st}}{m} \right)^{1/2}, \quad (4.38)$$

de modo que la temperatura comienza a disminuir monótonamente hacia la temperatura $T_{2,st}$. La función de distribución escalada del sistema, de acuerdo a la aproximación de Sonine, vendrá dada por (4.17) con

$$a_2(t) = \bar{a}_2(\alpha, \Delta_2^*(t)), \quad (4.39)$$

y

$$\Delta_2^*(t) \equiv \frac{\Delta_2}{v_0(t)}, \quad (4.40)$$

Mientras la temperatura disminuye, y por tanto la velocidad de cambio de la temperatura cumple $\zeta^*(\alpha, \Delta_2^*) > 0$, existe siempre un valor de la velocidad característica Δ_0 que cumple para un instante t_0

$$\frac{\Delta_0}{v_0(t_0)} = \Delta_{st}^*. \quad (4.41)$$

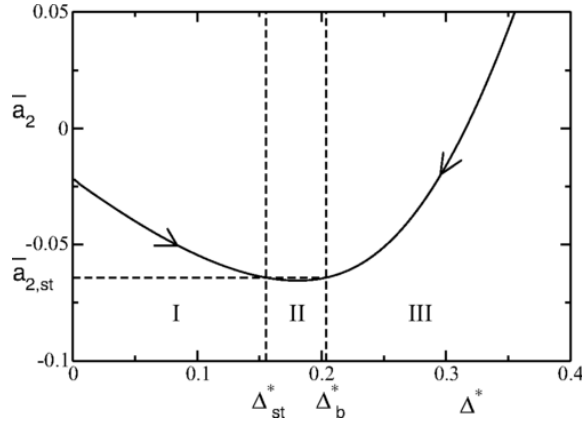


FIGURA 4.9: Valores hidrodinámicos del coeficiente de Sonine a_2 como función de Δ^* para $\alpha = 0.8$. En la zona I el sistema se encuentra calentándose mientras que en la II y III enfriándose.

Si se cambia el valor de la velocidad característica, de modo que T_0 pasa a ser la temperatura estacionaria, la velocidad de cambio de la temperatura adimensional pasa a tomar el valor

$$\zeta_+^*(\alpha, t_0) = (2\pi)^{1/2} \left\{ \frac{1 - \alpha^2}{2} \left[1 + \frac{3\bar{a}_2(\Delta_2^*(t_0))}{16} \right] - \alpha \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} \Delta_{st}^* - \left[1 - \frac{\bar{a}_2(\Delta_2^*(t_0))}{16} \right] \Delta_{st}^{*2} \right\}, \quad (4.42)$$

donde se ha tenido en cuenta que la distribución de velocidades viene caracterizada inicialmente por $\bar{a}_2(\Delta_2^*)$ debido a que se cambia súbitamente el valor de Δ . Utilizando que $\zeta^*(\alpha, \Delta_0^*) = \zeta^*(\alpha, \Delta_{st}^*) = 0$, podemos escribir (4.42) como

$$\zeta_+^*(\alpha, t_0) = \frac{(2\pi)^{1/2}}{16} \left[\frac{3(1 - \alpha^2)}{2} + \Delta_{st}^{*2} \right] (\bar{a}_2(\Delta_2^*(t_0)) - \bar{a}_2(\Delta_{st}^*)). \quad (4.43)$$

En esta ecuación vemos que si $\bar{a}_2(\Delta_2^*) > \bar{a}_2(\Delta_{st}^*)$, $\zeta_+^*(\alpha, t_0)$ es positivo, y negativo en el caso contrario. Si el sistema estaba enfriándose antes de cambiar la velocidad característica puede observarse en la figura 4.9 como en esta situación, que corresponde a la zona I, solo es posible que el valor inicial de a_2 sea mayor que su valor estacionario,

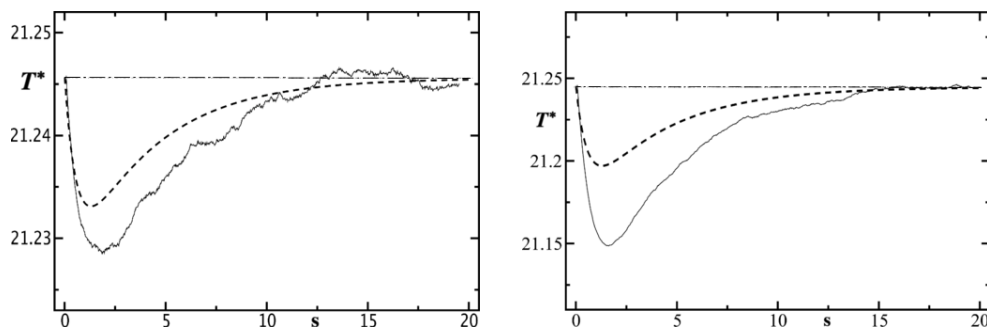


FIGURA 4.10: Efecto Kovacs para el caso de enfriamiento (izquierda) y de calentamiento (derecha). En ambas gráficas la línea continua corresponde a los resultados de simulación, la línea a trazos con la solución numérica del sistema de ecuaciones (4.19) y (4.20) y la línea horizontal marca el valor estacionario de la temperatura adimensional. En todos los casos se representan los resultados a partir del cambio del valor de Δ a Δ_0 ($t > t_0$ según el protocolo esquematizado en la figura 4.8).

por lo que el sistema continúa disminuyendo su temperatura tras el cambio. Por otra parte, si el sistema se encontraba calentándose tenemos que distinguir dos casos. Si $\bar{a}_2(\Delta_2^*) < \bar{a}_2(\Delta_{st}^*)$, por lo que partimos de la zona II, la velocidad de cambio de la temperatura se mantiene negativa al cambiar el valor de Δ . En caso de que nos encontremos inicialmente en la zona III, tenemos que la velocidad de cambio de la temperatura cambia de signo, de modo que se produce un rebote de la temperatura, que pasa a disminuir durante un cierto periodo de tiempo. En todos los casos la evolución del sistema posterior al cambio del valor de la velocidad característica, cuando la temperatura del sistema coincide con la estacionaria, implica que nuestro sistema, en particular la función de distribución de velocidades, no viene totalmente determinado por los campos hidrodinámicos, y por tanto no es normal. Señalamos en este punto que este efecto depende únicamente de la razón Δ_2/Δ_0 , como puede verse de la ecuación (4.43) si escribimos $\bar{a}_2(\Delta_2^*(t_0)) = \bar{a}_2(\Delta_{st}^* \Delta_2/\Delta_0)$.

Para contrastar estos resultados se han realizado simulaciones del sistema efectivo utilizando el método de DSMC. Utilizamos este tipo de simulaciones en vez de Dinámica Molecular debido a que, como se puede ver en la figura 4.6, el valor de a_2 en el sistema confinado no se corresponde con el del modelo colisional efectivo y, como este

efecto está directamente relacionado con el valor de este coeficiente, utilizamos DSMC, en el que ya se comprobó que se reproducían correctamente estos valores (figura 4.2). Las simulaciones se han realizado con $N = 1000$ partículas y promediadas sobre 5×10^4 trayectorias. En la figura 4.10 se representa la evolución de la temperatura adimensional $T^* = T/m\Delta^{*2}$ frente a la escala adimensional de tiempo s , proporcional al número de colisiones por partícula, de modo que $s = 0$ cuando se cambia el valor de la velocidad característica al valor Δ_0 , lo que equivale a representar solo los datos para $t > t_0$ según el esquema mostrado en la figura 4.8. En ambas figuras, en las que se ha utilizado $\alpha = 0.8$, representamos con línea continua los resultados de simulación y la línea a trazos corresponde a la solución numérica de las ecuaciones (4.19) y (4.20), a partir de las cuales es directo obtener la temperatura en esta escala de tiempo. La figura de la izquierda corresponde a una situación inicial de enfriamiento con $\Delta_2 = 0.5\Delta_0$ en la que, como esperábamos, no se produce el rebote de la temperatura y esta continúa disminuyendo temporalmente tras el cambio de Δ . En la situación de la derecha nos encontramos con un sistema en calentamiento de modo que $\Delta_2 = 2\Delta_0$, encontrándonos inicialmente en la zona III de la figura 4.9 y por tanto produciéndose un rebote en la temperatura del sistema al cambiar el valor de la velocidad característica. No se muestra un ejemplo del caso en el que el sistema se encuentra calentándose y no se produce rebote pues se corresponde con un rango de muy poca variación de a_2 (zona II en la figura 4.9) y de acuerdo a (4.43) la nueva velocidad de cambio de la temperatura es menor en módulo que en los otros casos, siendo más complicado distinguirlo del ruido estadístico en las simulaciones. En general, podemos ver cómo el sistema de ecuaciones obtenido para la evolución de la temperatura y el coeficiente de Sonine reproduce correctamente el análogo del efecto Kovacs que aparece en el sistema confinado con la regla de colisión efectiva, al menos de forma cualitativa. Hay que señalar que en nuestro análisis teórico de este efecto es necesario considerar la desviación de la función de distribución de velocidades de la gaussiana, o de otra forma nuestra descripción del sistema estaría totalmente determinada por la temperatura.

Capítulo 5

Hidrodinámica en el modelo colisional y estabilidad

Ya hemos visto que es posible describir a nivel macroscópico la evolución de los estados homogéneos de un sistema confinado de partículas cuya dinámica obedece el modelo colisional efectivo, mediante el uso de ecuaciones hidrodinámicas. A continuación, extenderemos el análisis a estados inhomogéneos, obteniendo ecuaciones para la evolución de los campos macroscópicos de densidad, velocidad y temperatura. Esto lo llevamos a cabo mediante el uso de una extensión del método de Chapman-Enskog para sistemas en los que se puede perder o ganar energía cinética en las colisiones entre partículas. Una vez obtenidas dichas ecuaciones, las utilizaremos para analizar la estabilidad lineal de los estados hidrodinámicos homogéneos, y con ello la posibilidad de que el sistema evolucione espontáneamente a estados altamente inhomogéneos como los que se observan en los experimentos de medios granulares vibrados confinados casi-bidimensionalmente.

5.1 Ecuaciones de Navier-Stokes

A partir de la función de distribución de una partícula, los campos de densidad, velocidad y temperatura se definen como:

$$n(\mathbf{r}, t) \equiv \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (5.1)$$

$$n(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \equiv \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (5.2)$$

$$\frac{d}{2} n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t) \equiv \int d\mathbf{v} \frac{mV^2}{2} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (5.3)$$

siendo $\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ la velocidad de la partícula relativa al campo de velocidades. Para la evolución de la función de distribución de una partícula hemos obtenido la ecuación de Enskog (3.27) en la que aparece la función de correlación de pares en contacto. Tomando $g_E[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|n(t)] = 1$, resulta la ecuación de Boltzmann, válida en el límite diluido,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int d\mathbf{v}_1 \bar{T}_0(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t), \quad (5.4)$$

donde $\bar{T}_0(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ es el operador de colisión binaria, dado por

$$\begin{aligned} \bar{T}_0(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1) \equiv & \sigma^{d-1} \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} [\Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta) |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta| \alpha^{-2} b_\sigma^{-1} - \\ & - \theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}|]. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Tomando diferentes momentos de la velocidad en la ecuación (5.4) y utilizando las definiciones de los campos macroscópicos (5.1)-(5.3), se obtienen las ecuaciones macroscópicas de balance,

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + (mn)^{-1} \nabla \cdot \mathbf{P} = \mathbf{0}, \quad (5.7)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T + \frac{2}{nd} (\mathbf{P} : \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{J}_q) = -\zeta T. \quad (5.8)$$

Aquí, \mathbf{P} es el tensor de presiones y \mathbf{J}_q el flujo de calor, definidos como

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \equiv m \int d\mathbf{v} \mathbf{V}(\mathbf{r}, t) \mathbf{V}(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (5.9)$$

y

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{m}{2} \int d\mathbf{v} V^2(\mathbf{r}, t) \mathbf{V}(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (5.10)$$

En la ecuación (5.8) aparece ζ , la velocidad de cambio de la temperatura, que surge debido a la variación de energía cinética en las colisiones y es el único término que diferencia formalmente estas ecuaciones de las ecuaciones de balance que se obtienen para fluidos ordinarios. La velocidad de cambio de la temperatura viene dada por

$$\zeta(\mathbf{r}, t) \equiv -\frac{2}{n(\mathbf{r}, t)T(\mathbf{r}, t)d}\omega[f, f], \quad (5.11)$$

con la funcional $\omega[f, h]$ definida para dos funciones f y h arbitrarias por

$$\begin{aligned} \omega[f, h] \equiv & \frac{\pi^{(d-1)/2}m\sigma^{d-1}}{2} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t)h(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t) \\ & \times \left[\frac{\Delta^2 v_{12}}{\Gamma\left(\frac{d+1}{2}\right)} + \frac{\pi^{1/2}\alpha\Delta v_{12}}{2\Gamma\left(\frac{d+2}{2}\right)} + \frac{(1-\alpha^2)v_{12}^3}{4\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right)} \right]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Para que las ecuaciones (5.6)-(5.8) proporcionen una descripción completa de la evolución del fluido, debemos cerrar de alguna forma el sistema de ecuaciones para los distintos campos. Para ello supondremos, de acuerdo a la teoría de Chapman-Enskog [71], la existencia de una solución normal de la ecuación cinética, en la que toda dependencia espacial y temporal de la función de distribución de una partícula ocurre a través de los campos macroscópicos [73]

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f[\mathbf{v}|n, \mathbf{u}, T]. \quad (5.13)$$

Además de esta hipótesis es también necesario suponer que las variaciones espaciales y temporales de los campos son pequeñas con vistas a hacer un desarrollo en sus gradientes. Introduciendo un parámetro formal ϵ acompañando a cada gradiente, desarrollamos la función de distribución y su derivada temporal en la forma

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots, \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \partial_t^{(0)} + \epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)} + \dots \quad (5.15)$$

Introduciendo este desarrollo en las ecuaciones de balance, y agrupando los distintos ordenes en el parámetro de uniformidad ϵ , obtenemos distintos sistemas de ecuaciones para los distintos ordenes en

gradientes. Señalamos en este punto que en el método de Chapman-Enskog no se desarrollan los campos hidrodinámicos, de forma que la función de distribución de orden cero nos reproduce de forma exacta dichos campos. De este modo, tenemos que los términos de orden superior de la función de distribución no pueden contribuir a los campos macroscópicos,

$$\int d\mathbf{v} f^{(i)} = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f^{(i)} = \int d\mathbf{v} V^2 f^{(i)} = 0, \quad (5.16)$$

para $i \geq 1$. Procediendo de esta forma, las ecuaciones en orden cero en gradientes, correspondientes a estados homogéneos, quedan

$$\partial_t^{(0)} n_H = 0, \quad \partial_t^{(0)} \mathbf{u}_H = 0, \quad \partial_t^{(0)} T_H = -\zeta^{(0)} T_H. \quad (5.17)$$

Identificamos estas ecuaciones como las estudiadas en el capítulo anterior, de modo que podemos aprovechar los resultados ya obtenidos. Estos incluyen la caracterización de la función de distribución en este orden y la expresión de la velocidad de cambio de la temperatura, ambas en la primera aproximación de Sonine. Por otra parte en este orden el tensor de presiones y el flujo de calor vienen dados por

$$\mathbf{P}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = p(\mathbf{r}, t) \mathbf{l} = n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t) \mathbf{l}, \quad \mathbf{J}_q^{(0)}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (5.18)$$

con \mathbf{l} el tensor unidad en d dimensiones. La ecuación de Boltzmann en primer orden en estos gradientes queda

$$\partial_t^{(0)} f^{(1)} + \mathcal{L} f^{(1)} = -\partial_t^{(1)} f^{(0)} - \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{r}}, \quad (5.19)$$

siendo \mathcal{L} el operador lineal

$$\begin{aligned} \mathcal{L} f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \equiv & - \int d\mathbf{v}_1 \bar{T}_0(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1) [f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) + \\ & f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t)]. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Las ecuaciones de balance macroscópicas en primer orden son

$$\partial_t^{(1)} n + \mathbf{u} \cdot \nabla n + n \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (5.21)$$

$$\partial_t^{(1)} \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + (mn)^{-1} \nabla p = \mathbf{0}, \quad (5.22)$$

$$\partial_t^{(1)} T + \mathbf{u} \cdot \nabla T + \frac{2T}{d} \nabla \cdot \mathbf{u} = -\zeta^{(1)} T, \quad (5.23)$$

donde la velocidad de cambio de la temperatura en primer orden en los gradientes de los campos viene dada por

$$\zeta^{(1)} \equiv \frac{4}{n(\mathbf{r}, t)T(\mathbf{r}, t)d} \omega[f^{(0)}, f^{(1)}]. \quad (5.24)$$

Utilizando que tanto $f^{(0)}$ como $f^{(1)}$ son normales, y las ecuaciones (5.21)-(5.23), podemos reescribir (5.19) como

$$\partial_t^{(0)} f^{(1)} + \mathcal{L}f^{(1)} - \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} \zeta^{(1)} T = \mathbf{A} \cdot \nabla \ln T + \mathbf{B} \cdot \nabla \ln n + \mathbf{C} : \nabla \mathbf{u}, \quad (5.25)$$

con

$$\mathbf{A}(\mathbf{V}|n, T) = -\frac{T}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{V}} + \frac{\mathbf{V}}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\mathbf{V}f^{(0)}) + \frac{\mathbf{V}}{2} \Delta^* \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \Delta^*}, \quad (5.26)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{V}|n, T) = -\mathbf{V}f^{(0)} - \frac{T}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{V}}, \quad (5.27)$$

$$\mathbf{C}(\mathbf{V}|n, T) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} (\mathbf{V}f^{(0)}) - \frac{1}{d} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\mathbf{V}f^{(0)}) + \Delta^* \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \Delta^*} \right] \mathbf{1}. \quad (5.28)$$

Al ser la ecuación (5.25) lineal en los gradientes de los campos tenemos que su solución tiene que ser de la forma

$$f^{(1)}(\mathbf{V}|n, T) = \mathcal{A} \cdot \nabla \ln T + \mathcal{B} \cdot \nabla \ln n + \mathcal{C} : \nabla \mathbf{u}, \quad (5.29)$$

e introduciendo esta expresión en (5.24), y al ser $\zeta^{(1)}$ un escalar, tenemos que la única contribución no nula a la velocidad de cambio de temperatura en este orden es del tipo

$$\zeta^{(1)} = \zeta_1 \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (5.30)$$

donde el coeficiente de transporte de Euler ζ_1 , que no existe en sistemas moleculares y es característico de las colisiones inelásticas [74–76], tiene la expresión

$$\zeta_1 = -\frac{4}{nTd^2} \omega[f^{(0)}, \text{Tr } \mathcal{C}]. \quad (5.31)$$

Aquí, $\text{Tr } \mathcal{C}$ denota la traza del tensor \mathcal{C} . Si sustituimos ahora (5.29) en (5.25) e identificamos los coeficientes de los distintos gradientes,

resulta un sistema de ecuaciones diferenciales para los distintos coeficientes que aparecen en la expresión de $f^{(1)}$

$$-\zeta^{(0)}T \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial T} - T \frac{\partial \zeta^{(0)}}{\partial T} \mathcal{A} + \mathcal{L}\mathcal{A} = \mathbf{A}, \quad (5.32)$$

$$-\zeta^{(0)} \mathcal{A} - \zeta^{(0)}T \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial T} + \mathcal{L}\mathcal{B} = \mathbf{B}, \quad (5.33)$$

$$-\zeta^{(0)}T \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial T} + \mathcal{L}\mathcal{C} - T \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} \zeta_{1l} = \mathbf{C}. \quad (5.34)$$

La solución de esta ecuación proporciona la corrección de primer orden en los gradientes de la función de distribución $f^{(1)}$. Pasamos ahora a calcular las contribuciones en este orden al tensor de presiones y al flujo de calor. Utilizando (5.16) podemos escribir el tensor de presiones como

$$\mathbf{P}^{(1)} = m \int d\mathbf{V} \mathbf{V}\mathbf{V} f^{(1)}(\mathbf{V}) = \int d\mathbf{V} \mathbf{D}(\mathbf{V}) f^{(1)}(\mathbf{V}), \quad (5.35)$$

siendo \mathbf{D} la matriz de traza nula

$$\mathbf{D}(\mathbf{V}) \equiv m \left(\mathbf{V}\mathbf{V} - \frac{1}{d} V^2 \mathbf{1} \right). \quad (5.36)$$

Teniendo en cuenta la isotropía de los tensores involucrados, podemos reescribir el tensor de presiones en este orden como:

$$\mathbf{P}^{(1)} = \int d\mathbf{V} \mathbf{D}(\mathbf{V}) \mathcal{C}(\mathbf{V}) : \nabla \mathbf{u} = -\eta \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^+ - \frac{2}{d} \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{1} \right], \quad (5.37)$$

con $(\nabla \mathbf{u})^+$ la matriz transpuesta de $\nabla \mathbf{u}$, y siendo η el coeficiente de viscosidad, cuya expresión es

$$\eta = -\frac{1}{d^2 + d - 2} \int d\mathbf{V} \mathbf{D}(\mathbf{V}) : \mathcal{C}(\mathbf{V}). \quad (5.38)$$

Procediendo de forma similar con el flujo de calor, se llega a

$$\mathbf{J}_q^{(1)} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n, \quad (5.39)$$

donde κ y μ son los coeficientes de conducción de calor térmico y difusivo respectivamente, dados por

$$\kappa = -\frac{1}{Td} \int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathcal{A}(\mathbf{V}), \quad (5.40)$$

$$\mu = -\frac{1}{nd} \int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{V}), \quad (5.41)$$

con

$$\mathbf{S}(\mathbf{V}) \equiv \left(\frac{mV^2}{2} - \frac{d+2}{2}T \right) \mathbf{V}. \quad (5.42)$$

Señalamos en este punto que μ es un nuevo coeficiente que relaciona el flujo de calor y el gradiente de densidad peculiar de las colisiones inelásticas [77]. Definimos ahora las frecuencias

$$\nu_\eta \equiv \frac{\int d\mathbf{V} \mathbf{D}(\mathbf{V}) : \mathcal{L}\mathcal{C}(\mathbf{V})}{\int d\mathbf{V} \mathbf{D}(\mathbf{V}) : \mathcal{C}(\mathbf{V})}, \quad (5.43)$$

$$\nu_\kappa \equiv \frac{\int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathcal{L}\mathbf{A}(\mathbf{V})}{\int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{V})}, \quad (5.44)$$

$$\nu_\mu \equiv \frac{\int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathcal{L}\mathbf{B}(\mathbf{V})}{\int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{V})}. \quad (5.45)$$

Con estas expresiones podemos utilizar las ecuaciones (5.32)-(5.34) para obtener un sistema de ecuaciones para los coeficientes de transporte [78]

$$\left(\zeta^{(0)}T \frac{\partial}{\partial T} - \nu_\eta \right) \eta = -\frac{1}{d^2 + d - 2} \int d\mathbf{V} \mathbf{D} : \mathcal{C}(\mathbf{V}) = -nT, \quad (5.46)$$

$$\begin{aligned} \left[-\zeta^{(0)}T \frac{\partial}{\partial T} - \nu_\kappa + \frac{\partial(T\zeta^{(0)})}{\partial T} \right] \kappa &= \frac{1}{Td} \int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \mathbf{A}(\mathbf{V}) = \\ &= -\frac{(d+2)nT}{2m} \left(1 + 2a_2 + T \frac{\partial a_2}{\partial T} \right), \end{aligned} \quad (5.47)$$

$$\left(\zeta^{(0)}T \frac{\partial}{\partial T} - \nu_\mu \right) \mu + \frac{\zeta^{(0)}T\kappa}{n} = \frac{1}{Td} \int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \mathbf{B}(\mathbf{V}) = -\frac{(d+2)T^2}{2m} a_2, \quad (5.48)$$

donde también se ha utilizado, a la hora de calcular las distintas integrales, la segunda aproximación de Sonine para $f^{(0)}$. Para poder utilizar estas ecuaciones necesitamos evaluar las distintas frecuencias. Esto se lleva a cabo en el Apéndice C, resultando las expresiones (C.7) y (C.8). En las figuras 5.1 y 5.2 se representan las curvas hidrodinámicas de los distintos coeficientes de transporte, obtenidas

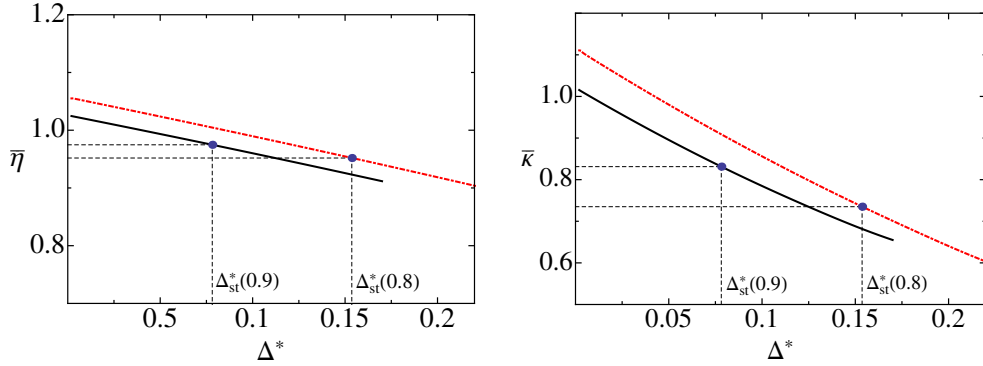


FIGURA 5.1: Viscosidad (izquierda) y conductividad térmica (derecha) como función de Δ^* para $\alpha = 0.9$ (línea negra continua) y $\alpha = 0.8$ (línea roja a trazos). En ambas gráficas los puntos azules representan el estado estacionario.

de la solución numérica de las ecuaciones (5.46)-(5.48) para dos valores distintos del coeficiente de restitución normal. Concretamente representamos los coeficientes de transporte adimensionales

$$\bar{\eta} \equiv \frac{\eta}{\eta_0}, \quad \bar{\kappa} \equiv \frac{\kappa}{\kappa_0}, \quad \bar{\mu} \equiv \frac{n\mu}{T\kappa_0}, \quad (5.49)$$

con

$$\eta_0 = \frac{d+2}{8} \Gamma(d/2) \pi^{-(d-1)/2} (mT)^{1/2} \sigma^{-(d-1)}, \quad (5.50)$$

$$\kappa_0 = \frac{d(d+2)^2}{16(d-1)} \Gamma(d/2) \pi^{-(d-1)/2} \left(\frac{T}{m}\right)^{1/2} \sigma^{-(d-1)}. \quad (5.51)$$

Estas gráficas se obtienen, como en casos anteriores, imponiendo condiciones iniciales arbitrarias. Se observa como las distintas trayectorias tienden a una solución independiente de las condiciones iniciales, que identificamos como las soluciones normales de los coeficientes. En las figuras se representa con línea continua (negro) los valores correspondientes a $\alpha = 0.9$, con la línea a trazos (rojo) los resultados para $\alpha = 0.8$ y los puntos señalan el estado estacionario. Merece la pena señalar en este punto que el hecho de que μ pueda tomar valores negativos no viola a priori ninguna ley física ni simetría fundamental.

En el Apéndice D se obtiene una ecuación para ζ_1 . En la figura 5.2 se muestra la solución normal de la ecuación. La curva continua

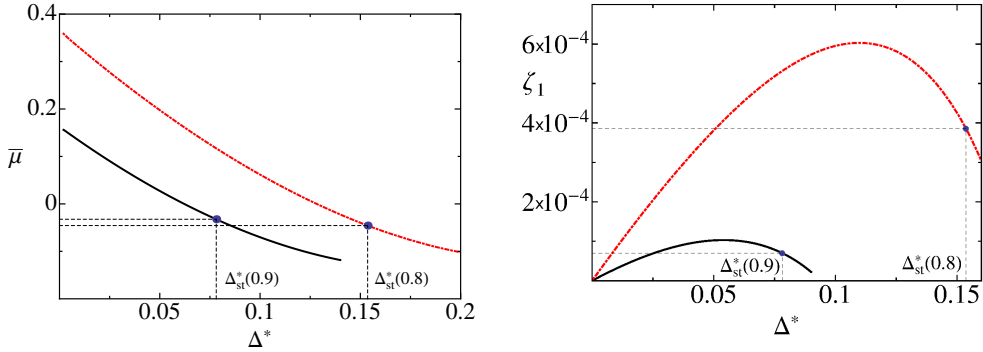


FIGURA 5.2: El coeficiente de conducción difusivo (izquierda) y la primera corrección en gradientes de la velocidad de cambio de la temperatura ζ_1 (derecha) como función de Δ^* para $\alpha = 0.9$ (línea negra continua) y $\alpha = 0.8$ (línea roja a trazos). Los puntos azules indican el estado estacionario del sistema.

(negro) corresponde a la solución para $\alpha = 0.9$ y la línea a trazos (rojo) a $\alpha = 0.8$, siguiendo el mismo método utilizado para los coeficientes de transporte.

En el estado estacionario se cumple $\zeta^{(0)}(\Delta_{st}^* a_{2,st}) = 0$, anulándose los términos que incluyen a las derivadas de la temperatura en las diferentes ecuaciones para los coeficientes de transporte y para ζ_1 . De este modo, resulta posible obtener expresiones analíticas para los coeficientes en este estado:

$$\bar{\eta}_{st} = \frac{2^{5/2} \pi^{(d-1)/2}}{(d+2)\Gamma(d/2)} \bar{\nu}_\eta^{-1}(\Delta_{st}^*, a_{2,st}), \quad (5.52)$$

$$\begin{aligned} \bar{\kappa}_{st} = & \frac{2^{5/2} (d-1) \pi^{(d-1)/2}}{d(d+2)\Gamma(d/2)} \left[1 + a_{2,st} - \frac{\Delta_{st}^*}{2} \left(\frac{\partial a_2}{\partial \Delta^*} \right)_{\Delta^* = \Delta_{st}^*} \right] \\ & \times \left[\bar{\nu}_\kappa(\Delta_{st}^*, a_{2,st}) + \frac{\Delta_{st}^*}{2} \left(\frac{\partial \bar{\zeta}^{(0)}}{\partial \Delta^*} \right)_{\Delta^* = \Delta_{st}^*} \right]^{-1}, \quad (5.53) \end{aligned}$$

$$\bar{\mu}_{st} = \frac{2^{5/2} (d-1) \pi^{(d-1)/2} a_{2,st}}{d(d+2)\Gamma(d/2) \bar{\nu}_\kappa(\Delta_{st}^*, a_{2,st})}, \quad (5.54)$$

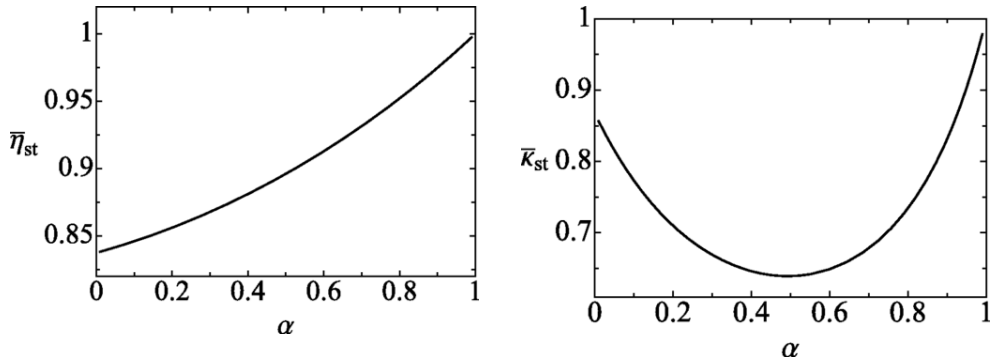


FIGURA 5.3: La viscosidad (izquierda) y la conductividad térmica (derecha) en el estado estacionario como funciones del coeficiente de restitución normal α .

$$\zeta_{1,st} = 2\Delta_{st}^* \left(\frac{\partial a_2}{\partial \Delta^*} \right)_{\Delta^*=\Delta_{st}^*} \bar{\zeta}_1(\Delta_{st}^*) \left\{ \frac{8\chi(\Delta_{st}^*)}{d(d+2)} + d\bar{\zeta}_1(\Delta_{st}^*) \left[4(a_{2,st} + 1) - \Delta_{st}^* \left(\frac{\partial a_2}{\partial \Delta^*} \right)_{\Delta^*=\Delta_{st}^*} \right] \right\}^{-1}. \quad (5.55)$$

En las expresiones anteriores, las distintas frecuencias adimensionales que aparecen están definidas como $\bar{\nu} = \frac{\nu}{n\sigma^{d-1}} \left(\frac{m}{2T} \right)^{1/2}$. En las figuras 5.3 y 5.4 representamos estos coeficientes como función de α . Es posible utilizar con buena aproximación estas expresiones sin resolver numéricamente la ecuación (4.25). Notamos que cuando Δ^* toma valores cercanos al estacionario se cumple $|\partial a_2 / \partial \Delta^*| \ll 1$ (ver figura 4.1). Utilizando ésto, podemos escribir a partir de (4.25)

$$a_2 \approx -\frac{B_0 + 4A_0}{B_1 + 4(A_0 + A_1)}, \quad (5.56)$$

con A_0 , A_1 , B_0 y B_1 dados por las ecuaciones (4.21)-(4.24).

Las ecuaciones que se obtienen de (5.6)-(5.8) sustituyendo los flujos por sus expresiones:

$$\mathbf{P} = nT\mathbf{I} - \eta \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^+ - \frac{2}{d} \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{I} \right], \quad (5.57)$$

$$\mathbf{J}_q = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n, \quad (5.58)$$

$$\zeta = \zeta^{(0)} + \zeta_1 \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (5.59)$$

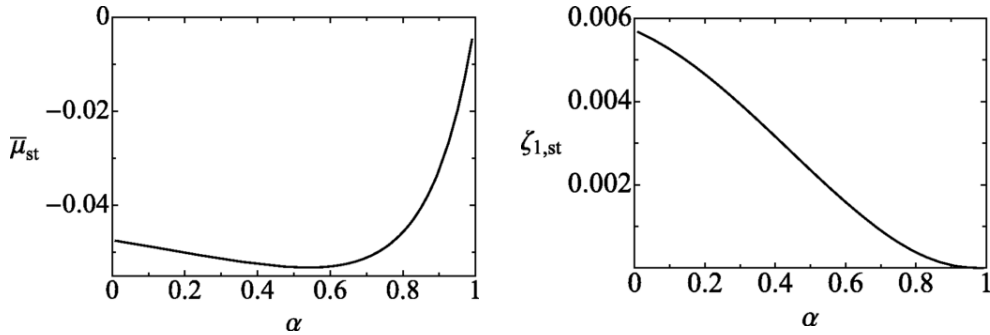


FIGURA 5.4: Coeficiente de conducción difusivo (izquierda) y el coeficiente asociado con la primera corrección en gradientes de la velocidad de cambio de la temperatura (derecha) como función de α .

son las ecuaciones de Navier-Stokes. Se han desarrollado el tensor de presiones y el flujo de calor hasta primer orden en los gradientes, lo que lleva a contribuciones de segundo orden en las ecuaciones. Teniendo esto en cuenta, lo consistente sería obtener las contribuciones de la velocidad de cambio de la temperatura también hasta el segundo orden. Sin embargo, en el único caso que conocemos en el que se ha estudiado la contribución de este orden, ha resultado ser pequeña comparada con términos similares que ya aparecen en la ecuación. Debido a esto y a que el cálculo de éste término resulta muy tedioso no lo consideramos aquí.

5.2 Estabilidad de la hidrodinámica homogénea

Una vez obtenidas las ecuaciones de Navier-Stokes para el sistema bidimensional efectivo, analizaremos la estabilidad lineal de la hidrodinámica homogénea estudiada en el Capítulo 4. Para ello, consideramos la evolución de las desviaciones escaladas de los campos hidrodinámicos con respecto a los valores homogéneos. Definimos

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{n(\mathbf{r}, t) - n_H}{n_H}, \quad (5.60)$$

$$\omega(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{v_{0H}(t)}, \quad (5.61)$$

$$\theta(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{T(\mathbf{r}, t) - T_H(t)}{T_H(t)}, \quad (5.62)$$

donde $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ y $T(\mathbf{r}, t)$ son los campos obtenidos de las ecuaciones de Navier-Stokes, n_H es la densidad media de partículas y $v_{0H}(t) = (2T_H(t)/m)^{1/2}$ la velocidad térmica definida a partir de la temperatura $T_H(t)$, cuya evolución viene dada por la ecuación (5.17). Las ecuaciones de evolución las obtenemos de introducir los campos hidrodinámicos en función de las perturbaciones dadas por (5.60)-(5.62) en las ecuaciones de Navier-Stokes. También es conveniente introducir a las variables adimensionales

$$ds \equiv \frac{v_{0H}(t)}{\ell} dt, \quad (5.63)$$

$$d\mathbf{l} \equiv \frac{d\mathbf{r}}{\ell}, \quad (5.64)$$

siendo $\ell \equiv (n_H \sigma)^{-1}$, proporcional al recorrido libre medio de las partículas. Pasamos ahora a la representación de Fourier con la transformada de los campos definida como

$$\tilde{\rho}_k(t) \equiv \int d\mathbf{l} \exp^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} \rho(\mathbf{l}, t), \quad (5.65)$$

y similarmente los demás. Por último, suponemos que nos mantenemos en un régimen en que las desviaciones con respecto a los campos homogéneos es pequeña, de modo que podemos despreciar los términos no lineales en $\tilde{\rho}(\mathbf{r}, t)$, $\tilde{\omega}(\mathbf{r}, t)$ y $\tilde{\theta}(\mathbf{r}, t)$ y sus derivadas. Se llega así a las ecuaciones de Navier-Stokes linealizadas para estos campos [79],

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_k}{\partial s} + i\mathbf{k} \cdot \tilde{\omega}_k = 0, \quad (5.66)$$

$$\frac{\partial \tilde{\omega}_k}{\partial s} - \frac{\bar{\zeta}_H^{(0)}}{2} \tilde{\omega}_k + \frac{i\mathbf{k}}{2} (\tilde{\theta}_k + \tilde{\rho}_k) + \bar{\eta}_H \tilde{\omega}_k k^2 = \mathbf{0}, \quad (5.67)$$

$$\frac{\partial \tilde{\theta}_k}{\partial s} + (1 + \zeta_{1H}) i\mathbf{k} \cdot \tilde{\omega}_k + k^2 (\tilde{\kappa}_H \tilde{\theta}_k + \tilde{\mu}_H \tilde{\rho}_k) = -\tilde{\rho}_k \bar{\zeta}_H^{(0)} - \tilde{\theta}_k \psi_H. \quad (5.68)$$

Hemos definido:

$$\psi(\Delta^*) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \left\{ \frac{1 - \alpha^2}{2} \left(1 + \frac{3a_2}{16}\right) + \left(1 - \frac{a_2}{16}\right) \Delta^{*2} - \left[\frac{3}{32} (1 - \alpha^2) + \frac{\Delta^{*2}}{16} \right] \frac{\partial a_2}{\partial \Delta^*} \Delta^* \right\}, \quad (5.69)$$

y $\tilde{\eta}_H$, $\tilde{\kappa}_H$ y $\tilde{\mu}_H$ son las versiones adimensionales de los coeficientes de transporte,

$$\tilde{\eta}_H \equiv \frac{\eta_H}{mn_H \ell v_{0H}}, \quad \tilde{\kappa}_H \equiv \frac{\kappa_H}{n_H \ell v_{0H}}, \quad \tilde{\mu}_H \equiv \frac{\mu_H}{T_H \ell v_{0H}}. \quad (5.70)$$

La ecuación de evolución de la perturbación del campo de velocidades $\tilde{\omega}$ puede separarse en sus componentes paralela $\tilde{\omega}_{k\parallel}$ y perpendicular $\tilde{\omega}_{k\perp}$ al vector de onda \mathbf{k} , obteniéndose:

$$\frac{\partial \tilde{\omega}_{k\perp}}{\partial s} - \frac{\bar{\zeta}_H^{(0)}}{2} \tilde{\omega}_{k\perp} + \bar{\eta}_H \tilde{\omega}_{k\perp} k^2 = \mathbf{0}, \quad (5.71)$$

$$\frac{\partial \tilde{\omega}_{k\parallel}}{\partial s} - \frac{\bar{\zeta}_H^{(0)}}{2} \tilde{\omega}_{k\parallel} + \frac{ik}{2} (\tilde{\theta}_k + \tilde{\rho}_k) + \tilde{\eta}_H \tilde{\omega}_{k\parallel} k^2 = 0. \quad (5.72)$$

Debido a la dependencia temporal de Δ^* , que aparece en los distintos coeficientes de transporte, en la velocidad de cambio de la temperatura y en la función ψ , la dependencia temporal no puede ser escalada totalmente de las ecuaciones de evolución de las perturbaciones. Se observa que la ecuación para el campo de velocidades transversal $\tilde{\omega}_{k,\perp}$,

ecuación (5.71), está desacoplada de la del resto de campos, lo que permite su integración directa,

$$\tilde{\omega}_{k,\perp}(s) = \tilde{\omega}_{k,\perp}(0) \exp \int_0^s ds' \lambda_{\perp}(s'), \quad (5.73)$$

donde

$$\lambda_{\perp}(s) \equiv \frac{\bar{\zeta}^{(0)}}{2} - \tilde{\eta}_H k^2. \quad (5.74)$$

Del resultado anterior se sigue que los modos cuyo número de ondas k cumpla que $k < k_{\perp}(s)$, siendo

$$k_{\perp}(s) = \left(\frac{\bar{\zeta}_H^{(0)}}{2\tilde{\eta}_H} \right)^{1/2}, \quad (5.75)$$

crecen en el tiempo. En nuestro sistema, la temperatura puede tanto aumentar como disminuir en el tiempo. Para las situaciones de calentamiento homogéneo, en las que la velocidad de cambio de la temperatura es negativa, k_{\perp} es imaginario y por tanto $\tilde{\omega}_{k,\perp}$ decrece para todo k . En los casos en los que el sistema se encuentre enfriándose, la velocidad de cambio de la temperatura es positiva y por lo tanto $k_{\perp} \geq 0$. En consecuencia, los modos con un número de onda inferior a este valor crítico aumentan. Este número de onda crítico evoluciona en el tiempo a través de $\bar{\zeta}_H^{(0)}$ y $\tilde{\eta}_H$. Como la viscosidad se mantiene positiva y finita para todas las temperaturas, tenemos que al anularse $\bar{\zeta}_H^{(0)}$ a medida que el sistema se acerca al estado estacionario, k_{\perp} también tiende a 0. Por ello, aunque inicialmente haya perturbaciones del campo de velocidades transversal que puedan crecer en el tiempo, a medida que k_{\perp} decrece, todos los modos con $k \neq 0$ terminan decayendo antes o después. En el caso de la perturbación homogénea ($k = 0$), crece monótonamente hasta que el sistema alcanza el estado estacionario. Este aumento es sin embargo ficticio, pues se debe únicamente a la disminución de $v_0(T)$ a medida que el sistema se enfría, manteniéndose constante en todo momento el campo sin escalar.

Para el resto de campos no podemos realizar la integración del sistema en forma analítica, y por tanto no parece factible el análisis del

comportamiento de los correspondientes modos. Por ello, hemos procedido a la integración numérica del sistema de ecuaciones (5.66), (5.68) y (5.72) y, a continuación presentamos los resultados para ciertos valores concretos de los parámetros.

En la figura 5.5 se muestra la evolución de las distintas perturbaciones de los campos y de la temperatura en un caso de sistema calentándose, de modo que la perturbación del campo de velocidades transversales debe disminuir en el tiempo. El valor del coeficiente de restitución es $\alpha = 0.9$ y el número de onda es $k = 0.05\sigma^{-1}$. Representamos con línea continua (negra) la perturbación de la densidad, con línea discontinua larga (rojo) la de la temperatura, con línea punto raya (azul) la del campo longitudinal de velocidades y con línea a trazos cortos (verde) la del campo de velocidades transversal. También se muestra la desviación de la temperatura del valor estacionario a través de la función $\Delta T^* \equiv (T(s) - T_{st})/(100T_{st})$, representada mediante círculos (naranja). El valor inicial de la temperatura cumple que $\Delta^*(0) = 1 > \Delta_{st}^* \simeq 0.078$ y el de las perturbaciones $\tilde{\theta}_{0.05} = -10^{-3}$ y $\tilde{\rho}_{0.05} = \tilde{\omega}_{0.05\perp} = \tilde{\omega}_{0.05\parallel} = 10^{-3}$. Como esperábamos la perturbación del campo de velocidades transversal disminuye en el tiempo. El resto de perturbaciones muestra un comportamiento oscilatorio cuya amplitud también decae monótonamente hasta anularse.

En la figura 5.6 representamos la solución para un caso de enfriamiento, que corresponde a una temperatura inicial que cumple $\Delta^*(0) = 10^{-3} < \Delta_{st}^*$. Los resultados corresponden a las perturbaciones con número de onda $k = 0.2\sigma^{-1}$, de nuevo para $\alpha = 0.9$. Con este valor de $\Delta^*(0)$ el valor inicial de k_{\perp} dado por la ecuación (5.75) es $k_{\perp} \simeq 0.757 > k$, de modo que, de acuerdo con el análisis realizado anteriormente, se espera que la amplitud de la perturbación $\tilde{\omega}_{k,\perp}$ crezca inicialmente hasta el instante en el que $k_{\perp} = k$. A partir de ese momento debe de disminuir hasta anularse. Los valores iniciales de las distintas perturbaciones son $\tilde{\theta}_{0.2} = -10^{-3}$, $\tilde{\rho}_{0.2} = \tilde{\omega}_{0.2\parallel} = 10^{-3}$ y $\tilde{\omega}_{0.2\perp} = 10^{-4}$. La primera observación a destacar es que $\tilde{\omega}_{k,\perp}$ muestra el comportamiento esperado. El resto de perturbaciones exhiben un comportamiento oscilatorio, aumentando también su amplitud mientras crece la perturbación del campo de velocidades transversal, y decayendo posteriormente aunque en una escala de tiempo más rápida. El comportamiento es similar para otros valores de k , mientras inicialmente sea menor que k_{\perp} .

En base a los resultados anteriores podemos estar tentados a con-

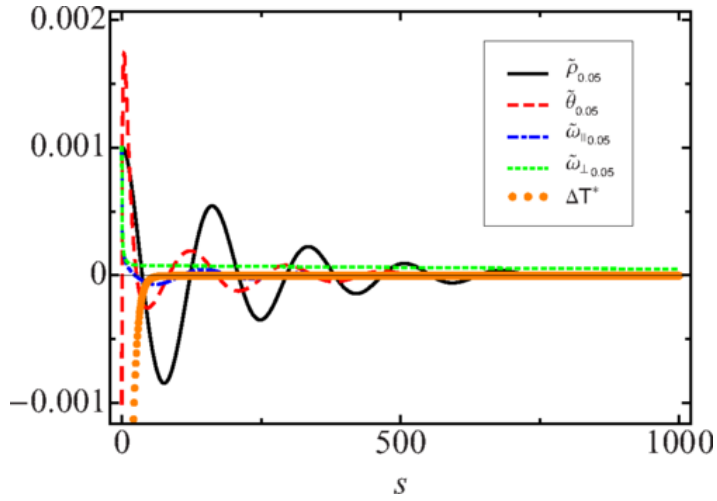


FIGURA 5.5: Evolución temporal de las perturbaciones de los campos hidrodinámicos con número de onda $k = 0.05\sigma^{-1}$ para un sistema con $\alpha = 0.9$ calentándose. La escala temporal y los valores iniciales de las perturbaciones y de la temperatura se dan en el texto principal.

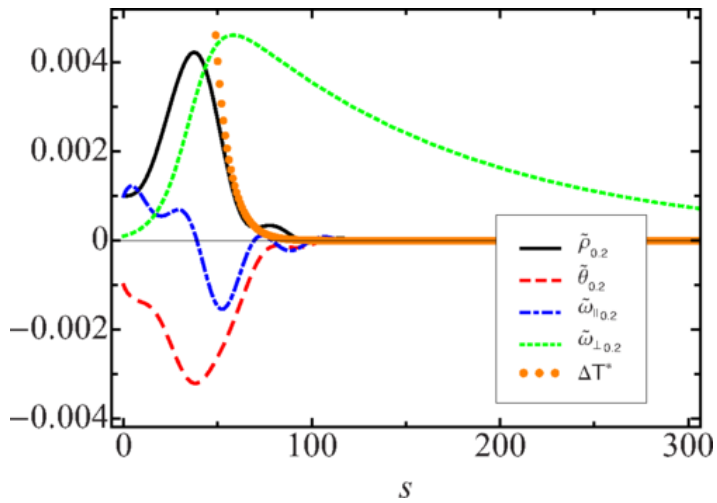


FIGURA 5.6: Evolución temporal de las perturbaciones de los campos hidrodinámicos con número de onda $k = 0.2\sigma^{-1}$ para un sistema con $\alpha = 0.9$ enfriándose. La escala temporal y los valores iniciales de las perturbaciones se dan en el texto.

cluid que la hidrodinámica homogénea es linealmente estable. Sin embargo, hay que considerar que las perturbaciones pudieran crecer lo suficiente como para hacer necesario tener en cuenta el efecto de las contribuciones no lineales a las ecuaciones de evolución de los campos hidrodinámicos. Para estudiar esta posibilidad hemos llevado a cabo simulaciones del sistema bidimensional efectivo, en el que las partículas interactúan con la regla de colisión (3.5), utilizando el método de Dinámica Molecular. En las simulaciones consideramos una caja cuadrada de lado $L = 200\sigma$ con $N = 2000$ discos duros inelásticos con $\alpha = 0.7$, de modo que la densidad numérica media del sistema es $n = 0.05\sigma^{-2}$. Simulamos el sistema en situaciones de enfriamiento, en las que hemos visto cómo las perturbaciones crecen espontáneamente, partiendo de una temperatura inicial mucho mayor que la estacionaria, concretamente se cumple $T_{st} = 9.7 \times 10^{-8}T(0)$. Para la velocidad característica tomamos el valor $\Delta = 10^{-4}v_0(0)/\sqrt{2}$. Los resultados que presentamos corresponden a una única trayectoria en la que no se imponen perturbaciones iniciales sino que éstas se producen de forma espontánea en el sistema. Al imponer condiciones de contorno periódicas en las simulaciones, los valores del número de ondas permitidos cumplen que $k = n\frac{2\pi}{L}$, siendo n un número entero. Por otra parte, los modos con un número de onda menor son los que nos interesan, ya que son estos los que mostrarán mejor el comportamiento inestable y, al estar asociados a longitudes de onda mayores, los más adecuados para al límite de gradientes pequeños que estamos estudiando. Por ello en nuestro estudio nos centramos en el valor $k = k_{min} \equiv \frac{2\pi}{L}$, que es el menor número de onda que podemos estudiar en las simulaciones. Las componentes de la transformada de Fourier de los campos de densidad y velocidad están definidas salvo una constante de proporcionalidad como:

$$\tilde{u}_{x,\perp,k_{min}}^{(1)} = \sum_{i=1}^N \frac{v_{i,x}}{v_0(t)} \cos \frac{2\pi y_i}{L}, \quad (5.76)$$

$$\tilde{u}_{x,\perp,k_{min}}^{(2)} = \sum_{i=1}^N \frac{v_{i,x}}{v_0(t)} \sin \frac{2\pi y_i}{L}, \quad (5.77)$$

$$\tilde{u}_{x,\parallel,k_{min}}^{(1)} = \sum_{i=1}^N \frac{v_{i,x}}{v_0(t)} \cos \frac{2\pi x_i}{L}, \quad (5.78)$$

$$\tilde{u}_{x,\parallel,k_{min}}^{(2)} = \sum_{i=1}^N \frac{v_{i,x}}{v_0(t)} \sin \frac{2\pi x_i}{L}, \quad (5.79)$$

$$\tilde{n}_{k_{min}}^{(x,1)} = \sum_{i=1}^N \cos \frac{2\pi x_i}{L}, \quad (5.80)$$

$$\tilde{n}_{k_{min}}^{(x,2)} = \sum_{i=1}^N \sin \frac{2\pi x_i}{L}. \quad (5.81)$$

Hay que tener en cuenta que estos no son los campos $\tilde{\rho}_k$ y $\tilde{\omega}_k$, y que los valores iniciales de las perturbaciones y del número de onda son distintos a los utilizados para obtener las soluciones numéricas de las ecuaciones de estabilidad lineal, por lo que la comparación de estas simulaciones con los resultados anteriores debe ser cualitativa. En las figuras 5.7 y 5.8 representamos las transformadas de las velocidades, dadas por las ecuaciones (5.76)-(5.79), en las direcciones x e y frente a τ , el número acumulado de colisiones por partícula (proporcional a la escala s introducida en la ecuación (5.63)), para una misma trayectoria simulada. Lo primero que se observa es que en la dirección x la desviación de las componentes del campo de velocidades transversales aumenta inicialmente en el tiempo, disminuyendo posteriormente, consistentemente con lo que habíamos obtenido del análisis teórico de las ecuaciones lineales. Las componentes del campo de velocidades longitudinal muestran un comportamiento oscilatorio con un máximo en su amplitud, que ocurre al mismo tiempo que el campo transversal alcanza el suyo. Algo semejante ocurre en la dirección y , aunque en este caso el campo de velocidades transversal muestra un comportamiento oscilatorio, la amplitud de éste presenta la misma evolución que en la otra dirección al igual que el resto de las componentes. En general se observa en las simulaciones que cuando en una dirección el campo de velocidades transversal crece sin oscilar, en la dirección perpendicular lo hace oscilando.

En la figura 5.9 representamos las transformadas en dirección x e y de las perturbaciones del campo de densidad, para la misma trayectoria que en las figuras 5.7 y 5.8, en función del número acumulado de colisiones por partícula. Se observa que presentan un comportamiento oscilatorio y, de nuevo, la amplitud de las perturbaciones crece inicialmente, alcanzando un máximo en el mismo instante que las perturbaciones del campo de velocidad transversal. En la figura 5.10, se

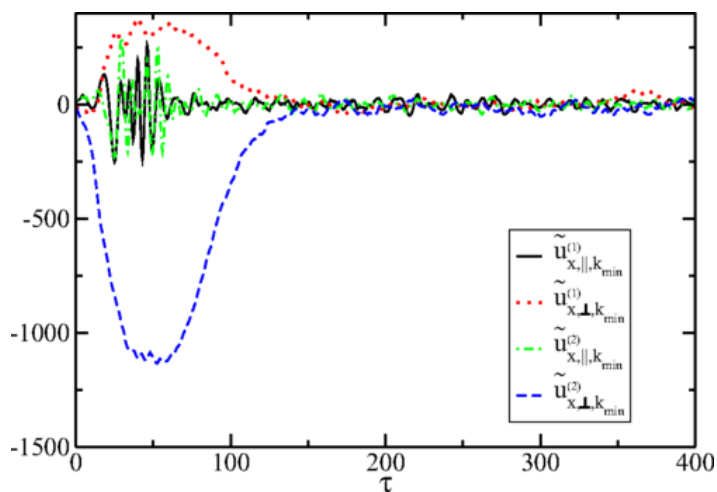


FIGURA 5.7: Evolución de las transformadas de las componentes longitudinal y transversal de la componente x del campo de velocidad, dadas por (5.76)-(5.79), obtenidas de las simulaciones de Dinámica Molecular para una situación de calentamiento.

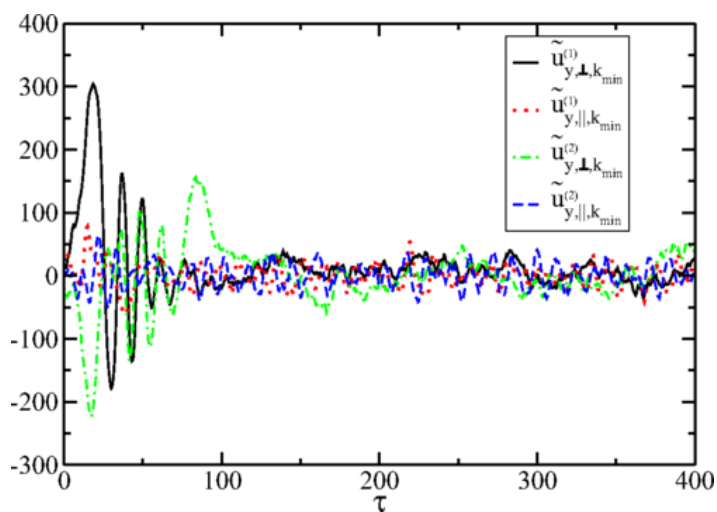


FIGURA 5.8: Evolución de las transformadas de las componentes longitudinal y transversal de la componente y del campo de velocidad, obtenidas de las simulaciones de Dinámica Molecular para la misma trayectoria que se representa en la figura 5.7.

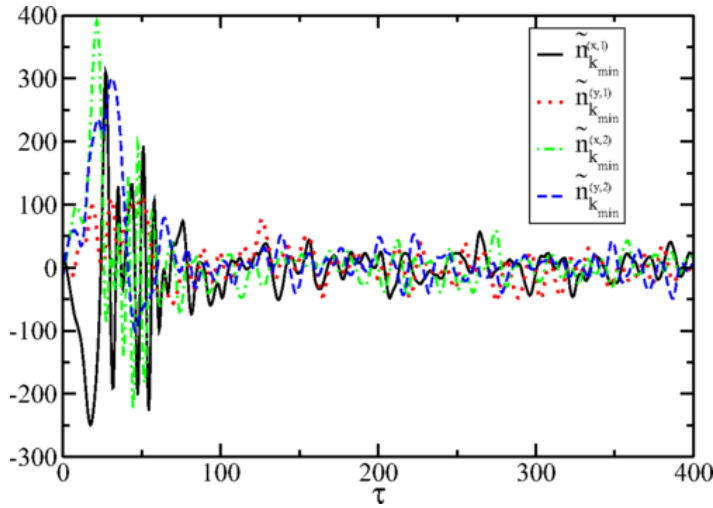


FIGURA 5.9: Evolución de las componentes de la transformada del campo de densidad en las direcciones x e y . Los resultados corresponden a la misma trayectoria para la que se ha representado las transformadas del campo de velocidades.

representa la posición de todas las partículas en el instante $\tau = 22.5$, cuando la amplitud de las perturbaciones alcanza un máximo. Se identifica un comportamiento claramente inhomogéneo, con una zona más poblada, que es lo que se denomina un agregado de partículas

Nuestro análisis de la evolución lineal de las componentes del campo de velocidades transversal resulta dar correctamente el crecimiento de la amplitud de la perturbación y su posterior disminución. No podemos justificar sin embargo los efectos no lineales como la aparición de agregados como los que se observan en la figura 5.10, o el aumento de la amplitud de las oscilaciones de las perturbaciones del campo de densidad, que parece estar acoplado al del campo de velocidades transversal. Estos efectos no lineales son sin embargo los que conducen finalmente al sistema a alcanzar el estado homogéneo dependiente del tiempo, por lo que podemos concluir que este es efectivamente estable. La conclusión es entonces que las ecuaciones hidrodinámicas obtenidas para el sistema con la regla de colisión efectiva, no presentan ninguna inestabilidad para los estados hidrodinámicos homogéneos, incluyendo como caso particular al estado estacionario. Por ello no parece que este modelo pueda describir

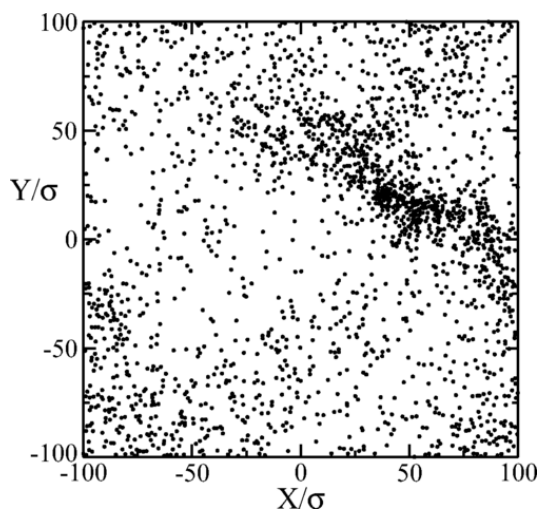


FIGURA 5.10: Imagen de la posición de las partículas del sistema para $\tau = 22.5$ en la misma trayectoria para la que hemos representado las transformadas de los campos de densidad y velocidad. El instante elegido coincide aproximadamente con cuando la amplitud de la transformada del campo de velocidades transversal alcanza un máximo.

el régimen bimodal observado en los experimentos de medios granulares vibrados confinados casi-bidimensionalmente. La consecuencia es que el modelo debe modificarse si se quieren describir los ricos comportamientos hidrodinámicos observados experimentalmente.

Capítulo 6

Intruso en un medio granular vibrado confinado

En los capítulos anteriores, hemos comprobado, mediante cálculos analíticos y simulaciones, cómo el modelo colisional efectivo propuesto en [11] no es capaz de reproducir el comportamiento del sistema granular vibrado casi bidimensional en lo que se refiere a la existencia de inestabilidades hidrodinámicas. Por otra parte, el uso de una regla de colisión efectiva es especialmente atractiva, facilitando el estudio analítico del sistema al no tener que considerar la interacción de las partículas con las paredes confinantes. Por lo tanto resulta interesante plantearse cuáles son los cambios que sería necesario realizar en la regla de colisión efectiva para que describa correctamente, al menos a nivel cualitativo, el efecto de la vibración en el plano perpendicular.

En este sentido, para identificar los factores más relevantes en la interacción entre partículas y analizar cómo se transfiere la energía entre los grados de libertad paralelos y perpendiculares a la vibración, realizamos simulaciones del sistema vibrado confinado mediante el método de Dinámica Molecular utilizando la dinámica inelástica original. En estas simulaciones estudiamos distintas propiedades del sistema confinado en el estado estacionario y cómo varían al introducir una partícula, a la que llamamos intruso, distinta a las demás. El efecto y la dinámica de un intruso han sido ampliamente estudiados en el caso de un medio granular en estado de enfriamiento homogéneo [80–82]. En nuestro sistema vibrado la única propiedad del intruso diferente de las del resto de partículas va a ser su masa,

a la que le damos un valor doble que la de las partículas del baño, manteniendo el mismo diámetro y coeficiente de restitución. Debido a que ahora en una colisión las masas de las dos partículas involucradas pueden ser distintas, es necesario generalizar la regla de colisión considerando esta posibilidad. Para la colisión entre las partículas i y j es

$$\begin{aligned}\mathbf{v}'_i &= \mathbf{v}_i - (1 + \alpha) \frac{m_j}{m_i + m_j} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \\ \mathbf{v}'_j &= \mathbf{v}_j + (1 + \alpha) \frac{m_i}{m_i + m_j} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g}) \hat{\boldsymbol{\sigma}},\end{aligned}\quad (6.1)$$

siendo m_i y m_j las masas de cada una de las partículas involucradas. Esta regla de colisión, que conserva la cantidad de movimiento, es equivalente a (3.2) cuando se consideran partículas con la misma masa y solo difiere cuando el intruso se encuentra involucrado en la colisión. En las simulaciones, partiendo de una situación inicial arbitraria, se deja evolucionar al sistema hasta que alcanza un estado estacionario, en el cual comenzamos a tomar los datos, que se promedian típicamente sobre unas 200 trayectorias. Todas las simulaciones se realizan con $N = 586$ partículas y un coeficiente de restitución $\alpha = 0.9$. La separación entre las paredes paralelas confinantes es $h = 1.5\sigma$, y la celda base del sistema es un cuadrado de lado L . En concreto, realizamos simulaciones considerando dos valores distintos para L , uno $L = 100\sigma$, de modo que la densidad media en el plano es $n \simeq 0.06\sigma^{-2}$ y nos encontramos en el límite diluido, y otro $L = 40\sigma$, con lo que $n \simeq 0.37\sigma^{-2}$. Como referencia, realizamos también en cada caso simulaciones del sistema homogéneo sin intruso.

6.1 Resultados

Antes de comenzar a presentar los resultados señalamos que, cuando el sistema se encuentra en el estado estacionario, se observan cambios ocasionales en su comportamiento para las dos densidades estudiadas. En estas situaciones, de las que hablaremos al final del capítulo, varias propiedades de la dinámica del intruso, tales como su frecuencia de colisión con las paredes y con las partículas del baño o su energía cinética, varían de forma importante llegando a afectar sensiblemente la dinámica del baño. Sin embargo, estos cambios son suficientemente

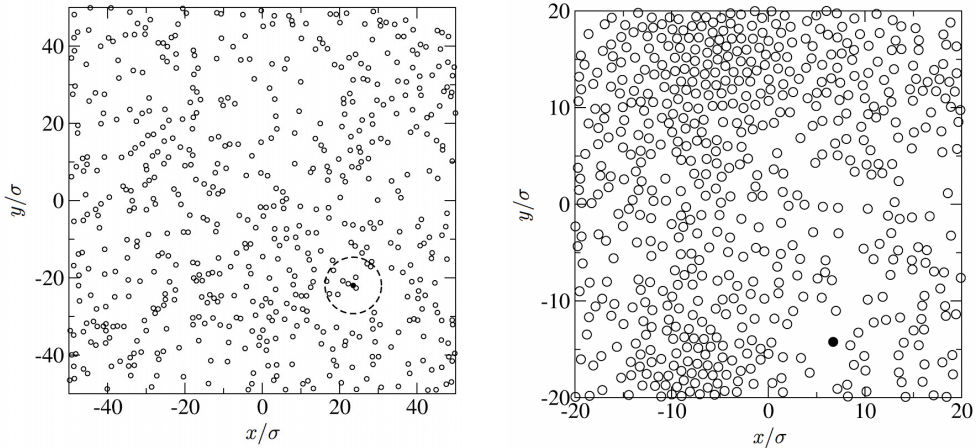


FIGURA 6.1: Configuración espacial típica de las partículas en el sistema vibrado con intruso para los sistemas diluido (izquierda) y denso (derecha). En ambas figuras se señala el intruso como el disco de negro. Como ayuda se indica en el caso diluido con una circunferencia a trazos la posición del intruso (centro del círculo).

poco frecuentes y de corta duración como para poder hablar en general de un estado estacionario. Dejando a un lado este fenómeno, destaca en las simulaciones la diferencia entre ambos sistemas en la distribución de las partículas en el plano perpendicular a la vibración cuando el sistema alcanza el estado estacionario, como puede observarse en la figura 6.1. En nuestro sistema la presencia del intruso de superior masa hace que éste se vuelva intrínsecamente inhomogéneo pero, mientras que en el caso menos denso la densidad numérica del sistema en el plano se mantiene aproximadamente homogénea, para el sistema más denso pueden aparecer zonas claramente más densas compuestas por partículas del baño mientras que el intruso se sitúa en la zona más diluida. Esta diferencia no se produce en los sistemas sin intruso, en los que la distribución de las partículas se mantiene homogénea en ambos casos. Un efecto similar se da en el caso del intruso en el medio granular en enfriamiento homogéneo donde, dependiendo de la razón entre las velocidades de cambio de la temperatura del intruso y del fluido, el intruso puede presentar comportamientos muy diferentes pasando por ejemplo de una dinámica difusiva a balística [83].

Un primer resultado de las simulaciones es la función de correlación de pares con la que medimos la razón entre la densidad a una distancia

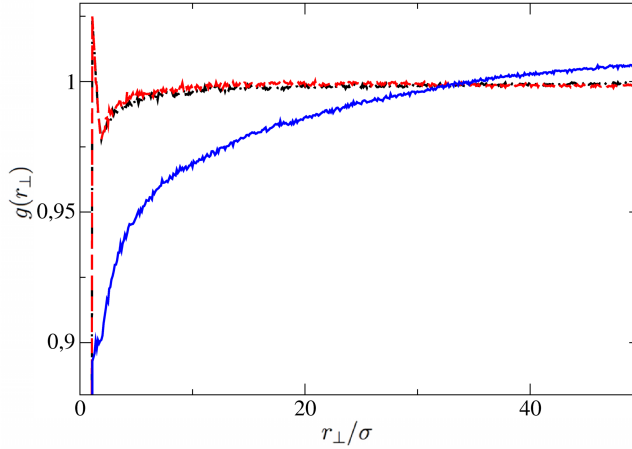


FIGURA 6.2: Función de correlación de pares del baño (línea a trazos) y el intruso (línea continua) así como la de las partículas del sistema de referencia sin intruso (línea de puntos y trazos) con $n \simeq 0.06\sigma^{-2}$.

r_{\perp} , siendo r_{\perp} el módulo de la proyección de \mathbf{r} en el plano perpendicular a la vibración, y la densidad media del sistema. Aunque en algunas situaciones el sistema sea claramente inhomogéneo, medimos solo en función de r_{\perp} dado que las zonas más densas se deforman y cambian de posición constantemente, de modo que no es posible identificar un agregado permanente que defina una dirección preferente. En la figura 6.2 representamos los resultados del caso menos denso. La línea negra formada por puntos y guiones corresponde a las partículas del sistema sin intruso, la línea roja discontinua al baño y la línea azul continua al intruso. Vemos como el comportamiento de $g(r_{\perp})$ apenas varía para el baño al introducir el intruso, mientras que para éste muestra una tendencia diferente, indicando que en su entorno más cercano se encuentran menos partículas por unidad de área. Las mismas funciones se muestran en la figura 6.3 para el sistema con $n \simeq 0.37\sigma^{-2}$. En este caso observamos cómo el comportamiento de las partículas del baño cambia sensiblemente con respecto a la situación sin intruso, y el valor de la función de correlación de pares disminuye con la distancia, indicando que en esta situación estas partículas tienden a estar más juntas. Por otra parte el comportamiento del intruso se mantiene en la línea del caso anterior aunque el efecto de separación se vuelve más pronunciado como puede apreciarse comparando las escalas verticales.

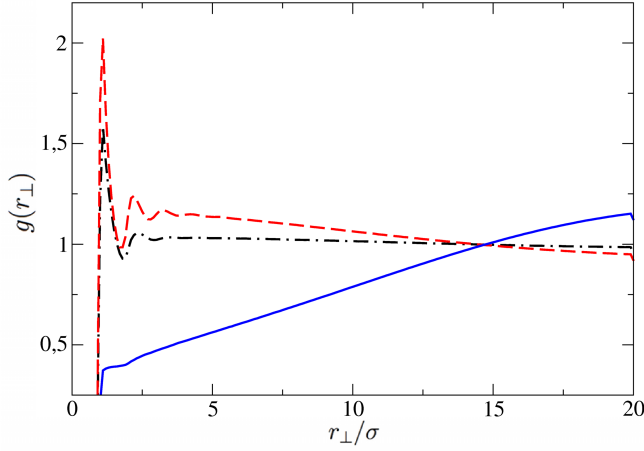


FIGURA 6.3: Función de correlación de pares del baño y el intruso así como la de las partículas del sistema de referencia sin intruso con $n \simeq 0.37\sigma^{-2}$. Los datos del sistema sin intruso se representan con la línea negra de puntos y trazos. En el sistema con intruso las líneas azul continua y roja a trazos corresponden al intruso y a las partículas del baño respectivamente.

A continuación presentamos los resultados para las distribuciones de velocidad en unidades de v_b , la velocidad de vibración de las paredes confinantes, de los diferentes tipos de partículas, tanto en la dirección de la vibración como en el plano perpendicular. En la dirección perpendicular al vibrado, las simulaciones muestran que el sistema es isótropo, con esto los datos presentados para v_{\perp} corresponden al promedio de dos componentes perpendiculares de la velocidad en este plano. Calculamos también, a partir de las distribuciones de velocidad, la temperatura granular en las diferentes direcciones y el coeficiente a_2 dado por la ecuación (3.46), valores que se muestran en la tabla 6.1. En las figuras 6.4 y 6.5 representamos las distribuciones correspondientes a las componentes perpendiculares a la dirección de vibración para el caso diluido y denso, respectivamente. En éstas, la línea de puntos y trazos corresponde al sistema sin intruso, mientras que la línea a trazos y la continua son las distribuciones para el baño y para el intruso respectivamente. Vemos en las gráficas y en los valores de la temperatura como la distribución para las partículas del baño se vuelve más ancha al introducir el intruso en ambos casos, aunque menos que la de éste último.

$n\sigma^2$	Caso	T_{\perp}/mv_b^2	$a_{2,\perp}$	T_{\parallel}/mv_b^2	$a_{2,\parallel}$
0.06	Sin intruso	$4.5 \cdot 10^4$	0.04	$1.1 \cdot 10^5$	0.07
0.06	Baño	$5.4 \cdot 10^4$	0.57	$1.2 \cdot 10^5$	0.28
0.06	Intruso	$1.7 \cdot 10^5$	1.23	$2.2 \cdot 10^7$	1.48
0.37	Sin intruso	554	0.24	$1.4 \cdot 10^3$	0.91
0.37	Baño	$3.4 \cdot 10^3$	4.87	$5.5 \cdot 10^3$	2.66
0.37	Intruso	$4.8 \cdot 10^4$	0.44	$1.1 \cdot 10^7$	-0.46

TABLA 6.1: Valores estacionarios de la temperatura y el coeficiente a_2 en las diferentes direcciones, tipos de partículas y casos. La temperatura se da en unidades de la velocidad de vibración de las paredes v_b y de m , la masa de las partículas del baño. La masa del intruso es $2m$.

Representamos también las distribuciones de velocidad en la dirección del vibrado en las figuras 6.6, para el caso diluido, y 6.7, para el más denso. La línea de puntos y trazos corresponde al sistema sin intruso y la línea a trazos al baño en presencia del intruso, cuya distribución se muestra con línea continua. De nuevo la distribución del baño se vuelve más ancha en presencia del intruso aunque es este quien muestra una mayor diferencia de comportamiento, siendo su temperatura varios ordenes de magnitud mayor. En las figuras 6.8 y 6.9 se representan las distribuciones para el baño y el intruso de modo que se puede apreciar mejor la de este último. Para el caso diluido vemos como las colas decaen mucho más lentamente, señalando como el intruso puede alcanzar velocidades verticales muy superiores a la de las partículas del baño. En el sistema con $n \simeq 0.37\sigma^{-2}$ la distribución cambia de forma presentando dos máximos, de modo que el intruso tiene un modulo medio de la velocidad superior al del caso diluido.

A continuación presentamos las distribuciones de n_{col} y de d_{col} , respectivamente el número de colisiones con las paredes que experimenta una partícula y la distancia que recorre en el plano perpendicular al vibrado entre dos colisiones sucesivas con otras partículas. Las figuras 6.10 y 6.11 corresponden al sistema diluido, concretamente las líneas negras de puntos y trazos son los datos para el sistema sin intruso, las líneas rojas a trazos los del baño y las azules continuas los del intruso. La distribución del número de colisiones con las paredes se mantiene prácticamente sin cambios para el baño con respecto al sistema de referencia mientras para el intruso la distribución decae

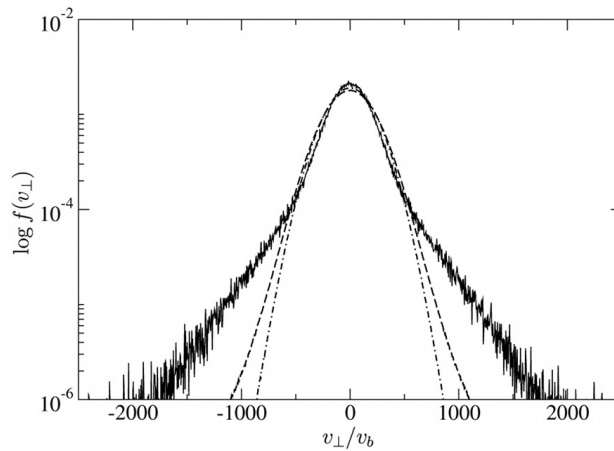


FIGURA 6.4: Distribuciones de velocidad en el plano perpendicular a la dirección del vibrado de los distintos tipos de partículas en el caso diluido. La línea punto-trazo corresponde a los datos del sistema sin intruso, la línea continua al intruso y la línea a trazos al baño.

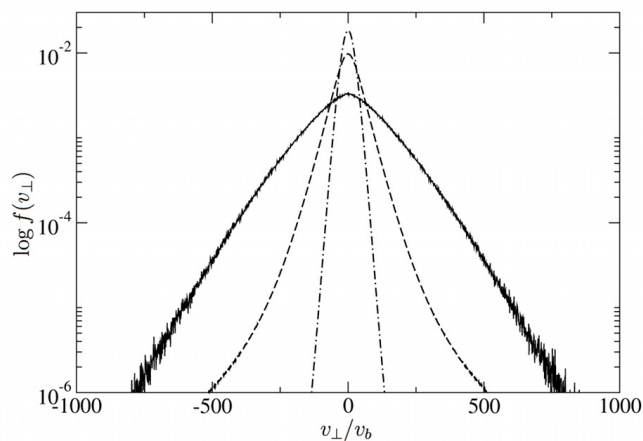


FIGURA 6.5: Distribución de velocidades en el plano perpendicular a la dirección del vibrado en el sistema más denso en ausencia de intruso (línea de puntos y trazos) y, en presencia de este, para el baño (línea a trazos) y el intruso (línea continua).

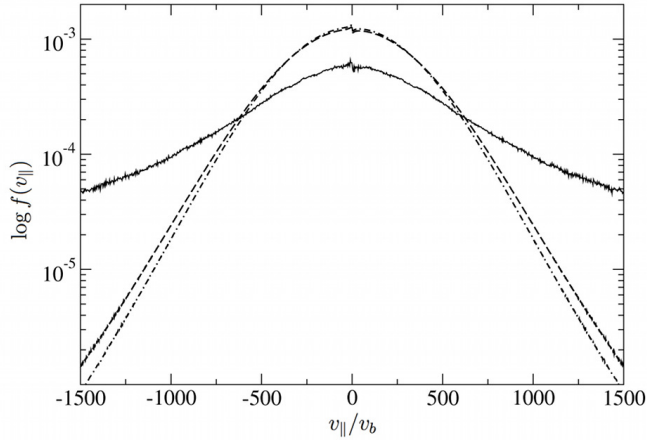


FIGURA 6.6: Función de distribución de la velocidad vertical en el estado estacionario para los distintos tipos de partículas en el sistema con $n \simeq 0.06\sigma^{-2}$. La línea punto-trazo corresponde al sistema sin intruso, la línea a trazos al baño y la línea continua al intruso.

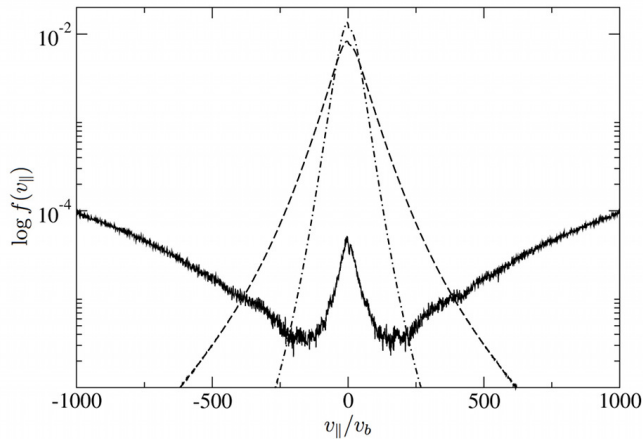


FIGURA 6.7: Función de distribución de la velocidad vertical en el estado estacionario para los distintos tipos de partículas en el sistema con $n \simeq 0.37\sigma^{-2}$. La línea de puntos y trazos corresponde al sistema sin intruso, la línea a trazos al baño y la línea continua al intruso.

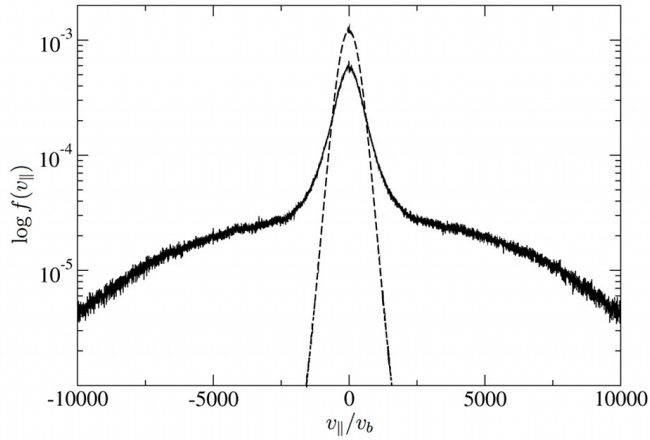


FIGURA 6.8: Distribución de la velocidad vertical en el estado estacionario para el baño (línea a trazos) y el intruso (línea continua) en el caso diluido. Puede verse como las colas de la distribución del intruso decaen más lentamente.

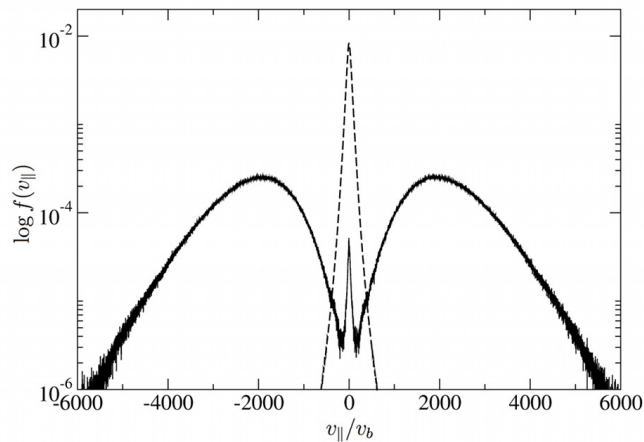


FIGURA 6.9: Distribución de velocidad vertical para el baño (línea a trazos) y el intruso (línea continua) en el caso denso pudiendo apreciarse como la distribución para este último.

$n\sigma^2$	Caso	$\langle n_{col} \rangle$	$\langle d_{col} \rangle$
0.06	Sin intruso	10.8	5.51
0.06	Baño	10.6	5.52
0.06	Intruso	67.3	5.68
0.37	Sin intruso	1.1	0.54
0.37	Baño	0.79	0.46
0.37	Intruso	53.3	2.23

TABLA 6.2: Número de medio de colisiones con las paredes y recorrido libre medio para las distintas situaciones y tipos de partículas.

más lentamente. Este mayor número de colisiones con las paredes concuerda con que el intruso tenga mayor velocidad en esta dirección como vimos antes. Por otra parte, las distribuciones de distancias recorridas son prácticamente idénticas para las distintas partículas.

En las figuras 6.12 y 6.13 representamos las mismas distribuciones para el sistema con $n \simeq 0.37\sigma^{-2}$. En el caso de las partículas del baño el número de colisiones con las paredes y la distancia recorrida entre colisiones disminuyen ligeramente con respecto a los del sistema de referencia, señalando que estas partículas se encuentran más cercanas entre sí. Lo contrario ocurre con el intruso que muestra un mayor número de colisiones con las paredes y una mayor distancia recorrida, de acuerdo también con el hecho de que, como ya hemos indicado, el intruso se sitúa en las zonas más diluidas al formarse las inhomogeneidades.

En la tabla 6.2 mostramos los valores medios del número de colisiones con las paredes y de la distancia recorrida entre colisiones entre partículas, el recorrido libre medio, calculados a partir estas distribuciones. En éstas puede apreciarse cómo el número medio de colisiones con las paredes aumenta significativamente para el intruso mientras que su recorrido libre medio solo es superior en el sistema denso, indicando, junto a la disminución de este valor para el baño, las inhomogeneidades que surgen en este caso.

Por último obtenemos la distribución de σ_{\parallel} , relacionada con el ángulo que forman la dirección de la colisión con la del vibrado y por tanto con la transferencia de velocidad entre los grados paralelos y perpendiculares a la vibración. En las figuras 6.14 y 6.15 mostramos estas distribuciones para el sistema diluido y denso respectivamente.

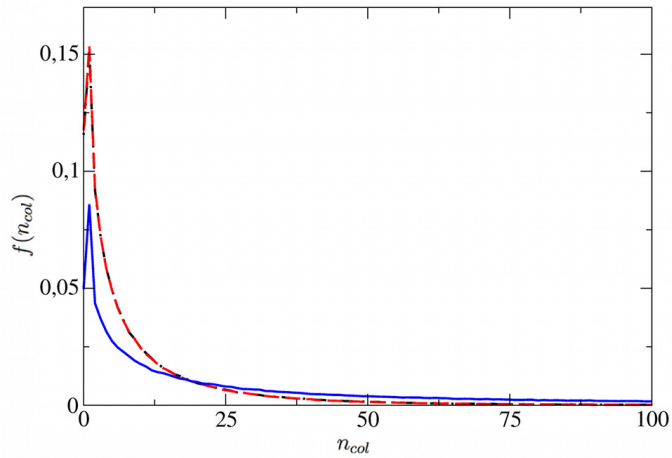


FIGURA 6.10: Distribución del número de colisiones con las paredes entre colisiones con otras partículas para los sistemas diluidos sin intruso (línea negra de puntos y trazos) y en presencia de éste (línea roja a trazos para el baño y azul continua para el intruso).

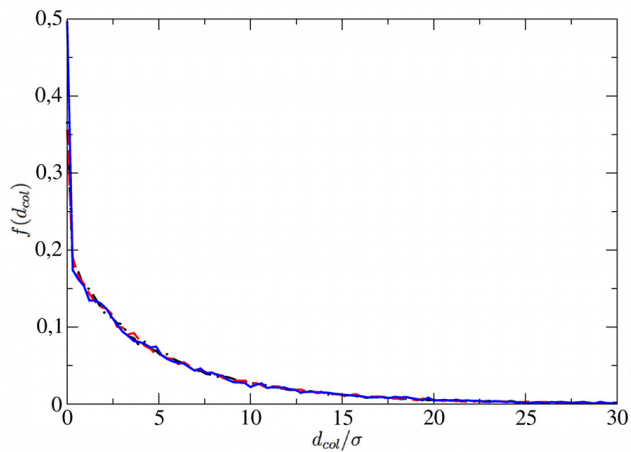


FIGURA 6.11: Función de distribución de la distancia recorrida entre colisiones entre dos partículas para los diferentes tipos de partículas en el sistema diluido.

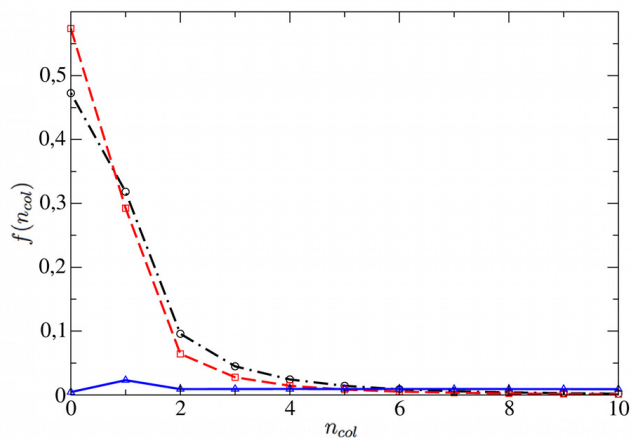


FIGURA 6.12: Distribución del número de colisiones con las paredes entre colisiones entre partículas. Los datos corresponden a los distintos tipos de partículas en el sistema denso.

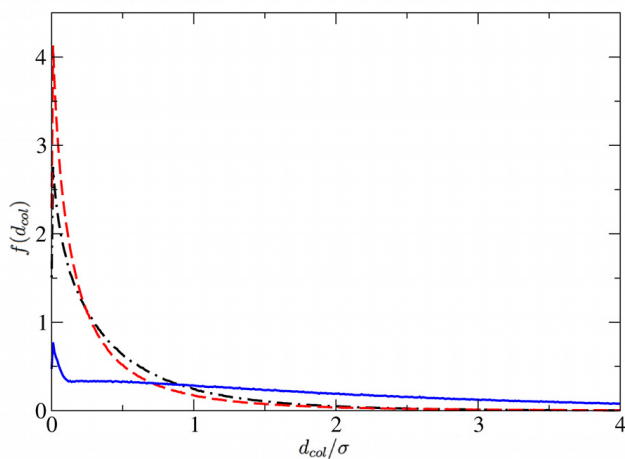


FIGURA 6.13: Distribuciones de la distancia recorrida entre colisiones con otras partículas en el sistema denso. La línea negra de puntos y trazos corresponde al sistema sin intruso, la línea roja a trazos al baño y la línea azul continua al intruso.

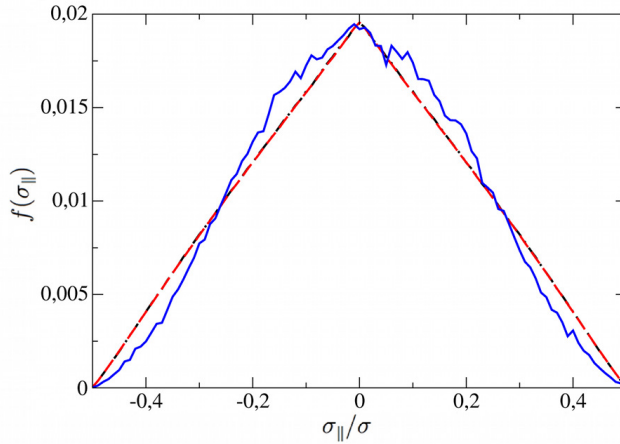


FIGURA 6.14: Distribución de σ_{\parallel} en el sistema con $n \simeq 0.06\sigma^{-2}$.

En éstas la línea negra de puntos y trazos representa los resultados del sistema sin intruso, la línea roja a trazos al baño y la azul continua al intruso. De nuevo vemos como en el sistema diluido el comportamiento de las partículas del baño cambia poco al introducir el intruso, mientras que para éste la distribución se deforma aumentando la probabilidad de colisión con un valor de σ_{\parallel} pequeño. Esta tendencia del intruso se ve más pronunciada en el sistema denso mientras que, en este caso, el comportamiento del baño muestra la tendencia contraria, aumentando ligeramente la probabilidad de las colisiones más verticales.

6.2 Análisis del sistema

Hemos visto cómo, a las dos densidades estudiadas, el intruso tiende a separarse del resto de partículas y tiene una temperatura granular mayor que la del baño en ambas direcciones, aunque más marcadamente en la dirección del vibrado. Por otra parte, la principal diferencia que apreciamos entre los dos casos es la aparición de zonas significativamente más densas en el caso más denso. Para analizar este comportamiento descomponemos la regla de colisión para la variación de la velocidad de una partícula en estas componentes obteniendo:

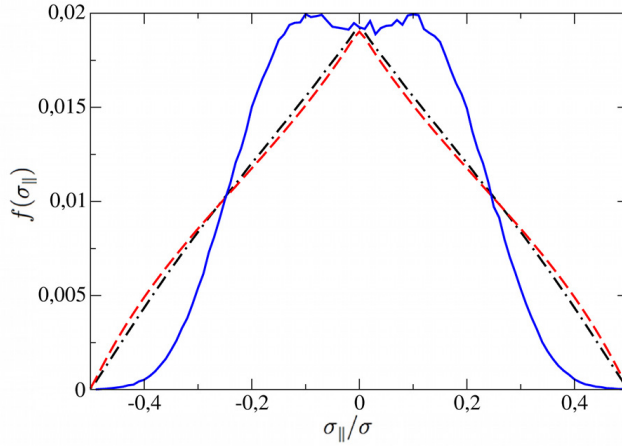


FIGURA 6.15: Distribución de σ_{\parallel} para los distintos tipos de partículas en el sistema con mayor densidad.

$$\Delta v_{\parallel,1} = -\frac{m_2}{m_1 + m_2}(1 + \alpha)(\sqrt{1 - \sigma_{\parallel}^2} \hat{\sigma}_{\perp} \cdot \mathbf{g}_{\perp} + \sigma_{\parallel} g_{\parallel}) \sigma_{\parallel}, \quad (6.2)$$

$$\Delta \mathbf{v}_{\perp,1} = -\frac{m_2}{m_1 + m_2}(1 + \alpha)(\sqrt{1 - \sigma_{\parallel}^2} \hat{\sigma}_{\perp} \cdot \mathbf{g}_{\perp} + \sigma_{\parallel} g_{\parallel}) \sqrt{1 - \sigma_{\parallel}^2} \hat{\sigma}_{\perp}. \quad (6.3)$$

Vemos en estas ecuaciones como para valores pequeños de σ_{\parallel} , atendiendo a los términos de distinto orden en esta variable, la mayor variación se produce en dirección horizontal debido a las componentes horizontales de la velocidad relativa, seguida por la transmisión de energía entre los distintos grados de libertad y siendo la variación vertical debida a las componentes de la velocidad en esta dirección el efecto menos relevante. En nuestro sistema confinado se impone una cota máxima al valor de σ_{\parallel} debido a que la separación entre las paredes es menor que 2σ . De este modo, por el efecto del confinado, en nuestro sistema la disipación de energía se produce principalmente en el plano perpendicular a la inyección, lo que hace que la temperatura sea superior en la dirección de vibración. Por otra parte, si la diferencia entre las velocidades de las partículas antes de la colisión es mayor en dirección del vibrado que en la perpendicular son más probables las colisiones con menor σ_{\parallel} .

El hecho de que el intruso tenga una masa superior al resto de partículas implica, como puede apreciarse en la regla de colisión 6.1, que su velocidad se ve menos alterada en las colisiones. Esto favorece el que las partículas del baño se alejen más rápido del intruso que de otras partículas tras una colisión, haciendo que haya menos partículas en su entorno como se observa en las funciones de correlación de pares. En esta situación, como hemos visto, el intruso choca más con las paredes, ganando más energía en la dirección de vibrado. Ahora, debido a que para colisiones entre el intruso y el baño la diferencia de velocidades en esta dirección aumenta más que en la perpendicular, se favorecen las colisiones de menor σ_{\parallel} , como puede observarse en las figuras 6.14 y 6.15, lo que hace que el intruso tienda a continuar ganando energía al mismo tiempo que el baño se calienta debido a las colisiones con éste.

A partir de este punto la diferencia de comportamientos entre los sistemas denso y diluido se debe a la respuesta del baño a las colisiones con el intruso. En el sistema diluido tenemos que el baño no disipa la energía transmitida por el intruso suficientemente rápido, de forma que su temperatura y frecuencia de colisión con el intruso aumentan. Este aumento en las colisiones consigue frenar el crecimiento de la energía vertical del intruso, alcanzándose el estado estacionario. Por otra parte, el baño del sistema denso es capaz de disipar esta energía aportada por el intruso, de modo que no se produce el aumento de colisiones. Así, la energía vertical del intruso continúa creciendo hasta que la transmisión de momento lineal en las colisiones favorece la aparición de zonas más densas en el baño. Estas zonas disipan más eficientemente la energía y son más estables frente a las colisiones del intruso, siendo en estos choques en los que el intruso pierde más energía pudiendo alcanzar el estado estacionario.

Para comprender mejor esta dinámica vamos a comentar los cambios de comportamiento que se observan en el estado estacionario. Aunque estos cambios se dan en los dos sistemas, se presentan de forma cualitativamente opuesta. En el sistema más denso tenemos que la energía cinética del intruso disminuye temporalmente, de forma que el baño se distribuye homogéneamente al tiempo que baja su temperatura. En el caso diluido lo que se observa es un aumento repentino de las temperaturas del intruso y del baño, que termina disipándose sin llegarse a formar inhomogeneidades. Mediante la reproducción de los datos de simulación y el análisis de las curvas de energía cinética

en el tiempo para ambos tipos de partícula, puede verse como es el intruso el que inicia estos eventos. En el caso diluido se observa cómo el intruso experimenta en cierto momento menos colisiones de lo normal con el baño aumentando su energía. De esta forma, en las colisiones posteriores, el baño se calienta y el intruso comienza a experimentar más colisiones, volviendo al estado anterior. En el sistema más denso, si el intruso pierde la suficiente energía en dirección del vibrado al chocar con más partículas de lo normal, se ve cómo, al no ganar el baño tanta energía en las colisiones con éste, los aglomerados desaparecen volviéndose el sistema homogéneo a la vez que disipa la energía que el intruso le ha transmitido. Esto se mantiene hasta que el baño se enfría lo suficiente para que el intruso vuelva a ganar energía.

Aunque hace falta mucho trabajo teórico y de simulación para terminar de comprender el comportamiento del sistema vibrado en presencia del intruso, podemos apreciar del análisis presentado que, a la hora de proponer una nueva regla de colisión efectiva que reproduzca mejor los sistemas vibrados confinados casi bidimensionalmente, ésta debe introducir el hecho de que la inyección de energía en las colisiones no es constante, incluyendo, entre otros factores, la dependencia de la transmisión de energía respecto de σ_{\parallel} y del número de colisiones con las paredes que ocurren entre dos colisiones partículas.

Capítulo 7

Conclusiones

A continuación resumimos los resultados más importantes presentados en esta memoria, así como algunas de las conclusiones que se siguen de la investigación realizada:

1. Se ha formulado en el contexto de una teoría de N cuerpos un modelo de gas confinado casi-bidimensionalmente de esferas duras inelásticas propuesto por Brito y colaboradores.
2. En el contexto anterior se formuló la ecuación de Liouville del sistema y se analiza la existencia de un estado estacionario, discutiendo sus propiedades.
3. Se ha mostrado que el sistema presenta una hidrodinámica homogénea, es decir, en ausencia de gradientes de los campos macroscópicos. El estudio de esta hidrodinámica restringida es un paso previo necesario para abordar la derivación de ecuaciones hidrodinámicas al nivel de Navier-Stokes.
4. En el régimen hidrodinámico homogéneo mencionado el sistema exhibe fenómenos de memoria análogos a los encontrados por Kovacs en los polímeros. El origen a nivel hidrodinámico de estos efectos ha sido identificado en forma precisa.
5. Se han deducido las ecuaciones hidrodinámicas en el orden de Navier-Stokes (primer orden en gradientes de los flujos) del modelo, identificando las expresiones de los coeficientes de transporte que vienen dados en la forma de "soluciones normales" de ecuaciones diferenciales ordinarias.

6. Utilizando las ecuaciones anteriores hemos abordado el estudio de la estabilidad lineal hidrodinámica del modelo. Se ha visto que, aunque son posibles efectos transitorios en los que una perturbación crece, los estados hidrodinámicos homogéneos son todos estables en el límite de tiempos largos.
7. Todos los resultados teóricos obtenidos se han comparado con resultados de simulación utilizando tanto el método de Dinámica Molecular como el método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC), éste último en el caso de estudios teóricos basados en la ecuación de Boltzmann.
8. En particular, los resultados de Dinámica Molecular han puesto de manifiesto la formación de estados transitorios en los que están presentes agregados (clusters) de partículas que desaparecen para tiempos suficientemente largos.
9. Queremos destacar que en las simulaciones se han utilizado algoritmos numéricos originales, es decir, elaborados por este doctorando y no paquetes comerciales.
10. Una de las conclusiones relevantes de esta investigación es que el modelo analizado, con una dinámica efectiva bidimensional, no es capaz de explicar las inestabilidades y los complejos estados observados experimentalmente. La búsqueda de un modelo adecuado es, sin duda, una interesante futura línea de investigación.
11. Para abordar lo anterior hemos comenzado por investigar la estructura interna del sistema confinado. Para ello se han analizado mediante técnicas de Dinámica Molecular los efectos que produce la adición de una partícula intrusa en el medio granular vibrado. La principal consecuencia sacada hasta ahora es la aparición de fuertes inhomogeneidades asociadas a fuerzas efectivas de largo alcance. Estos efectos dependen en gran medida de la densidad media del fluido donde se introduce el intruso.

Apéndice A

Cálculo de \bar{L}_+

Definimos el pseudo operador de Liouville adjunto \bar{L}_+ a partir de la relación:

$$\int d\Gamma B(\Gamma)W(\{\mathbf{r}_i\})L_+(\Gamma)A(\Gamma) = \int d\Gamma[\bar{L}_+(\Gamma)B(\Gamma)W(\{\mathbf{r}_i\})]A(\Gamma), \quad (\text{A.1})$$

donde, como ya se indicó en el cuerpo del texto, el pseudo operador de Liouville tiene la forma:

$$L_+(\Gamma) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} T_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j). \quad (\text{A.2})$$

Comenzamos con el término de evolución libre, el cual es directo de reconocer pues, despreciando efectos de superficie, tenemos que:

$$\begin{aligned} \int d\Gamma \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} [B(\Gamma)A(\Gamma)] &= 0 = \int d\Gamma B(\Gamma) \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} A(\Gamma) + \\ &+ \int d\Gamma \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} B(\Gamma) \right) A(\Gamma) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \int d\Gamma B(\Gamma) \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} A(\Gamma) = \int d\Gamma \left(- \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} B(\Gamma) \right) A(\Gamma). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Para el término que incluye al operador de colisión $T_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, a partir de la definición (A.1), el operador adjunto de colisión $\bar{T}_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ viene definido por:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{v}_i \int d\mathbf{v}_j F(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) T_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \\ = \int d\mathbf{v}_i \int d\mathbf{v}_j G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \bar{T}_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) F(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Descomponemos el operador de colisión en una parte real y otra virtual de modo que $T_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = T_+^{(r)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + T_+^{(v)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ definidas como:

$$T_+^{(r)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sigma^{d-1} \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) b_{\boldsymbol{\sigma}}(i, j), \quad (\text{A.5})$$

$$T_+^{(v)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sigma^{d-1} \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}). \quad (\text{A.6})$$

La identificación del adjunto de la parte virtual es también directa

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{v}_i \int d\mathbf{v}_j F(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) T_+^{(v)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \\ - \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_i \int d\mathbf{v}_j \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} F(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\ \times |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \\ - \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_i \int d\mathbf{v}_j \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} F(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\ \times |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \delta(\mathbf{r}_{ij} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}) G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Para la parte real tenemos:

$$\begin{aligned}
& \int d\mathbf{v}_i \int d\mathbf{v}_j F(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) T_+^{(r)}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \\
& \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_i \int d\mathbf{v}_j \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} F(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \\
& \quad \times \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) b_{\boldsymbol{\sigma}}(i, j) G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \\
& \sigma^{d-1} \alpha^{-1} \int d\mathbf{v}'_i \int d\mathbf{v}'_j \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} [b_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(i, j) F(\mathbf{x}'_i, \mathbf{x}'_j)] \theta\left(\frac{\mathbf{v}'_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}}{\alpha} - \frac{2\Delta}{\alpha}\right) \\
& \quad \times \left| \frac{\mathbf{v}'_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}}{\alpha} - \frac{2\Delta}{\alpha} \right| \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) G(\mathbf{x}'_i, \mathbf{x}'_j) = \\
& \sigma^{d-1} \alpha^{-2} \int d\mathbf{v}_i \int d\mathbf{v}_j \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} [b_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(i, j) F(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)] \theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta) \\
& \quad \times |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta| \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j),
\end{aligned} \tag{A.8}$$

donde $\mathbf{x}'_i = \{\mathbf{r}_i, \mathbf{v}'_i\}$, $b_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(i, j)$ es el operador que transforma las velocidades a sus valores precolisionales dados por (3.17) y hemos utilizado que $d\mathbf{v}'_i d\mathbf{v}'_j = \alpha^{-1} d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j$. Con estos resultados podemos entonces identificar finalmente el operador de colisión adjunto y, junto con el término de evolución libre, obtenemos el pseudo operador de Liouville adjunto:

$$\bar{L}_+(\Gamma) = - \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \bar{T}_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), \tag{A.9}$$

$$\begin{aligned}
\bar{T}_+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = & \sigma^{d-1} \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} [\theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta) |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - 2\Delta| \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\
& \times \alpha^{-2} b_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(i, j) - \theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) |\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \delta(\mathbf{r}_{ij} + \hat{\boldsymbol{\sigma}})].
\end{aligned} \tag{A.10}$$

Apéndice B

Simulaciones de dinámica molecular

El método de dinámica molecular está basado de forma general en la integración de las ecuaciones de Newton para el sistema que estemos interesados en estudiar. Para sistemas en los que los potenciales de interacción son continuos, las ecuaciones pueden discretizarse avanzando el sistema en intervalos de tiempo fijo Δt mientras que en el caso en el que el potencial sea discontinuo hay que tener en cuenta que, cuando las partículas se encuentran a la distancia en la cual se presenta la discontinuidad, éstas cambian de velocidad instantáneamente. Debido a esto utilizamos para nuestro sistema de esferas duras de diámetro σ , un algoritmo de simulación dirigido por eventos, basándonos principalmente en el propuesto por Allen y Tildesley [62]. En este tipo de algoritmos, en vez de avanzar la configuración del sistema a intervalos de tiempos fijos, se localiza el próximo evento que se produzca, se mueven las partículas del sistema hasta el instante en el que se produce y, tras esto, se alteran las velocidades de las partículas involucradas en dicho evento.

En nuestras simulaciones de sistemas de esferas duras el principal evento que nos interesa localizar es la colisión entre partículas. La condición para que dos partículas i y j choquen en un instante t_0 viene dada por:

$$|\mathbf{r}_{ij}(t_0)| = \sigma, \quad (\text{B.1})$$

donde \mathbf{r}_{ij} es la posición relativa de las partículas. Debido a que

en nuestras simulaciones no vamos a estudiar casos en los que las partículas estén bajo el efecto de ningún campo externo, tenemos que entre colisiones su velocidad se mantiene constante. Con esto, si tenemos la configuración del sistema en un instante t , el tiempo t_{ij} que tardarían en chocar dos partículas dadas puede calcularse a partir de la condición

$$|\mathbf{r}_{ij}(t + t_{ij})| = |\mathbf{r}_{ij}(t) + \mathbf{v}_{ij}(t)t_{ij}| = \sigma, \quad (\text{B.2})$$

siendo \mathbf{v}_{ij} la velocidad relativa. Se obtiene entonces para el tiempo de colisión

$$t_{ij} = \frac{-\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij} - \sqrt{(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})^2 - v_{ij}^2(r_{ij}^2 - \sigma^2)}}{v_{ij}^2}. \quad (\text{B.3})$$

En general esta ecuación puede darnos tiempos negativos o imaginarios, significando esto que, con su posición y velocidad relativa, el par de partículas considerado no va a colisionar. Nos interesan entonces solo los pares que cumplan la condición de estar acercándose

$$\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij} < 0, \quad (\text{B.4})$$

y tales que el discriminante de la ecuación (B.3) sea positivo

$$(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})^2 - v_{ij}^2(r_{ij}^2 - \sigma^2) > 0. \quad (\text{B.5})$$

Calculando estos tiempos de colisión entre partículas podemos localizar cual será el próximo par en chocar. Este método de simulación lo utilizamos para estudiar dos tipos de sistemas, el sistema bidimensional efectivo con la regla de colisión del modelo de Brito (3.5), en el que las partículas interactúan únicamente entre ellas de modo que con (B.3) podemos localizar los sucesivos eventos, y el sistema confinado tridimensional, en el que la regla de colisión entre partículas es (3.2) y las partículas también pueden chocar con las paredes confinantes, por lo que necesitamos calcular los tiempos de colisión con éstas. En las simulaciones del sistema confinado consideramos éste compuesto por dos paredes elásticas y paralelas entre ellas, separadas una distancia constante h . De estas paredes, una se encuentra en reposo y la otra vibra en el límite de pequeña amplitud y alta frecuencia, de forma que se supone que su posición no varía en el tiempo y que las partículas siempre se encuentran con ésta moviéndose con velocidad

v_b hacia ellas [84]. Con este modelo del sistema confinado tenemos entonces que el tiempo de colisión de la partícula i con las paredes, tomando como origen para la posición en la dirección del vibrado la posición intermedia entre las paredes, viene dado por

$$t_{i,W} = \begin{cases} \frac{h-\sigma-2r_{i\parallel}}{2v_{i\parallel}}, & \text{para } v_{i\parallel} > 0, \\ -\frac{h-\sigma+2r_{i\parallel}}{2v_{i\parallel}}, & \text{para } v_{i\parallel} < 0, \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

Por otra parte el efecto de las paredes sobre la componente de la velocidad perpendicular a ellas es, para la pared estática

$$v'_{\parallel} = -v_{\parallel}, \quad (\text{B.7})$$

y para la pared que vibra

$$v'_{\parallel} = 2v_b - v_{\parallel}. \quad (\text{B.8})$$

En las direcciones perpendiculares al vibrado aplicamos, tanto para el sistema efectivo como para el confinado, condiciones de contorno periódicas en las que si una partícula atraviesa una de las fronteras se reintroduce a la misma altura por el lado opuesto. Al utilizar estas condiciones de contorno hay que tener en cuenta que previamente a una colisión las partículas pueden atravesar las paredes, lo que hace que la posición relativa a introducir en (B.2) sea distinta si se aplican las condiciones de contorno. De este modo un par de partículas puede no satisfacer en un principio dicha ecuación para ningún intervalo de tiempo real y positivo pero sí al considerar que alguna atraviesa las fronteras. En este sentido en nuestras simulaciones consideramos únicamente los casos en los que, para que se dé la colisión, las partículas atraviesan como máximo una vez los laterales. De este modo evitamos, salvo en sistemas muy diluidos, pasar por alto algún evento, lo que puede dar lugar a errores en las simulaciones como el solapamiento de partículas.

Con esto, partiendo de una condición inicial válida, el algoritmo de simulación que aplicamos puede resumirse como sigue:

1. Dada la configuración del sistema se calculan los intervalos de tiempo necesarios para que ocurran los distintos eventos. Esto incluye en general los tiempos de colisión entre partículas t_{ij}

para todos los pares de partículas y en el caso confinado también los tiempos de colisión con las paredes $t_{i,W}$. De estos tiempos seleccionamos t_{min} , el menor de ellos y asociado por tanto al siguiente evento, e identificamos las partículas involucradas.

2. Se mueven todas las partículas libremente durante este tiempo t_{min} , aplicando las condiciones de contorno, de modo que la configuración espacial resultante es la previa al evento que nos interesa.
3. Se aplica a las partículas involucradas la regla de colisión que corresponda, dependiendo del sistema que estemos simulando y del tipo evento en el caso confinado, completando así la colisión.

De estos pasos, el que requiere más tiempo de cálculo es la obtención de los tiempos de colisión entre partículas. Como hay que considerar la interacción de cada partícula con el resto, hay que realizar del orden de N^2 operaciones para obtenerlos todos, siendo N el número de partículas en las simulaciones. Para disminuir los cálculos necesarios en este paso se almacenan en una matriz los tiempos de colisión tras obtenerlos inicialmente para todas las partículas. Una vez se localiza y efectúa el siguiente evento, en vez de volver a calcular todos los tiempos, se resta en la matriz el tiempo que haya transcurrido, actualizando así el tiempo de colisión para todas las partículas salvo para aquellas involucradas directamente en el evento al alterarse sus velocidades. De este modo solo hay que volver a realizar los cálculos para las partículas que hayan chocado, reduciéndose las operaciones necesarias al orden de N .

Apéndice C

Cálculo de ν_η , ν_κ y ν_μ

Las frecuencias ν_η, ν_κ y ν_μ están definidas por las ecuaciones (5.43)-(5.45), y calculamos una expresión en el orden más bajo en su desarrollo en polinomios de Sonine. Teniendo en cuenta que el operador de rotaciones conmuta con el operador de colisión, y que las frecuencias son escalares, tenemos que tensorialmente \mathcal{A} y \mathcal{B} deben ser una función isótropa de la velocidad multiplicada por $\mathbf{S}(\mathbf{V})$. Por otra parte solo necesitamos la parte de traza nula del tensor \mathcal{C} , que debe ser el producto de otra función isótropa de la velocidad por $\mathbf{D}(\mathbf{V})$. Para las distintas funciones isótropas de la velocidad proponemos un desarrollo en polinomios de Sonine truncado en el orden más bajo, que en este caso es una función proporcional a la función de distribución de Maxwell

$$f_M(V) = n \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{d/2} \exp \left(-\frac{mV^2}{2T} \right). \quad (\text{C.1})$$

De la definición de las frecuencias vemos que la constante de proporcionalidad resulta irrelevante en todos los casos, de modo que utilizamos

$$\mathcal{A}(\mathbf{V}) \propto f_M(V)\mathbf{S}(\mathbf{V}), \quad (\text{C.2})$$

$$\mathcal{B}(\mathbf{V}) \propto f_M(V)\mathbf{S}(\mathbf{V}), \quad (\text{C.3})$$

$$\mathcal{C}(\mathbf{V}) - \frac{I}{d} \text{Tr} \mathcal{C} \propto f_M(V)\mathbf{D}(\mathbf{V}). \quad (\text{C.4})$$

Introduciendo estas expresiones en las ecuaciones (5.43)-(5.45) se obtiene

$$\begin{aligned}\nu_\eta &= \frac{\int d\mathbf{V} \mathbf{D}(\mathbf{V}) : \mathcal{L}[f_M(V)\mathbf{D}(\mathbf{V})]}{\int d\mathbf{V} f_M(V)\mathbf{D}(\mathbf{V}) : \mathbf{D}(\mathbf{V})} \\ &= \frac{\int d\mathbf{V} \mathbf{D}_{ij}(\mathbf{V}) : \mathcal{L}[(V)\mathbf{D}(\mathbf{V})]}{(d-1)(d+2)nT^2},\end{aligned}\quad (\text{C.5})$$

$$\begin{aligned}\nu_\kappa = \nu_\mu &= \frac{\int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathcal{L}[f_M(V)\mathbf{S}(\mathbf{V})]}{\int d\mathbf{V} f_M(V)\mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{V})} \\ &= \frac{2m \int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathcal{L}[f_M(V)\mathbf{S}(\mathbf{V})]}{d(d+2)nT^3}.\end{aligned}\quad (\text{C.6})$$

Las integrales restantes se calculan de forma directa, siendo de ayuda el uso de programas de cálculo simbólico como Mathematica. Los resultados que se obtienen finalmente son

$$\begin{aligned}\nu_\eta &= \frac{\sqrt{2}\pi^{(d-1)/2}n\sigma^{d-1}v_0(T)}{d(d+2)\Gamma(d/2)} \left[(1+\alpha)(2d+3-3\alpha) \left(1 - \frac{a_2}{32}\right) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{2}\pi(d-2\alpha)\Delta^* - 2 \left(1 + \frac{3a_2}{32}\right) \Delta^{*2} \right],\end{aligned}\quad (\text{C.7})$$

$$\begin{aligned}\nu_\kappa = \nu_\mu &= \frac{\pi^{(d-1)/2}n\sigma^{d-1}v_0(T)}{\sqrt{2}d(d+2)\Gamma(d/2)} \left\{ \frac{(1+\alpha)[512+352d-96\alpha(d+8)]}{2^6} \right. \\ &\quad + \frac{(1+\alpha)[((5d+4)+3\alpha(d-4))]a_2}{2^6} \\ &\quad - \sqrt{\frac{\pi}{2}}[2(1-d)+\alpha(d+8)]\Delta^* \\ &\quad \left. - \frac{32(d+8)+3a_2(d-4)}{2^5}\Delta^{*2} \right\}.\end{aligned}\quad (\text{C.8})$$

Apéndice D

Cálculo de ζ_1

La expresión para el coeficiente de transporte de Euler ζ_1 se da en la ecuación (5.31). A partir de la ecuación (5.34) obtenemos la siguiente expresión para la evolución de la traza de \mathcal{C}

$$-\zeta^{(0)}T\frac{\partial\text{Tr}\mathcal{C}}{\partial T} + \mathcal{L}\text{Tr}\mathcal{C} - T\frac{f^{(0)}}{\partial T}\zeta_1d = \text{Tr}\mathbf{C} = -\Delta^*\frac{\partial f^{(0)}}{\partial a_2}\frac{\partial a_2}{\partial\Delta^*}. \quad (\text{D.1})$$

Debido a que $f^{(1)}$ no puede contribuir a los momentos de la velocidad hasta segundo orden tenemos que el desarrollo en polinomios de Sonine en el orden más bajo para $\text{Tr}\mathcal{C}$, que es una función isótropa de la velocidad, tiene que ser

$$\text{Tr}\mathcal{C} \simeq \frac{b_2e^{-c^2}}{\pi^{d/2}\sigma^{d-1}v_0^{d+1}}S^{(2)}(c^2). \quad (\text{D.2})$$

Introduciendo esta expresión en la ecuación (D.1), multiplicándola por v^4 e integrando posteriormente para \mathbf{v} , obtenemos una ecuación para la dependencia de b_2 en Δ^*

$$\bar{\zeta}^{(0)}\Delta^*\frac{\partial b_2}{\partial\Delta^*} - \left[3\bar{\zeta}^{(0)} + \frac{8\chi(\Delta^*)}{d(d+2)} + 4d\bar{\zeta}_1(a_2+1) - d\bar{\zeta}_1\Delta^*\frac{\partial a_2}{\partial\Delta^*} \right] b_2 = -2\Delta^*\frac{\partial a_2}{\partial\Delta^*}, \quad (\text{D.3})$$

donde aparecen las funciones

$$\bar{\zeta}_1 \equiv \frac{\zeta_1}{b_2} = -\frac{4\pi^{-(d+1)/2}}{d^2} \int d\mathbf{c}_1 \int d\mathbf{c}_2 e^{-c_1^2 - c_2^2} [1 + a_2 S^{(2)}(c_1^2)] S^{(2)}(c_2^2) \\ \times \left[\frac{\Delta^{*2} c_{12}}{\Gamma\left(\frac{d+1}{2}\right)} + \frac{\pi^{1/2} \alpha \Delta^* c_{12}^2}{2\Gamma\left(\frac{d+2}{2}\right)} - \frac{(1-\alpha^2) c_{12}^3}{4\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right)} \right], \quad (\text{D.4})$$

y

$$\chi(\Delta^*) \equiv -\frac{1}{b_2 v_0^4 n} \int d\mathbf{v} v^4 \mathcal{L} \text{Tr} \mathcal{C} = \frac{1}{b_2 v_0^4 n} \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{v}_1 f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \\ \times \text{Tr} \mathcal{C}(\mathbf{v}_1) T_0(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1) (v^4 + v_1^4). \quad (\text{D.5})$$

Tras realizar las integrales obtenemos las siguientes expresiones para estas funciones

$$\bar{\zeta}_1 = \frac{\pi^{(d-1)/2}}{2^{17/2} d^2 \Gamma(d/2)} [96 + 9a_2 - 3\alpha^2(32 + 3a_2) + \Delta^{*2}(64 + 30a_2)], \quad (\text{D.6})$$

$$\chi = \frac{\pi^{(d-1)/2}}{2^{11} \Gamma(d/2)} (\sqrt{2} \{ 30\alpha^4(32 - a_2) - 5(544 + 7a_2) - 4\Delta^{*2}(32 + 15a_2) \\ - 64(d-1)\alpha(16 + a_2) - 2d(992 + 17a_2) + 3\alpha^2[928 + 43a_2 \\ + 12\Delta^{*2}(32 + 3a_2) + 10d(32 - a_2)] \\ + 6\Delta^{*2}(288 - 45a_2 + 64d + 6da_2) \} \\ + 512\sqrt{\pi}\Delta^*[2 + 7\alpha + 3\alpha^3 - 2d(1 - \alpha)]). \quad (\text{D.7})$$

Lista de publicaciones

Los principales resultados de esta memoria están contenidos total o parcialmente en las siguientes publicaciones en revistas internacionales:

- *Homogeneous steady state of a confined granular gas*, J. J. Brey, M. I. García de Soria, P. Maynar y V. Buzón, Phys. Rev. E **88**, 062205 (2013)
- *Homogeneous hydrodynamics of a collisional model of confined granular gases*, J. J. Brey, P. Maynar, M. I. García de Soria y V. Buzón, Phys. Rev. E **89**, 052209 (2014)
- *Memory effects in the relaxation of a confined granular gas*, J. J. Brey, M. I. García de Soria, P. Maynar y V. Buzón, Phys. Rev. E **90**, 032207 (2014)
- *Hydrodynamics for a model of a confined quasi-two-dimensional granular gas*, J. J. Brey, V. Buzón, P. Maynar y M. I. García de Soria, Phys. Rev. E **91**, 052201 (2015)
- *Stability analysis of the homogeneous hydrodynamics of a model for a confined granular gas*, J. J. Brey, V. Buzón, M. I. García de Soria y P. Maynar, Phys. Rev. E **93**, 062907 (2016)
- *Theory of a Confined Quasi-Two-Dimensional Gas of Hard Spheres*, J. J. Brey, V. Buzón, M. I. García de Soria y P. Maynar, Entropy **19**, 68 (2017)

Bibliografía

- [1] I. S. Aranson, and L. S. Tsimring. *Rev. Mod. Phys.* **78**, 641 (2006)
- [2] O. Reynolds, *Philos. Mag.* **20**, 469 (1885)
- [3] A. Snezhko, I. S. Aranson, and W. K. Kwok, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 108002 (2005)
- [4] T. P. C. van Noije and M. H. Ernst, *Granular Matter* **1**, 57 (1998)
- [5] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y F. Moreno, *Phys. Rev. E* **55**, 2846 (1997)
- [6] F. Melo, P. Umbanhowar, and H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3838 (1995)
- [7] J. S. Olafsen, and J. S. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4369 (1998)
- [8] A. Prevost, P. Melby, D. A. Egolf, and J. S. Urbach, *Phys. Rev. E* **70**, 050301 (2004)
- [9] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, and D. Cubero. *Phys. Rev. E* **54**, 3664 (1996)
- [10] P. K. Haff, *J. Fluid Mech.* **134**, 401 (1983)
- [11] R. Brito, D. Risso, and R. Soto. *Phys. Rev. E* **87**, 022209 (2013)
- [12] E. R. Nowak et al., *Phys. Rev. E* **57**, 1971 (1998)
- [13] C. H. Liu, and S. R. Nagel, *J. Phys.* **6**, A433 (1994)
- [14] Janssen, *Z. Verein Deustch. Ing.* **39**, 1045 (1895)
- [15] H. M. Jaeger, and S. R. Nagel, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259 (1996)

- [16] G. Metcalfe et al., *Nature* **374**, 39 (1995)
- [17] O. Zik et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 644 (1994)
- [18] K. Choo, T. C. Molteno, and S. W. Morris, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2975 (1997)
- [19] Rosato, A., K. J. Strandburg, F. Prinz, and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1038 (1987)
- [20] E. F. F. Chladni, *Entdeckungen ber die Theorie des Klanges* (Bey Weidmanns erben und Reich, Leipzig, 1787)
- [21] M. Faraday, *Philos. Trans. R. Soc. London* **52**, 299 (1831)
- [22] P. Umbanhowar, F. Melo, and H. L. Swinney, *Nature* **382**, 29 (1996)
- [23] J. S. Olafsen, and J. S. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4369 (1999)
- [24] P. Melby et al., *J. Phys.* **17**, S2689 (2005)
- [25] D. R. M. Williams, and F. C. MacKintosh, *Phys. Rev. E*, **54**, R9 (1996)
- [26] A. Puglisi, V. Loreto, U. Marini Bettolo Marconi, y A. Vulpiani, *Phys. Rev. E*, **59**, 5582 (1999)
- [27] T. P. C. van Noije, M. H. Ernst, E. Trizac, y I. Pagonabarraga, *Phys. Rev. E*, **59**, 4326 (1999)
- [28] I. Pagonabarraga, E. Trizac, T. C. P. van Noije, and M. H. Ernst, *Phys. Rev. E*, **65**, 011303 (2001)
- [29] A. Barrat, E. Trizac, y J. N. Fuchs, *Eur. Phys. J. E*, **5**, 161 (2001)
- [30] J. Liouville, *Journ. de Math.* **3**, 349 (1838)
- [31] M. H. Ernst, J. R. Dorfman, W. R. Hoegy, and J. M. J. van Leeuwen, *Physica*, **45**, 127 (1969)
- [32] T. P. C. van Noije, M. H. Ernst y R. Brito, *Physica A* **251**, 266 (1998)
- [33] N. N. Bogoliubov, *J. Phys. URSS* **10**, 265 (1946)

-
- [34] J. G. Kirkwood, *J. Chem. Phys.* **14**(3), 180 (1946)
- [35] M. Born y H. S. Green, *Proc. Roy. Soc. A* **188**, 10 (1946)
- [36] J. C. Maxwell, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **157**, 49 (1867)
- [37] J. F. Lutsko, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2225 (1996)
- [38] J. J. Brey, J. W. Dufty y A. Santos, *J. Stat. Phys.* **87**, 1051 (1997)
- [39] R. Evans, *Adv. Phys.* **28**, 143 (1979)
- [40] H. van Beijeren y M. H. Ernst, *J. Stat. Phys.* **21**, 125 (1979)
- [41] D. Enskog y K. Svenska, *Vetenskaps Akademiens Handl* **63**, No. 4 (1921)
- [42] S. Chapman y T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases* (University Press, Cambridge, 1960)
- [43] J. S. van Zon y F. C. MacKintosh, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 038001 (2004)
- [44] J. S. van Zon y F. C. MacKintosh, *Phys. Rev. E* **72**, 0513101 (2005)
- [45] F. Rouyer y N. Menon, *Phys. Rev. Lett* **85**, 3676 (2000)
- [46] A. Barrat y E. Trizac, *Phys. Rev. E* **66**, 051303 (2002)
- [47] M. Abramowitz y I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, New York, 1972)
- [48] P. Résibois and M. de Leener, *Classical Kinetic Theory of Fluids* (John Wiley & Sons, New York, 1977)
- [49] J. J. Brey, M. I. García de Soria, P. Maynar y V. Buzón, *Phys. Rev. E* **88** 062205 (2013)
- [50] G. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Clarendon, Oxford, 1994)
- [51] A. García, *Numerical Methods for Physics* (Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 2000)

-
- [52] K. Nanbu, en *Rarefied Gas Dynamics* 15, editado por V. Boffi y C. Cercignani (B. G. Teubner, Stuttgart, 1986), pp. 369-383
- [53] J. M. Montanero y A. Santos, en *Rarefied Gas Dynamics* 19, editado por J. Harvey y G. Lord (Oxford university Press, Oxford, 1995), pp 899-905, vol. 2.
- [54] C. Cercignani y S. Cortese, *J. Stat. Phys.* **75**, 817 (1994)
- [55] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim y A. Santos, *Phys. Rev. E* **58**, 4638 (1998)
- [56] J. W. Dufty y J. J. Brey, *Math. Model. Nat. Phenom.* **6**, 19 (2011)
- [57] J. J. Brey, P. Maynar, M. I. García de Soria y V. Buzón, *Phys. Rev. E* **89** 052209 (2014)
- [58] V. Garzó y J. M. Montanero, *Physica A* **313**, 336 (2002)
- [59] V. Visco, A. Puglisi, A. Barrat, E. Trizac y F. van Wijland, *J. Stat. Phys.* **125**, 533 (2006)
- [60] M. I. García de Soria, P. Maynar y E. Trizac, *Mol. Phys.* **107**, 383 (2009)
- [61] P. Maynar, M. I. García de Soria y E. Trizac, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **179**, 123 (2009)
- [62] M. P. Allen y D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford Science Publications, Bristol, 1987)
- [63] T. Pöschel y T. Schwager, *Computational Granular Dynamics* (Springer, Berlin, 2005)
- [64] S. R. Dahl, C. M. Hrenya, V. Garzó y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E.* **66**, 041301 (2002)
- [65] V. Garzó, *Europhys. Lett.* **75**, 521 (2006)
- [66] N. V. Brilliantov y T. Pöschel, *Europhys. Lett* **74**, 424 (2006)
- [67] A. J. Kovacs, *Adv. Polym. Sci. (Fortschr. Hochpolym. Forsch.)* **3**, 394 (1963)

-
- [68] J. J. Brey, M. I. García de Soria, P. Maynar y V. Buzón, *Phys. Rev. E* **90** 032207 (2014)
- [69] A. Prados y E. Trizac, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 198001 (2014)
- [70] E. Trizac y A. Prados, *Phys. Rev. E* **90**, 012204 (2014)
- [71] J. A. McLennan, *Introduction to Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989)
- [72] P. P. J. M. Schram, *Kinetic Theory of Gases and Plasmas* (Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands, 1991)
- [73] J. Ferziger y H. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases* (North-Holland, Amsterdam, 1972)
- [74] J. W. Dufty, A. Baskaran y J. J. Brey, *Phys. Rev. E* **77**, 031310 (2008)
- [75] M. I. García de Soria, P. Maynar y E. Trizac, *Phys. Rev. E* **87**, 022201 (2013)
- [76] V. Garzó, M. G. Chamorro y F. Vega Reyes, *Phys. Rev. E* **87**, 032201 (2013)
- [77] J. J. Brey, F. Moreno y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **54**, 445 (1996)
- [78] J. J. Brey, V. Buzón, P. Maynar y M. I. García de Soria, *Phys. Rev. E* **91** 052201 (2015)
- [79] J. J. Brey, V. Buzón, M. I. García de Soria y P. Maynar, *Phys. Rev. E* **93** 062907 (2014)
- [80] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, R. García-Rojo y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **60**, 7174 (1999)
- [81] J. W. Dufty, J. J. Brey y J. Lutsko, *Phys. Rev. E* **65**, 051303 (2002)
- [82] J. Lutsko, J. J. Brey y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **65**, 051304 (2002)
- [83] A. Santos y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **64**, 051305 (2001)
- [84] S. McNamara y J.-L. Barrat, *Phys. Rev. E* **55**, 7767 (1997)