

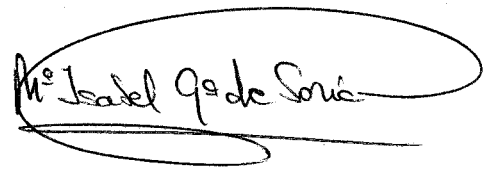
Fluctuaciones críticas en medios granulares

TESIS DOCTORAL

MEMORIA PRESENTADA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS FÍSICAS EN EL DEPARTAMENTO DE FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR DE LA UNIVERSIDAD DE SEVILLA

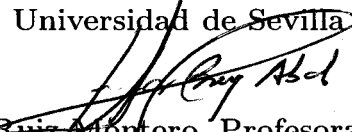
por

María Isabel García de Soria Lucena

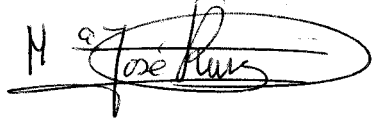


Dirigida por:

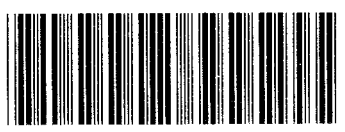
Dr. José Javier Brey Abalo, Catedrático de Física Teórica de la Universidad de Sevilla



Dra. María José Ruiz Montero, Profesora Titular de Física Teórica de la Universidad de Sevilla



UNIVERSIDAD DE SEVILLA



600437008

F. FÍSICA. Biblioteca
o. 11557850
i. 21926451

Fluctuaciones críticas en medios granulares

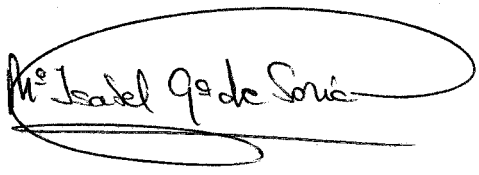
Fluctuaciones críticas en medios granulares

TESIS DOCTORAL

MEMORIA PRESENTADA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS FÍSICAS EN EL DEPARTAMENTO DE FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR DE LA UNIVERSIDAD DE SEVILLA

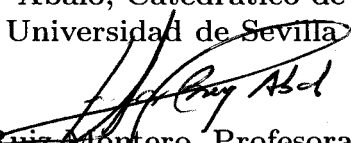
por

María Isabel García de Soria Lucena

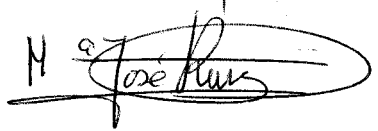


Dirigida por:

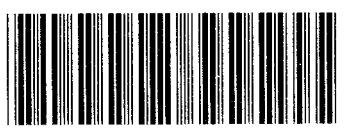
Dr. José Javier Brey Abalo, Catedrático de Física Teórica de la Universidad de Sevilla



Dra. María José Ruiz Montero, Profesora Titular de Física Teórica de la Universidad de Sevilla



UNIVERSIDAD DE SEVILLA



600437008

F. FÍSICA. Biblioteca
o. 11557850
i. 21926451

Impreso en Sevilla en Abril del año 2006.

Este trabajo ha sido posible gracias a una beca de Formación del Profesorado Universitario del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte, en la convocatoria de 2001, además de las contribuciones económicas de los proyectos BFM2002-00307 y FIS2005-01398.

Índice general

1. Introducción	3
1.1. ¿Qué es un medio granular?	3
1.2. Fenomenología	5
1.3. Flujos granulares rápidos	9
1.4. Simulación numérica	11
1.5. Objetivos	12
2. Gases granulares que evolucionan libremente	15
2.1. Modelo de esferas duras inelásticas	16
2.2. Ecuación de Boltzmann inelástica	18
2.3. Estado de enfriamiento homogéneo (HCS)	21
2.3.1. Ecuaciones hidrodinámicas linealizadas alrededor del HCS	24
2.3.2. Análisis de estabilidad	26
2.3.3. Fluctuaciones de la energía total en el HCS	28
2.3.4. Representación estacionaria del HCS	31
3. Fluctuaciones de energía cerca del punto crítico	35
3.1. Simulaciones de Dinámica Molecular en el HCS	36
3.1.1. Criterios para saber que se sigue en el HCS	38
3.2. Velocidad de enfriamiento y segundo momento de las fluctuaciones	40
3.2.1. Sistemas diluidos	40
3.2.2. Densidades moderadas	47
3.3. Función de correlación temporal de la energía	51
3.4. Distribución de las fluctuaciones de la energía	54
3.4.1. Función de distribución escalada	54
3.5. Conclusiones	58

ÍNDICE GENERAL

4. Teoría mesoscópica de las fluctuaciones críticas	61
4.1. Revisión de las ecuaciones de la hidrodinámica fluctuante para sistemas elásticos	62
4.2. Extensión a un medio granular ligeramente inelástico	64
4.3. La energía total	67
4.4. La velocidad de enfriamiento efectiva	70
4.5. Fluctuaciones y correlaciones de la energía total	75
4.6. Distribución de las fluctuaciones de la energía	78
5. Conclusiones	83
A. Coeficientes de transporte	85
B. Algoritmo de simulación empleado	89
B.1. Introducción	89
B.2. Cálculo de los tiempos de colisión	91
B.3. Evolución del sistema durante τ_{ij}	93
B.4. Aplicación de la regla de colisión	93
B.5. Cálculo de propiedades	94
B.6. Cálculo de los nuevos tiempos de colisión	94
C. Función de correlación para $\delta'\epsilon$	95
D. Temperatura efectiva en la representación estacionaria	99

UNIVERSIDAD DE SEVILLA
SECRETARIA GENERAL

Queda registrada esta Tesis Doctoral
al folio 073 número 333 del libro
correspondiente.

Sevilla, 4 de Mayo de 2006

El Jefe del Negociado de Tesis



Agradecimientos

Encontrar las palabras adecuadas para, en unas pocas líneas, agradecer tantas cosas, grandes y pequeñas, pero todas importantes, que han permitido recorrer este camino, es algo prácticamente imposible. Trataré de hacerlo de la mejor manera que sepa.

Comenzaré, como no podría ser de otro modo, agradeciendo a José Javier Brey Abalo la oportunidad de haber podido trabajar bajo su dirección. El que esta Tesis haya llegado a buen fin ha sido posible gracias a sus amplios conocimientos científicos y a su experiencia formando a personas que, como yo, comienzan sus primeros pasos en la investigación. Es, por tanto, merecedor de mi gratitud y admiración. Especial lugar también para María José Ruiz Montero, a la que quiero agradecer el tiempo y esfuerzo dedicado en estos años.

No puedo olvidarme aquí de Álvaro, compañero de despacho estos dos últimos años y cuyo apoyo y paciencia han sido muy importantes en los últimos tiempos. A Antonio, nuestro antiguo compañero de despacho, con el que hemos compartido tantas agradables conversaciones degustando, espero, una buena comida. A Paco, por ser como es, por el cariño que derrocha y la forma de tratarme.

Quiero agradecer a mis padres, Isabel y José María, el apoyo que me han dado en todo momento, sus ánimos y consejos. Yo no sería lo que soy sin ellos. Gracias por haberme enseñado a valorar las cosas y por estar orgullosos de mi. También a mis hermanos, Juan Jesús, que siempre me da ánimos y Paloma, que crece demasiado rápido y hace que sienta que el tiempo vuela. A Lucy, Antonio y María Emma, porque han hecho que me sintiera como en casa, por ser parte de mi familia.

A mis amigas Mari Cruz y Gema. Aunque ahora no compartamos tanto tiempo como en el Colegio siempre estais ahí. También a Ramón y a José María.

Por último, a ti, Pablo, porque sin ti nada habría sido posible. Tú bien sabes cómo se ha ido desarrollando este trabajo y los momentos en los que me he desanimado. No me has dejado tirar la toalla y me has apoyado constantemente aunque, en momentos, haya sido un tanto insoportable. Quiero agradecerte el haberme aguantado en los agobios y el haberme permitido disfrutar de ti. El trabajo, como todo a tu lado, es una maravilla.

Sevilla, Abril de 2006.

Capítulo 1

Introducción

1.1. ¿Qué es un medio granular?

Un medio granular es un sistema constituido por un gran número de partículas macroscópicas, a las que denominaremos granos. El tamaño de estos granos puede ir desde el de las partículas de polvo, hasta el de las rocas que forman algunos anillos planetarios. Por tanto, en la expresión medio granular se encuentran englobados un gran número de sistemas. La propiedad fundamental que caracteriza las colisiones entre las partículas de un sistema granular es la disipación de energía, es decir, los granos interactúan inelásticamente. Así, en ausencia de una fuerza externa las partículas tienden al reposo.

Se piensa que muchas de las propiedades de los materiales granulares tienen su origen en el tamaño macroscópico de los granos, que van a ser considerados como objetos sólidos cuyos grados internos de libertad no serán tenidos en cuenta. Esto tendrá como consecuencia que la temperatura ordinaria no juegue ningún papel en el análisis de la dinámica de estos sistemas.

La gran variedad de sistemas granulares viene dada tanto por el tipo de partículas que los constituyen como por las interacciones entre ellas que, si bien de carácter disipativo, pueden ser puramente repulsivas o contener una parte atractiva. Podemos encontrar sistemas constituidos por granos de diferentes tamaños y formas. Estos pueden poseer superficies lisas o rugosas. Y atendiendo a las interacciones, si éstas son de carácter puramente repulsivo, nos encontramos con un medio no cohesivo, en el cual las partículas no tienden a permanecer unidas. Si, por el contrario, la interacción tiene una parte

atractiva, el medio será cohesivo. Las partículas que constituyen el sistema granular están inmersas en un medio, y según sean las interacciones con éste podemos hablar de medio granular seco o mojado. El medio será seco cuando esta interacción no es relevante. Esto suele ocurrir cuando el medio es el aire o el sistema se encuentra en el vacío. Si, por el contrario, las interacciones con el medio sí condicionan el comportamiento del sistema, nos encontramos ante un medio granular mojado.

Existe un interés creciente en el estudio y comprensión de los medios granulares. Entender sus propiedades físicas es de gran importancia, ya que los medios granulares están presentes en muchos fenómenos que tienen lugar tanto en nuestra vida cotidiana como en procesos industriales [1]. Están implicados en multitud de fenómenos geofísicos, geológicos y geomorfológicos, como por ejemplo, la formación de dunas y ondas en la arena, corrimientos de tierra o avalanchas, y en la propia formación de los planetas. Por otro lado, las propiedades de estos materiales son de enorme importancia en una gran variedad de industrias, tales como las relacionadas con el transporte y almacenamiento de cereales. Los granos ejercen sobre las paredes de los silos enormes tensiones que pueden desembocar en la ruptura de éstos, lo que conlleva importantes pérdidas económicas. En las industrias químicas y farmacéuticas, gran cantidad de los materiales en bruto y así como de sus productos se manejan en forma granular [2]. El conocimiento de las propiedades de mezcla y segregación de estos sistemas es primordial para optimizar el área de contacto entre los componentes químicos, y consecuentemente la eficiencia de las reacciones química. Por otra parte, la segregación que se produce en las mezclas granulares es esencial y deseable en los procesos minerales, pero altamente indeseable en los procesos químicos y farmacéuticos donde el objetivo es obtener mezclas uniformes. Mientras que la eficiencia con la que se procesan actualmente los fluidos moleculares en las industrias es alta, se estima que dista mucho de lo óptimo en los procesos en los que intervienen materiales granulares.

Además de este interés práctico, con evidentes consecuencias económicas, la amplia fenomenología que presentan estos medios atrae la atención de los científicos al proponer nuevas cuestiones de interés fundamental. Es necesario un conocimiento básico del mecanismo físico subyacente en el comportamiento colectivo, tanto estático como dinámico, de un medio granular.

1.2. Fenomenología

Los medios granulares manifiestan una sorprendente y rica fenomenología. Hasta tal punto es esto cierto, que algunos autores han llegado a proponer que se considere al estado granular como un cuarto estado de la materia, con identidad propia frente a los tres tradicionales de sólido, líquido o gaseoso [3].

Existen diversos campos de estudio en los medios granulares. La estática, en la que se considera al medio básicamente en reposo, y la dinámica, dentro de la cual podemos distinguir entre flujos lentos, en los que se manifiesta un comportamiento más parecido al de un líquido, y flujos rápidos, más similares a los gases. Cuando paseamos por la playa, la arena se nos muestra como un sólido, mientras que en un reloj de arena nos la encontramos fluyendo. Pero, a pesar de presentar, en cierto modo, comportamientos similares a los sólidos y a los fluidos, los medios granulares se entienden mucho peor que éstos.

Aunque es actualmente cuando los medios granulares están centrando la atención de un mayor número de investigadores, debido tanto a las cuestiones de nivel fundamental que plantean como a sus aplicaciones prácticas, su estudio científico tiene una larga historia. Ya en 1773 Charles-Agustin de Coulomb [4] observó que las propiedades estáticas de los sistemas granulares podían ser explicadas en términos de las propiedades de fricción entre diferentes capas, obteniéndose una relación entre el ángulo de reposo de un montón de granos y el coeficiente de fricción estática. Cabe destacar que aún no se sabe calcular este coeficiente de fricción a partir de las propiedades mecánicas de cada grano y de su forma.

Cuando un material granular se somete a una vibración vertical se puede observar la formación de estructuras bien definidas [5]. Las primeras observaciones de estas estructuras fueron hechas por Chladni (1787) y Michael Faraday (1831). Dependiendo de las condiciones del experimento, se pueden observar una gran variedad de estructuras que incluyen bandas, cuadrados o hexágonos. En la figura 1.1 se muestran algunos ejemplos obtenidos en los experimentos realizados por Melo, Umbanhowar y Swinney [6]. El orden en que se muestra la secuencia corresponde a ir aumentando la amplitud de las oscilaciones a las que se somete a un sistema granular constituido por esferas de bronce. Estas estructuras tienen similitudes con las que se observan en los fluidos normales moleculares cuando se les somete también a oscilaciones verticales.

Cuando un fluido ordinario se encuentra en presencia de la gravedad

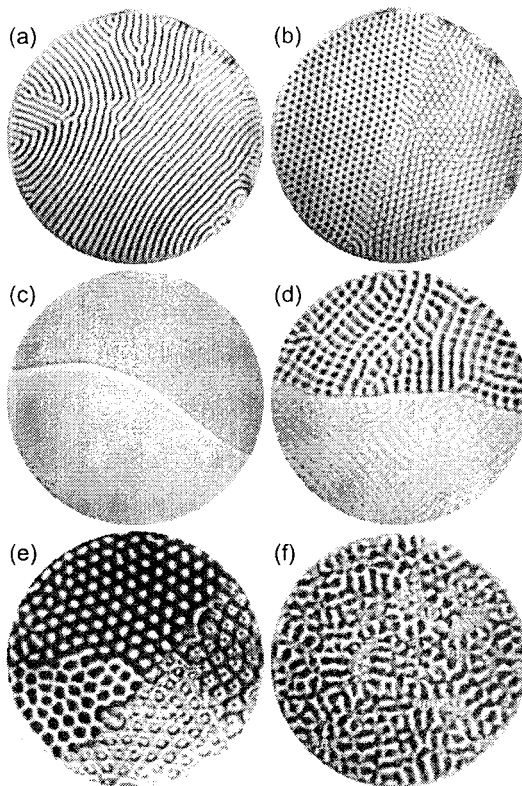


Figura 1.1: Estructuras obtenidas en la superficie de un medio granular constituido por esferas de bronce, en los experimentos realizados por Melo, Umbanhowar y Swinney [6], cuando se le someta a un proceso de vibración.

sometido a un gradiente de temperatura desarrolla la denominada inestabilidad de Rayleigh-Bernard. Esto es debido a que, por un lado, el gradiente de temperatura tiende a hacer que las partículas suban mientras que, por otro, la gravedad tiende a llevarlas al fondo del recipiente, originándose así rollos de convección. En el caso de un sistema granular vibrado, el gradiente no viene impuesto del exterior, sino que se genera debido a la propia dinámica del sistema. El sistema experimenta un aporte de energía por la parte inferior como consecuencia de la vibración, y, al ser las colisiones entre los granos inelásticas, se produce una pérdida de energía cinética a medida que los granos avanzan por el medio. La energía media de los granos decrece a medida que

aumenta la altura.

Osborne Reynolds fue pionero en estudiar los regímenes turbulentos. En lo que se refiere a los medios granulares, puso de manifiesto el fenómeno de la dilatancia [7]. Bajo ciertas condiciones de compacidad y bajo el efecto de la presión, el volumen de una cierta cantidad de arena es susceptible de aumentar, al contrario de lo que ocurre normalmente cuando ejercemos presión sobre un material. Eso es lo que sucede cuando, al caminar por la playa y pisar la arena mojada, ésta se seca: se produce un aumento del volumen de la arena que pisamos, y el agua puede fluir dentro de los huecos que se han formado. Para que un medio granular pueda deformarse tiene que dilatarse primero, ya que es necesario que los huecos existentes sean lo suficientemente grandes para que los granos puedan deslizarse dentro de estos huecos, y así el material pueda modificar su forma.

En otro trabajo clásico, Janssen [8] estableció que la presión en un silo vertical no se incrementa linealmente con la profundidad, como sucedería si se tratase de un fluido ordinario, sino que satura a un cierto valor. Físicamente esto significa que parte del peso de los granos está sostenido por las paredes verticales laterales debido a la presencia de fuerzas tangenciales. Es éste el motivo por el que la presión en el compartimento superior de un reloj de arena no depende de lo lleno que esté, y el ritmo de flujo es, en una muy buena aproximación, constante en el tiempo. Esto es contrario a lo que ocurre en un líquido y es por lo que los relojes de arena se han usado durante siglos. Las cadenas de fuerza son las responsables, además, de muchas otras propiedades no usuales de los medios granulares. Juegan un papel relevante, por ejemplo, en el fenómeno de la transmisión del sonido en un medio granular. La arena se emplea a menudo para absorber la vibración y/o el sonido. El sonido no puede propagarse uniformemente a través de ella, sino que viaja a través de las conexiones poco claras que forman las cadenas de fuerza, separándose y reconectándose en varios puntos. Si se inicia una onda sonora en un punto del material, la señal transmitida a un segundo punto depende fuertemente de la distribución exacta de las partículas en el recipiente.

La segregación en mezclas granulares compuestas por varios tipos de partículas es otro de los fenómenos complejos que atrae la atención de los físicos [9-11]. Esta segregación puede producirse por agitación o rotación del material. En el caso particular de agitación vertical, los granos de mayor tamaño tienden en general a subir en el medio, mientras que los más pequeños se mueven hacia la parte baja del recipiente. Esto sucede aunque todos los granos posean la misma densidad. Este efecto se conoce como el efecto de las

nueces del Brasil, y debe su nombre a que se observó que, en el transporte de frutos secos, las nueces del Brasil, que eran las más grandes, quedaban por encima de las otras. Recientemente se ha observado el efecto de las nueces del Brasil inverso, en el que los granos pequeños tienden a moverse hacia la parte alta del sistema. Generalmente, las partículas de mayor tamaño tienden a subir bajo condiciones de intensidad de vibración baja, pero pueden hundirse si la agitación es de gran intensidad. La subida o caída depende de una gran variedad de factores como la frecuencia y la amplitud de vibración, la geometría del contenedor, la relación entre las densidades y tamaños de las distintas partículas o la posición de la partícula en el medio.

Otras características peculiares de los medios granulares son la aparición de fuertes inhomogeneidades en la densidad y la temperatura [12-14], y la ruptura espontánea de la simetría en sistemas divididos en compartimentos [15-17] y sin dividir [18-20]. Un fenómeno relacionado con la ruptura de la simetría y con la formación de agregados es el efecto del diablillo de Maxwell. Consideremos un medio granular en el interior de un recipiente que está dividido en dos mitades mediante un tabique que tiene un agujero en su parte baja. Si la amplitud de vibración es suficientemente grande, los granos se distribuyen de igual modo en ambos compartimentos. Cuando la amplitud de vibración es pequeña se produce una asimetría, y uno de los compartimentos comienza a sobrecargarse de partículas mientras que en el otro quedan sólo unas pocas. En la medida en la que el recipiente se construya de manera suficientemente simétrica, el grueso de las partículas cae en un lado o en el otro indistintamente. Las partículas en el lado menos denso se mueven con velocidad mucho mayor que las otras. La ruptura espontánea de la simetría es un fenómeno que se ha observado tanto en el caso de presencia como de ausencia de campo externo, sistemas con más de dos compartimentos, e incluso sistemas sin compartimentos.

Como consecuencia de esta amplia variedad de comportamientos, se han comenzado a establecer paralelismos entre los fenómenos observados en los medios granulares y los que se producen en sistemas más complejos, empleándose como una analogía muy fructífera para describir otros sistemas con dinámica disipativa. Per Bak y colaboradores [21, 22] observaron que las avalanchas que se producían en una pila de arena obedecían ciertas propiedades universales que eran comunes a un gran número de sistemas fuera del equilibrio y estaban caracterizadas, entre otras cosas, por leyes de potencia. Éste es el fenómeno de la criticidad autoorganizada. Posteriormente se mostró que este sistema, usado como prototipo de criticidad autoorganiza-

da no respondía realmente al esquema teórico propuesto [23].

1.3. Flujos granulares rápidos

Como hemos comentado, existen diversos campos de estudio en los medios granulares. Nuestro trabajo va a centrarse en el caso de los flujos granulares rápidos, también denominados gases granulares [12], en los que el medio está sometido a unas condiciones externas tales que el movimiento de las partículas o granos puede describirse como una serie de colisiones entre partículas, separadas por intervalos de tiempo en que el movimiento es libre o balístico. En este régimen, parece evidente que un método para abordar su estudio consiste en tratar de extender las técnicas y metodologías de los gases moleculares ordinarios. Y en efecto, esta vía ha sido desarrollada en su doble vertiente, de una descripción de tipo campo (Hidrodinámica) [24] y de una al nivel más fundamental de conjunto de partículas (Teoría Cinética o Mecánica Estadística) [25–31]

Una diferencia fundamental entre los fluidos granulares y los ordinarios es la ausencia de un estado de referencia de equilibrio. En lugar de ello, el estado homogéneo, sin flujos, correspondiente a un sistema granular que evoluciona libremente, posee una dependencia temporal debida a la pérdida de energía en las colisiones. Éste es el denominado estado de enfriamiento homogéneo (HCS) [32, 33] y juega un papel similar en el caso de fluidos con colisiones inelásticas que el que juega el estado de equilibrio en los fluidos ordinarios.

En el caso más idealizado, los granos se modelan mediante partículas esféricas lisas, cuyas interacciones sólo afectan a los grados de libertad traslacionales. El efecto de la inelasticidad se incorpora fácilmente modificando la regla de colisión binaria, mediante la inclusión del coeficiente de restitución normal, que se define como la tasa de velocidad relativa normal que pierden las partículas en la colisión.

Una descripción basada en la Mecánica Estadística puede formularse a partir de la ecuación de Liouville del sistema [30, 34]. En el límite de baja densidad, se puede generalizar el método desarrollado en el caso elástico y obtener la ecuación de Boltzmann inelástica, que describe la evolución temporal de la función de distribución monoparticular. Una cuestión diferente es el dominio en el espacio de parámetros de la densidad y el coeficiente de restitución en el cual esta ecuación proporciona realmente una descripción adecuada del sistema [35].

También es posible estudiar, en el límite de baja densidad, las fluctuaciones y correlaciones en las posiciones y velocidades de las partículas a través de las funciones de distribución asociadas. Se pueden deducir ecuaciones cerradas para las fluctuaciones y las funciones de correlación, empleando las mismas aproximaciones que llevan a la ecuación de Boltzmann [36, 37]. Sin embargo, mientras que la ecuación de Boltzmann inelástica y sus implicaciones han sido ampliamente estudiadas, se sabe poco de las fluctuaciones y correlaciones en gases granulares, aunque es evidente que son cruciales para la comprensión de las propiedades de estos sistemas.

El que los medios granulares presenten un comportamiento dinámico similar al de un fluido ha llevado a intentar establecer una teoría hidrodinámica para estos sistemas. La idea es encontrar algún tipo de descripción hidrodinámica, entendida como un conjunto de ecuaciones cerradas para los campos hidrodinámicos: densidad, velocidad y temperatura (granular). El concepto de temperatura granular se introdujo a principio de los años 80 y se define desde un punto de vista cinético a través de la varianza de la distribución de velocidades de los granos. La forma y la validez de la descripción hidrodinámica para gases granulares sigue siendo un problema que genera controversia. Un contexto adecuado en el que tratar el tema de la existencia de la hidrodinámica para los gases granulares diluidos, la forma de las correspondientes ecuaciones hidrodinámicas y su rango de validez lo proporciona la ecuación de Boltzmann inelástica. Usando una extensión del método de Chapman-Enskog, se pueden derivar las ecuaciones hidrodinámicas y obtener expresiones formales para los coeficientes de transporte. Los resultados son, en principio, válidos para valores arbitrarios del coeficiente de restitución [38]. El hecho de que un sistema sea inelástico no implica suposiciones o hipótesis adicionales para la aplicabilidad a un gas granular diluido del método de Chapman-Enskog más allá de la existencia de una solución normal y la de pequeños gradientes. Las diferencias con los gases normales, esto es, el estado de referencia y la forma de las ecuaciones constitutivas, es una consecuencia del método, no una limitación de este. Los coeficientes de transporte han sido expresados recientemente como integrales temporales de la correlación de algunas funciones de la velocidad calculadas en el estado de enfriamiento homogéneo [39, 40]. Estas fórmulas son las generalizaciones de las relaciones de Green-Kubo para gases elásticos, pero con significativas diferencias que difícilmente podrían haberse esperado a priori.

Debe indicarse que el método de Chapman-Enskog y las relaciones de Green-Kubo presuponen la existencia de hidrodinámica en las escalas es-

paciales y temporales adecuadas, y por tanto, no añaden ningún soporte fundamental a la validez de una descripción hidrodinámica para gases granulares. Lo que si se puede afirmar es que, si las ecuaciones de Navier-Stokes existen, el método de Chapman-Enskog nos da su forma explícita.

Un entendimiento más profundo de la estructura de las relaciones de Green-Kubo y de su validez se sigue del análisis de la ecuación de Boltzmann linealizada, y más concretamente del espectro del operador asociado [40]. La existencia de los modos hidrodinámicos ha sido probada mediante el cálculo exacto de los autovalores y las autofunciones hidrodinámicas en el límite de longitud de onda larga [40]. Su forma hasta el orden de Navier-Stokes se obtiene por teoría de perturbaciones, encontrándose un completo acuerdo con los resultados del método de Chapman-Enskog. El punto clave que resta para establecer la relevancia de la hidrodinámica es si los correspondientes modos dominan para tiempos y longitudes de onda largos [41, 42], lo que requiere que sus autovalores sean los más pequeños y que estén aislados del resto del espectro. Los modos hidrodinámicos también determinan la forma de las fluctuaciones de las cantidades hidrodinámicas en los sistemas granulares.

Una de las características fundamentales de los gases granulares, que los diferencia de los gases ordinarios, es su tendencia a formar agregados de partículas y vórtices de velocidad [12, 13]. Para que se produzcan estas inestabilidades es necesario que el sistema sea de un tamaño tal que permita el desarrollo de excitaciones con longitud de onda larga. Esto significa que, en general, sólo los sistemas suficientemente pequeños serán estables. Esta inestabilidad ha sido identificada en el contexto de la Hidrodinámica y se ha determinado una expresión para el tamaño crítico del sistema, de manera que para tamaños mayores el sistema se vuelve inestable [38].

1.4. Simulación numérica

Al igual que en otros campos científicos, se ha producido un aumento creciente en la utilización del ordenador y de su potencia de cálculo como medio para simular sistemas granulares cada vez de mayor tamaño y complejidad. El método de Simulación Directa de Monte Carlo y el de Dinámica Molecular son herramientas indispensables para el estudio de los medios granulares, permitiendo confirmar las predicciones teóricas realizadas.

El método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC) es un método desarrollado para generar soluciones numéricas de la ecuación de Boltzmann

[43]. El algoritmo ha sido aplicado en numerosas ocasiones para el estudio de los medios granulares [32, 44]. El punto clave al interpretar los resultados obtenidos con el método DSMC es que es un método numérico que trata de reproducir la dinámica efectiva de las partículas en el límite de baja densidad [35].

La introducción del método de simulación conducido por sucesos [45] en el campo de los gases granulares [12, 46] ha revolucionado las capacidades de computación en este campo. Las simulaciones de Dinámica Molecular proporcionan un método para investigar un sistema de partículas al nivel más fundamental de descripción, esto es, siguiendo la dinámica de cada partícula. La aplicación de este método al estudio de los gases granulares presenta ciertas dificultades en el caso de sistemas no sometidos a la acción de fuerzas externas. El valor de las velocidades de las partículas va disminuyendo continuamente debido al carácter disipativo de las colisiones, y, al tener que tratarse con cantidades cada vez menores, se pueden originar problemas de redondeo. Recientemente, se ha introducido un método mediante el cual el estado de enfriamiento uniforme puede ser transformado en un estado estacionario mediante un cambio de variable en la escala temporal [47], eliminándose así los posibles problemas de precisión.

Por otro lado, como hemos comentado, el estado de enfriamiento uniforme es inestable con respecto a perturbaciones con longitud de onda grande [12, 13]. El tamaño para el cual el sistema se vuelve inestable depende de la densidad y de la inelasticidad y la simulación de estados estables impone ciertas limitaciones en el tamaño del sistema, pudiendo aparecer efectos de tamaño finito no deseados cuando se trabaja con sistemas demasiado pequeños.

1.5. Objetivos

En este trabajo se estudian distintos aspectos de los medios granulares secos, no cohesivos y en el régimen de flujos rápidos. La existencia de un tamaño del sistema para el cual el estado de referencia, el HCS, se vuelve inestable, nos ha llevado a estudiar propiedades del sistema para tamaños próximos a este tamaño crítico. Nuestro estudio no se restringirá a sistemas diluidos sino que también consideraremos sistemas con densidad finita.

Más concretamente, en esta memoria:

- Analizaremos, mediante simulaciones de Dinámica Molecular, el com-

portamiento de la energía total de un fluido granular en el HCS a medida que se va aumentando el tamaño del sistema, acercándonos a su tamaño crítico. En particular, veremos cómo varía la velocidad con la que se enfría el sistema.

- La función de distribución de probabilidades de la energía será también analizada a medida que nos acercamos al tamaño en el que el HCS se vuelve inestable. Dedicaremos especial atención al estudio del segundo momento de dicha distribución.
- Para llevar a cabo este estudio hemos desarrollado un algoritmo de simulación de Dinámica Molecular que permita reproducir la dinámica del sistema.
- Veremos cómo las fluctuaciones en un gas granular cerca de la inestabilidad pueden describirse en una forma bastante precisa empleando una teoría hidrodinámica fluctuante. Ello pondrá además de manifiesto el papel relevante que juega el acoplamiento no lineal entre los modos hidrodinámicos.

En el siguiente capítulo se realizará una revisión de la descripción hidrodinámica de los medios granulares y nos centraremos en la determinación del tamaño crítico del sistema a partir de un análisis de estabilidad lineal. En el Capítulo 3 presentaremos resultados de simulaciones de Dinámica Molecular que nos mostrarán cómo se comportan las magnitudes en las que estamos interesados a medida que nos aproximamos al tamaño crítico. En el Capítulo 4 la teoría hidrodinámica fluctuante se utiliza para explicar los comportamientos observados y discutidos en el capítulo anterior. Finalmente, en el Capítulo 5 revisamos los resultados y conclusiones más relevantes obtenidos.

Capítulo 2

Gases granulares que evolucionan libremente

En este capítulo haremos una revisión de aquellos resultados previos que van a ser el punto de partida para el desarrollo del presente trabajo. Comenzaremos presentando el modelo que emplearemos de fluido granular, el modelo de esferas duras inelásticas, caracterizado por un coeficiente de restitución normal constante. Presentaremos una extensión al caso inelástico de la ecuación de Boltzmann, y obtendremos, a partir de ella, las ecuaciones de balance para los campos hidrodinámicos.

El resto del capítulo se dedicará al estado de enfriamiento homogéneo (“homogeneous cooling state”, HCS), ya que éste es el estado objeto de estudio en esta Tesis. Dicho estado corresponde a un sistema homogéneo e isótropo que evoluciona libremente, sin fuerzas o agentes externos, y cuya energía decae monótonamente en el tiempo, como consecuencia de la inelasticidad de las colisiones. En el HCS es posible el desarrollo de inestabilidades que provocan la formación de agregados de partículas y de vórtices de velocidad. Para que estas inestabilidades se desarrollen es necesario que el sistema sobrepase un tamaño crítico, cuyo valor ha sido determinado, como veremos, a partir de un análisis de la estabilidad lineal de las ecuaciones hidrodinámicas [38].

Las propiedades del HCS en la región estable han sido estudiadas ampliamente. Entre ellas, su función de distribución monoparticular, y recientemente las fluctuaciones y correlaciones en este estado [37, 48], de las que también hablaremos en este capítulo.

Finalmente veremos cómo la dinámica del modelo de esferas duras puede

ser reformulada, a través de un cambio de variables, de modo que el HCS se transforma en un estado estacionario, existiendo una relación sencilla entre las propiedades de ambos sistemas [35, 47].

2.1. Modelo de esferas duras inelásticas

Cómo modelar un medio granular es la primera cuestión a la hora de abordar su estudio. La forma en que se hace dependerá del grado de realismo que se pretenda y de los fenómenos que se quieran explicar. Una mayor complejidad en el modelo implicará mayores dificultades a la hora de estudiarlo y es, por tanto, necesario determinar cuáles son las características esenciales que debe tener nuestro modelo para ser capaz de reproducir las propiedades de interés, sin complicar excesivamente el desarrollo teórico.

El modelo idealizado más sencillo de un fluido granular consiste en un sistema de esferas ($d = 3$) o discos ($d = 2$) duros, de masa m y diámetro σ , que colisionan inelásticamente de modo instantáneo. En la colisión se produce un cambio en las velocidades de las partículas implicadas, mientras que entre colisiones el movimiento de las partículas es balístico. Consideramos a nuestros granos como partículas macroscópicas sin estructura interna. La cantidad de movimiento se conserva en la colisión, pero no así la energía.

En este trabajo nos restringiremos al caso de esferas lisas, de forma que no existen fuerzas tangenciales a la superficie de la esfera en la colisión, sino que la fuerza se produce exclusivamente a lo largo de la línea que une los centros de las partículas en contacto. La inelasticidad en la colisión se describe a través del coeficiente de restitución normal α , definido como el cociente entre los módulos de las componentes de las velocidades relativas en la dirección de la línea que une los centros de las partículas después y antes de la colisión. El rango de valores que puede tomar será, por tanto, $0 \leq \alpha \leq 1$, correspondiendo $\alpha = 1$ al límite elástico. En este trabajo consideraremos, por sencillez, α constante, aunque en los sistemas reales depende de la velocidad relativa de las partículas que colisionan [49, 50]. Esperamos que este modelo, aunque muy simplificado, retenga las características cualitativas principales. Si las partículas fuesen rugosas habría que introducir otro coeficiente adicional, el de restitución tangencial, β .

Consecuentemente con todo lo anterior, cuando se produce una colisión,

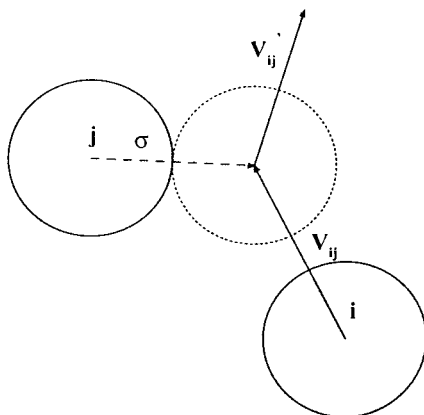


Figura 2.1: Velocidad relativa antes y después de la colisión, según las ecuaciones (2.1) y (2.2).

las velocidades de las partículas i y j implicadas se modifican según

$$\mathbf{V}_i \rightarrow \mathbf{V}'_i \equiv b_\sigma \mathbf{V}_i = \mathbf{V}_i - \frac{1+\alpha}{2} (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{V}_{ij}) \hat{\sigma}, \quad (2.1)$$

$$\mathbf{V}_j \rightarrow \mathbf{V}'_j \equiv b_\sigma \mathbf{V}_j = \mathbf{V}_j + \frac{1+\alpha}{2} (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{V}_{ij}) \hat{\sigma}, \quad (2.2)$$

siendo \mathbf{V}_i y \mathbf{V}_j las velocidades antes de la colisión, \mathbf{V}'_i y \mathbf{V}'_j las velocidades postcolisionales, $\mathbf{V}_{ij} = \mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j$ la velocidad relativa, y $\hat{\sigma}$ el vector unitario que va desde el centro de la partícula j hasta el centro de la partícula i cuando están en contacto. El operador b_σ transforma las velocidades a su derecha en las velocidades postcolisionales de acuerdo con la reglas (2.1) y (2.2). El cambio en la velocidad relativa en la dirección normal es

$$\hat{\sigma} \cdot \mathbf{V}'_{ij} = -\alpha \hat{\sigma} \cdot \mathbf{V}_{ij}. \quad (2.3)$$

Debido a la inelasticidad, la energía no se conserva en una colisión, sino que se produce una pérdida dada por

$$e' - e = -\frac{m}{4}(1 - \alpha^2)(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{V}_{ij})^2, \quad (2.4)$$

siendo e y e' las energías antes y después de la colisión, respectivamente. La energía en un sistema aislado disminuirá monótonamente como consecuencia de las colisiones.

La regla de colisión puede invertirse, excepto para $\alpha = 0$, y, dadas las velocidades tras la colisión, obtener las velocidades precolisionales,

$$\mathbf{V}_i^* \equiv b_\sigma^{-1} \mathbf{V}_i = \mathbf{V}_i - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{V}_{ij}) \hat{\sigma}, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{V}_j^* \equiv b_\sigma^{-1} \mathbf{V}_j = \mathbf{V}_j + \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{V}_{ij}) \hat{\sigma}, \quad (2.6)$$

siendo b_σ^{-1} el operador que reemplaza las velocidades a su derecha por las velocidades precolisionales.

2.2. Ecuación de Boltzmann inelástica

Al igual que sucede en el caso de fluidos ordinarios con colisiones elásticas, la aplicación de los métodos de la Teoría Cinética a los medios granulares implica la obtención de una ecuación cinética para la función de distribución y posteriormente, la resolución de la misma. Aunque muchas de las ecuaciones cinéticas para los flujos granulares han sido derivadas mediante argumentos intuitivos [51], el problema también se ha formulado a partir de las propias ecuaciones de movimiento de las partículas, de las que se deriva una ecuación de evolución para la función de distribución del sistema completo, que es una generalización de la ecuación de Liouville para sistemas conservativos [30]. A partir de esta ecuación se obtiene la (BBGKY) para las funciones de distribución reducidas. La ecuación para la función de distribución monoparticular $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ que se obtiene involucra de la función de distribución de dos partículas. En el caso de baja densidad, esta ecuación puede desacoplarse del resto de las de la jerarquía, obteniéndose una ecuación cerrada para $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, la ecuación de Boltzmann inelástica [29]. La deducción de esta ecuación se puede hacer también a un nivel fenomenológico, de modo análogo a como lo hiciera Boltzmann para el caso elástico [52].

En el límite de baja densidad, la deducción de la ecuación para $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ implica hacer las mismas suposiciones que en el caso de los fluidos ordinarios. Al estar tratando con un sistema poco denso, vamos a considerar despreciables los efectos de las colisiones que implican a tres o más partículas. La descripción de nuestro sistema podrá hacerse simplemente en términos de colisiones binarias. Por otro lado, despreciaremos las correlaciones de las partículas que van a colisionar. Esto no significa admitir que no existan correlaciones en nuestro sistema, sino suponer que las partículas que colisionan

proviene de regiones diferentes del mismo y su "historia colisional" es distinta en el momento de encontrarse. Obviamente, una vez que se produce la colisión, las partículas sí van a estar correlacionadas.

Para el caso de gases diluidos es de esperar que la función de distribución precolisional de dos partículas $f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t)$ puede aproximarse por el producto de las funciones de distribución monoparticulares, esto es,

$$f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t) \simeq f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t)f(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t). \quad (2.7)$$

Ésta es la conocida .

De este modo, la evolución de la función de distribución $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ de un gas de esferas o discos duros inelásticos en el límite de baja densidad se considera bien descrita por la ecuación de Boltzmann

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) f = J[f|f], \quad (2.8)$$

donde $J[f|f]$ es el operador de colisión de Boltzmann inelástico que viene dado por

$$J[f|f] = \int d\mathbf{v} \bar{T}(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t), \quad (2.9)$$

siendo $\bar{T}(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ el operador de colisión binario inelástico

$$\bar{T}(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1) = \sigma^{d-1} \int d\hat{\sigma} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\sigma}) \mathbf{g} \cdot \hat{\sigma} (\alpha^{-2} b_{\sigma}^{-1} - 1), \quad (2.10)$$

donde $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$, Θ es la función de Heaviside, $\hat{\sigma}$ es el vector unitario que une los centros de las dos partículas en contacto, α es el coeficiente de restitución normal y b_{σ}^{-1} un operador que reemplaza las velocidades \mathbf{v} y \mathbf{v}_1 a su derecha por los valores precolisionales \mathbf{v}^* y \mathbf{v}_1^* , dados por las ecuaciones (2.5) y (2.6).

Para densidades mayores, es posible considerar una extensión de la de los sistemas inelásticos [30]. Esta ecuación incorpora correlaciones espaciales entre las partículas que van a colisionar, y proporciona una descripción bastante adecuada para fluidos moderadamente densos. En este caso, en la esfera precolisional se aproxima $f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t) \simeq g_2(\sigma) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t)$, siendo $g_2(\sigma)$ el valor de la función de correlación de pares, $g_2(r_{12})$, en contacto. La función $g_2(r_{12})$ describe la densidad de probabilidad de que la distancia entre un par de partículas, con cualquier velocidad, sea igual a r_{12} .

A partir de la ecuación de Boltzmann inelástica (2.8) se pueden obtener las ecuaciones de balance para los campos hidrodinámicos. Suele admitirse que estos campos son los mismos para un gas granular que en el caso de los fluidos ordinarios, esto es, la densidad numérica de partículas $n(\mathbf{r}, t)$, el campo de velocidades $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ y la temperatura local $T(\mathbf{r}, t)$ [24]. Las definiciones en términos de la función de distribución monoparticular son:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.11)$$

$$n(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.12)$$

$$\frac{d}{2}n(\mathbf{r}, t)T(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \frac{m}{2}V^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.13)$$

donde $\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ es la velocidad de la partícula relativa al flujo de velocidad local.

Podemos obtener las ecuaciones de balance para estos campos hidrodinámicos fácilmente tomando momentos en la ecuación de Boltzmann inelástica (2.8), resultando

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + (mn)^{-1} \nabla \cdot \mathbf{P} = 0, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T + \frac{2}{nd}(\mathbf{P} : \nabla \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{q}) + T\zeta = 0, \quad (2.16)$$

donde \mathbf{P} y \mathbf{q} son el tensor de presiones y el vector flujo de calor respectivamente, cuyas formas funcionales son

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = m \int d\mathbf{v} \mathbf{V} \mathbf{V} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = nk_B T \mathbf{I} + \int d\mathbf{v} D(\mathbf{V}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.17)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = \frac{m}{2} \int d\mathbf{v} V^2 \mathbf{V} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int d\mathbf{v} \mathbf{S}(\mathbf{V}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (2.18)$$

En las expresiones anteriores, \mathbf{I} es el tensor unitario y

$$D(\mathbf{V}) = m \left(\mathbf{V} \mathbf{V} - \frac{1}{d} V^2 \mathbf{I} \right), \quad (2.19)$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{V}) = \left(\frac{m}{2} V^2 - \frac{d+2}{2} T \right) \mathbf{V}. \quad (2.20)$$

La funcional ζ recibe el nombre de velocidad de enfriamiento y viene dada por

$$\zeta(\mathbf{r}, t) = \frac{(1 - \alpha^2)\pi^{\frac{d-1}{2}} m \sigma^{d-1}}{4\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right) n T d} \int d\mathbf{v} \mathbf{v} \mathbf{v}_1 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|^3. \quad (2.21)$$

Para un gas normal con colisiones elásticas, las ecuaciones (2.14)-(2.16) son las leyes locales de conservación macroscópica para la masa, el momento y la energía. Para el caso inelástico, la única diferencia formal es la aparición del término que contiene la velocidad de enfriamiento, ζ , en la ecuación de la temperatura, que es consecuencia del carácter disipativo de las colisiones.

2.3. Estado de enfriamiento homogéneo (HCS)

Como ya hemos comentado, debido a la continua disipación de energía que se produce en un sistema granular como consecuencia de las colisiones, no existe un estado estacionario similar al estado de equilibrio de los fluidos ordinarios. En este caso, el estado homogéneo de referencia de un sistema aislado es el HCS.

La ecuación de Boltzmann inelástica (2.8) admite una solución especial describiendo el HCS, $f_{HCS}(\mathbf{v}, t)$. En este estado, la densidad n_H es homogénea, la velocidad media \mathbf{u} es nula y toda la dependencia temporal de la función de distribución viene dada a través de la temperatura homogénea $T_{HCS}(t)$. La función de distribución del HCS admite un escalamiento de la forma [29]:

$$f_{HCS}(\mathbf{v}, t) = n_H v_0^{-d}(t) \chi_{HCS}(\mathbf{c}), \quad (2.22)$$

siendo

$$v_0(t) \equiv \left[\frac{2T_{HCS}(t)}{m} \right]^{1/2}, \quad (2.23)$$

y $\chi_{HCS}(\mathbf{c})$ una función isótropa de la velocidad escalada $\mathbf{c} = \mathbf{v}/v_0(t)$.

El campo hidrodinámico de interés en este estado es, por tanto, la temperatura granular, $T_{HCS}(t)$, y la ecuación (2.16) que obedece se reduce a

$$\frac{\partial T_{HCS}(t)}{\partial t} + \zeta_{HCS}(t) T_{HCS}(t) = 0, \quad (2.24)$$

donde la velocidad de enfriamiento $\zeta_{HCS}(t)$ es una funcional bilineal de χ_{HCS} ,

$$\zeta_{HCS}(t) = \frac{(1 - \alpha^2)\pi^{\frac{d-1}{2}}\sigma^{d-1}n_H v_0(t)}{2\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right)d} \int d\mathbf{c} \int d\mathbf{c}_1 |\mathbf{c} - \mathbf{c}_1|^3 \chi_{HCS}(\mathbf{c}) \chi_{HCS}(\mathbf{c}_1). \quad (2.25)$$

Teniendo en cuenta que $\zeta_{HCS}(t) \propto T_{HCS}(t)^{1/2}$, la ecuación (2.24) puede integrarse, resultando la conocida ley de Haff [25],

$$T_{HCS}(t) = \frac{T_{HCS}(0)}{\left[1 + \frac{1}{2}\zeta_{HCS}(0)t\right]^2}. \quad (2.26)$$

Sustituyendo (2.22) en (2.8) y empleando (2.24) obtenemos una ecuación cerrada para $\chi_{HCS}(\mathbf{c})$,

$$\frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} \cdot (\mathbf{c} \chi_{HCS}) = J'[\chi_{HCS}|\chi_{HCS}]. \quad (2.27)$$

En esta expresión

$$\zeta_0 = \frac{l\zeta_{HCS}(t)}{v_0(t)} \quad (2.28)$$

es la velocidad de enfriamiento del HCS adimensionalizada, siendo $l \equiv (n_H \sigma^{d-1})^{-1}$ proporcional al recorrido libre medio del gas. Además hemos introducido J' como

$$J'[\chi_{HCS}|\chi_{HCS}] = \int d\mathbf{c}_1 \bar{T}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1) \chi_{HCS}(\mathbf{c}) \chi_{HCS}(\mathbf{c}_1), \quad (2.29)$$

con

$$\bar{T}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1) = \int d\hat{\sigma} \Theta[(\mathbf{c} - \mathbf{c}_1) \cdot \hat{\sigma}] (\mathbf{c} - \mathbf{c}_1) \cdot \hat{\sigma} [\alpha^{-2} b_\sigma^{-1} - 1]. \quad (2.30)$$

El operador b_σ^{-1} viene definido por (2.5) y (2.6), pero reemplazando las velocidades \mathbf{V}_i y \mathbf{V}_j por \mathbf{c} y \mathbf{c}_1 , respectivamente. Es útil introducir en este punto variables escaladas de tiempo y longitud definidas mediante

$$s = \int_0^t dt_1 \frac{v_0(t_1)}{l}, \quad \mathbf{l} = l^{-1} \mathbf{r}, \quad (2.31)$$

respectivamente. Es fácil ver que $s(t)$ es proporcional al número medio de colisiones por partícula en el intervalo $(0, t)$. En función de la variable s , la ecuación (2.24) se reduce a

$$\frac{\partial T_{HCS}}{\partial s} = -\zeta_0 T_{HCS}(s), \quad (2.32)$$

donde se aprecia que la temperatura del HCS decrece exponencialmente sobre esta escala temporal, es decir, el número acumulado de colisiones por partícula.

A diferencia de lo que ocurre en el estado de equilibrio de un gas molecular, no se conoce la solución analítica de la ecuación de Boltzmann inelástica para el estado de enfriamiento homogéneo, es decir, la distribución $\chi_{HCS}(\mathbf{c})$. Se ha obtenido una expresión aproximada de la misma mediante un desarrollo en polinomios de Sonine [53],

$$\chi_{HCS}(\mathbf{c}) = \chi_{HCS}^{(0)}(\mathbf{c}) \sum_{j=0}^{\infty} a_j S_{d/2-1}^{(j)}(c^2), \quad (2.33)$$

donde $\chi_{HCS}^{(0)}(\mathbf{c}) = \pi^{-d/2} e^{-c^2}$ es la distribución gaussiana y $S_l^{(j)}$ son los polinomios de Sonine definidos como

$$S_l^{(j)}(x) = \sum_{p=0}^j \frac{\Gamma(j+l+1)}{(j-p)! p! \Gamma(p+l+1)} (-x)^p. \quad (2.34)$$

De la condición de normalización y de la definición de temperatura se obtiene que $a_0 = 1$ y $a_1 = 0$. El coeficiente a_2 está relacionado con el cuarto momento de $\chi_{HCS}(\mathbf{c})$ por

$$a_2(\alpha) = \frac{4\bar{c}^4}{d(d+2)} - 1, \quad (2.35)$$

siendo

$$\bar{c}^4 \equiv \int d\mathbf{c} c^4 \chi_{HCS}(\mathbf{c}). \quad (2.36)$$

Sustituyendo la expresión de $\chi_{HCS}(\mathbf{c})$ dada por (2.33), reteniendo sólo hasta $j = 2$, en la ecuación (2.27) y despreciando los términos no lineales en a_2 resulta [33, 53],

$$a_2(\alpha) = \frac{16(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{9+24d+(8d-41)\alpha+30\alpha^2-30\alpha^3}. \quad (2.37)$$

En esta misma aproximación se puede obtener una expresión aproximada para ζ_0 que es

$$\zeta_0 = \frac{\sqrt{2}\pi^{\frac{d-1}{2}}(1-\alpha^2)}{\Gamma(\frac{d}{2})2} \left[1 + \frac{3}{16}a_2(\alpha) \right]. \quad (2.38)$$

2.3.1. Ecuaciones hidrodinámicas linealizadas alrededor del HCS

Consideremos ahora un estado muy próximo al estado de enfriamiento homogéneo. Una forma de abordar su estudio es linealizando las ecuaciones hidrodinámicas alrededor del HCS. Esta linealización nos permite obtener unas ecuaciones diferenciales con coeficientes que son independientes de la variable espacial pero dependen del tiempo, ya que el estado de referencia está enfriándose continuamente. Para eliminar esta dependencia temporal se propone el cambio de variables en el espacio y en el tiempo dado por (2.31). Sea $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ la función de distribución de este estado. Definimos, en las nuevas variables

$$\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s) = n_H^{-1} v_0^d(t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (2.39)$$

Al encontrarnos en un estado próximo al HCS podemos escribir

$$\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s) = \chi_{HCS}(\mathbf{c}) + \delta\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s) \quad (2.40)$$

siendo $\delta\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s)$ la desviación con respecto a su valor en el HCS.

Definimos las desviaciones relativas de los campos hidrodinámicos como

$$\rho(\mathbf{l}, s) \equiv \frac{\delta n(\mathbf{r}, t)}{n_H} = \int d\mathbf{c} \delta\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s), \quad (2.41)$$

$$\boldsymbol{\omega}(\mathbf{l}, s) \equiv \frac{\delta \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{v_0(t)} = \int d\mathbf{c} \mathbf{c} \delta\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s), \quad (2.42)$$

$$\theta(\mathbf{l}, s) \equiv \frac{\delta T(\mathbf{r}, t)}{T_{HCS}(t)} = \int d\mathbf{c} \left(\frac{2c^2}{d} - 1 \right) \delta\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s), \quad (2.43)$$

siendo $\delta y(\mathbf{r}, t) \equiv y(\mathbf{r}, t) - y_{HCS}(t)$ la desviación del valor local de la variable macroscópica y respecto de su valor en el HCS. Linealizando las ecuaciones hidrodinámicas, se obtienen las ecuaciones de balance linealizadas para los campos hidrodinámicos escalados,

$$\frac{\partial}{\partial s} \rho(\mathbf{l}, s) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\omega}(\mathbf{l}, s) = 0, \quad (2.44)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial s} - \frac{\zeta_0}{2} \right) \boldsymbol{\omega}(\mathbf{l}, s) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\Pi}(\mathbf{l}, s) = 0, \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s} \theta(\mathbf{l}, s) + \frac{2}{d} \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\omega}(\mathbf{l}, s) + \frac{2}{d} \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{l}, s) + \delta\zeta_0(\mathbf{l}, s) - \\ - \zeta_0[\theta(\mathbf{l}, s) + \rho(\mathbf{l}, s)] = 0, \end{aligned} \quad (2.46)$$

donde Π y ϕ son el tensor de presiones y el flujo de calor en las variables reducidas definidos como

$$\Pi = \frac{1}{2}[\theta(\mathbf{l}, s) + \rho(\mathbf{l}, s)]\mathbf{I} + \int d\mathbf{c}\Delta(\mathbf{c})\delta\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s), \quad (2.47)$$

$$\phi(\mathbf{l}, s) = \int d\mathbf{c}\Sigma(\mathbf{c})\delta\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s), \quad (2.48)$$

siendo Δ y Σ las formas adimensionales de \mathbf{D} y \mathbf{S} ,

$$\Delta(\mathbf{c}) = \mathbf{c}\mathbf{c} - \frac{c^2}{d}\mathbf{I}, \quad (2.49)$$

$$\Sigma(\mathbf{c}) = \left(c^2 - \frac{d+2}{2}\right)\mathbf{c}. \quad (2.50)$$

Las cantidades Π y ϕ están relacionadas con la linealización de los flujos dados por las ecuaciones (2.17) y (2.18) mediante

$$\Pi(\mathbf{l}, s) = \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)}{2n_H T_{HCS}(t)}, \quad (2.51)$$

$$\phi(\mathbf{l}, s) = \frac{m^{1/2}\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)}{2^{1/2}n_H T_{HCS}^{3/2}(t)}. \quad (2.52)$$

Finalmente, el término $\delta\zeta_0(\mathbf{l}, s)$ es la desviación lineal de la velocidad de enfriamiento adimensional con respecto a su valor en el estado de enfriamiento homogéneo,

$$\delta\zeta_0(\mathbf{l}, s) = \frac{(1 - \alpha^2)\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right)d} \int d\mathbf{c} \int d\mathbf{c}_1 \chi_{HCS}(\mathbf{c})\delta\chi(\mathbf{l}, \mathbf{c}, s)|\mathbf{c} - \mathbf{c}_1|^2. \quad (2.53)$$

Por supuesto, las ecuaciones (2.44)-(2.46) pueden obtenerse también a partir de la linealización de la ecuación de Boltzmann inelástica, tomando posteriormente momentos. Estas ecuaciones son el punto de partida para la descripción hidrodinámica de nuestro sistema, ya que describen la evolución de los campos hidrodinámicos en la aproximación lineal. Es necesario cerrar las ecuaciones, transformando las expresiones formales del tensor de presiones, el flujo de calor y la velocidad de enfriamiento en expresiones en términos de los propios campos hidrodinámicos, esto es, establecer las ecuaciones constitutivas. Esto puede hacerse mediante la aplicación del método de Chapman-Enskog [38].

La expresión para el tensor de presiones y el vector flujo de calor en primer orden en los gradientes puede escribirse como

$$\Pi_{ij}(\mathbf{l}, s) = \frac{1}{2}[\theta(\mathbf{l}, s) + \rho(\mathbf{l}, s)]\delta_{ij} - \tilde{\eta} \left[\frac{\partial}{\partial l_i} \omega_j(\mathbf{l}, s) + \frac{\partial}{\partial l_j} \omega_i(\mathbf{l}, s) - \frac{2}{d} \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\omega}(\mathbf{l}, s) \delta_{ij} \right], \quad (2.54)$$

$$\phi(\mathbf{l}, s) = -\tilde{\kappa} \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \theta(\mathbf{l}, s) - \tilde{\mu} \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \rho(\mathbf{l}, s). \quad (2.55)$$

La ecuación (2.54) es la expresión esperada para el tensor de presiones e incluye el coeficiente de viscosidad tangencial $\tilde{\eta}$, que, al igual que en el caso de los fluidos ordinarios, caracteriza el flujo de momento debido al gradiente de velocidad. La ecuación (2.55) contiene, además de la ley de Fourier normal caracterizada por la conductividad térmica $\tilde{\kappa}$, una contribución adicional proporcional al gradiente de densidad y con un coeficiente de transporte asociado $\tilde{\mu}$ que no tiene análogo en el caso de gases elásticos. La conductividad térmica caracteriza el flujo de calor debido al gradiente de temperatura mientras que el nuevo coeficiente $\tilde{\mu}$ relaciona el flujo de calor con el gradiente de densidad [32, 54]. Se han obtenido expresiones explícitas para estos coeficientes de transporte mediante la aplicación del método de Chapman-Enskog [38], en la primera aproximación de Sonine y se han detallado en el Apéndice A.

En lo referente a la desviación de la velocidad de enfriamiento, $\delta\zeta_0$, sólo consideraremos los términos de orden cero, ya que no existen términos de orden 1 (se anulan por simetría) y los de orden 2 son despreciables frente a los primeros [38],

$$\delta\zeta_0(\mathbf{l}, s) \simeq \zeta_0 \left[2\rho(\mathbf{l}, s) + \frac{3}{2}\theta(\mathbf{l}, s) \right]. \quad (2.56)$$

2.3.2. Análisis de estabilidad

Las ecuaciones hidrodinámicas obtenidas en el apartado anterior permitirán llevar a cabo un análisis de la estabilidad lineal del HCS. Las predicciones que se obtengan serán, por tanto, válidas para el caso de pequeñas fluctuaciones alrededor del estado de referencia considerado, el HCS. Trabajaremos para ello en el espacio de Fourier. Definimos los campos transformados $\rho_{\mathbf{k}}(s)$, $\omega_{\mathbf{k}}(s)$ y $\theta_{\mathbf{k}}(s)$, como

$$y_{\mathbf{k}}(s) = \int d\mathbf{l} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} y(\mathbf{l}, s). \quad (2.57)$$

Si escribimos ahora las ecuaciones (2.44)-(2.46) en el espacio de Fourier, obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial s} \rho_{\mathbf{k}}(s) + i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}}(s) = 0, \quad (2.58)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial s} - \frac{\zeta_0}{2} + \frac{2(d-1)}{d} \tilde{\eta} k^2 \right) \omega_{\mathbf{k}\parallel} + \frac{ik}{2} \theta_{\mathbf{k}} + \frac{ik}{2} \rho_{\mathbf{k}} = 0, \quad (2.59)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial s} - \frac{\zeta_0}{2} + \tilde{\eta} k^2 \right) \omega_{\mathbf{k}\perp} = 0, \quad (2.60)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial s} + \frac{\zeta_0}{2} + \frac{d}{2} \tilde{\kappa} k^2 \right) \theta_{\mathbf{k}} + \left(\zeta_0 + \frac{d}{2} \tilde{\mu} k^2 \right) \rho_{\mathbf{k}} + \frac{2}{d} ik \omega_{\mathbf{k}\parallel} = 0. \quad (2.61)$$

Debe notarse que hemos escrito dos ecuaciones para la velocidad escalada $\boldsymbol{\omega}$, una para la componente paralela al vector \mathbf{k} , $\omega_{\mathbf{k}\parallel}$, y otra para las $(d-1)$ componentes ortogonales al vector de onda, $\omega_{\mathbf{k}\perp}$. Del conjunto de las ecuaciones se observa que la ecuación para la velocidad transversal, $\omega_{\mathbf{k}\perp}$, está desacoplada del resto y puede ser resuelta fácilmente, obteniéndose

$$\omega_{\mathbf{k}\perp}(s) = \omega_{\mathbf{k}\perp}(0) e^{\lambda_{\perp}(k)s}, \quad (2.62)$$

donde $\lambda_{\perp}(k)$ es el autovalor asociado a los modos transversales,

$$\lambda_{\perp}(k) = \frac{\zeta_0}{2} - \tilde{\eta} k^2. \quad (2.63)$$

Así pues, el autovalor $\lambda_{\perp}(k)$ puede tomar valores tanto positivos como negativos según sea el módulo del vector \mathbf{k} considerado. Si definimos

$$k_{\perp}^c = \left(\frac{\zeta_0}{2\tilde{\eta}} \right)^{1/2}, \quad (2.64)$$

todas las perturbaciones o modos de la velocidad transversal con $k < k_{\perp}^c$ tienen asociados valores positivos de $\lambda_{\perp}(k)$. De este modo, perturbaciones de longitud de onda tales que exciten estos modos crecerán exponencialmente, implicando una inestabilidad del estado de referencia. Cuando la perturbación se hace mayor, la hidrodinámica completa, no lineal, es necesaria para entender la evolución y posible estabilización. Hay que observar que, aunque la velocidad transversal escalada con la velocidad térmica, esto es, $\omega_{\mathbf{k}\perp}$, crece exponencialmente, la velocidad en las variables originales, $\mathbf{u}_{\mathbf{k}\perp}(t)$ siempre decae en el tiempo.

El desarrollo de estos modos transversales lleva a la formación de vórtices de velocidad. Es necesario, para que se produzca la formación de los vórtices, que en nuestro sistema puedan desarrollarse modos con $k < k_{\perp}^c$ lo que implica que el tamaño del sistema debe ser tal que $L^* > \frac{2\pi}{k_{\perp}^c}$, siendo aquí L^* el tamaño lineal del sistema en las variables escaladas que estamos considerando. Por encima de este tamaño, el estado de enfriamiento homogéneo no es estable y una perturbación en la velocidad transversal no decae en el tiempo. Esto no sucede en el caso elástico, en el que el estado de equilibrio de un sistema aislado es linealmente estable independientemente del tamaño.

En las variables no escaladas originales, la expresión de la longitud crítica por encima de la cual el sistema se vuelve inestable es

$$L_c = \frac{2\pi}{n_H \sigma^{d-1}} \left(\frac{2\tilde{\eta}}{\zeta_0} \right)^{1/2}. \quad (2.65)$$

Si el sistema es más pequeño, los modos con autovalor positivo no son posibles y no se produce la formación y desarrollo de vórtices. La exactitud de esta predicción ha sido verificada mediante simulaciones de Monte Carlo de la ecuación de Boltzmann [55]. Recordemos que este valor del tamaño crítico ha sido determinado en el límite diluido. En el caso de sistemas más densos es necesario recurrir a la teoría de Enskog [56], pero como veremos más adelante la precisión con la que determina el tamaño crítico no es suficiente para nuestros propósitos.

Del resto de ecuaciones hidrodinámicas linealizadas, que constituyen un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden, se obtienen otros tres autovalores, y es posible hacer un análisis del signo de los mismos análogo al hecho para los modos transversales. Sin embargo, para nuestro trabajo sólo nos interesa el modo correspondiente a la velocidad transversal, y es por eso que no vamos a hablar en detalle del resto [38]. Cabe destacar, en todo caso, que la inestabilidad transversal es la primera que se alcanza al ir aumentando el tamaño del sistema, esto es, corresponde a un k mayor. Además, las contribuciones de los acoplos no lineales de la velocidad transversal juegan un papel crucial en la formación y el desarrollo inicial de los agregados de partículas [12, 57].

2.3.3. Fluctuaciones de la energía total en el HCS

Como ya hemos comentado, las propiedades del HCS lejos de la inestabilidad, esto es, considerando tamaños del sistema bien por debajo del

2.3. Estado de enfriamiento homogéneo (HCS)

tamaño crítico, han sido ampliamente estudiadas. Entre otras cuestiones, recientemente se ha estudiado el comportamiento de las correlaciones de las fluctuaciones de la energía total en este estado [37, 48]. Esto se ha hecho desde el punto de vista de la Teoría Cinética, a través de las ecuaciones que obedecen las funciones de correlación para uno y dos tiempos en el límite de baja densidad. Se obtiene así el valor de las correlaciones de las fluctuaciones de la energía total del sistema, empleando para ello el conocimiento de las autofunciones del operador de Boltzmann linealizado [40, 58]. En este apartado sólo presentaremos los resultados obtenidos. Para un estudio detallado ver [37, 48, 59]. Es importante señalar que, aunque su deducción se basa, como hemos indicado, en el conocimiento de los modos hidrodinámicos, la validez del resultado no se restringe a ningún tipo de régimen hidrodinámico.

La energía total del sistema en una cierta configuración puede escribirse como

$$E[\Gamma(t)] = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{v} \frac{mv^2}{2} F_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.66)$$

donde Γ representa un punto en el espacio fásico y $F_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ es la densidad microscópica en el espacio fásico definida por

$$F_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_{i=1}^N \delta[\mathbf{r} - \mathbf{R}_i(t)] \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \quad (2.67)$$

con $\mathbf{R}_i(t)$ y $\mathbf{V}_i(t)$ la posición y velocidad de la partícula i en el instante t .

Las fluctuaciones de la energía con respecto al valor medio se definen como

$$\delta E(\Gamma, t) = E[\Gamma(t)] - \langle E(t) \rangle_{HCS}, \quad (2.68)$$

con

$$\langle E(t) \rangle_{HCS} \equiv \int d\Gamma E(\Gamma) \rho_{HCS}(\Gamma, t), \quad (2.69)$$

siendo $\rho_{HCS}(\Gamma, t)$ la función de distribución de probabilidades del HCS en el instante t .

Los resultados que se van a presentar a continuación no son exactos, sino que para su derivación es necesaria una aproximación operacional debido a que no se conoce la autofunción del operador adjunto del operador de Boltzmann linealizado correspondiente al autovalor de la energía. El valor que se obtiene para la correlación de las fluctuaciones de energía en el HCS es

$$\langle (\delta E(t))^2 \rangle_{HCS} = N k_B^2 T_{HCS}^2(t) e(\alpha), \quad (2.70)$$

donde se ha introducido la función $e(\alpha)$

$$e(\alpha) = d^2 \left[\frac{d+1}{2d} + \frac{d+2}{4d} a_2(\alpha) + b(\alpha) \right], \quad (2.71)$$

con $b(\alpha)$ una funcional de la función de distribución en el HCS que, en la primera aproximación de Sonine, viene dada por

$$b(\alpha) = \frac{2 + d - 6d^2 - (10 - 15d + 2d^2)\alpha - 2(2 + 7d)\alpha^2 + 2(10 - d)\alpha^3}{6d(2d + 1) - 2d(11 - 2d)\alpha + 12d\alpha^2 - 12d\alpha^3}. \quad (2.72)$$

Recordemos que en la misma aproximación, $a_2(\alpha)$ viene dada por la ecuación (2.37). La función $e(\alpha)$ crece monótonamente con α , anulándose en el límite elástico. Cuanto más inelástico es el sistema, la pérdida de energía en cada colisión es mayor y, por tanto, las fluctuaciones de la energía son mayores. Esta predicción teórica ha sido comparada con resultados de simulación de Dinámica Molecular para sistemas con tamaño mucho menores que el crítico, encontrándose un buen acuerdo entre ambos. Las simulaciones también han mostrado que la función densidad de probabilidad de las fluctuaciones de la energía total se ajusta con bastante precisión a una distribución gaussiana.

Por otro lado, las correlaciones temporales de la energía se definen como

$$C_{EE}(t, t') \equiv \langle E(t)E(t') \rangle_{HCS} - \langle E(t) \rangle_{HCS} \langle E(t') \rangle_{HCS}, \quad (2.73)$$

con $t \geq t' \geq 0$. Esta cantidad también ha sido estudiada en la aproximación mencionada anteriormente [37, 48, 59]. El valor teórico que se obtiene es

$$C_{EE}(t, t') = Nk_B^2 T_{HCS}(t) T_{HCS}(t') e(\alpha) e^{-\frac{\zeta_0[s(t)-s(t')]}{2}}. \quad (2.74)$$

Así pues, las correlaciones de la energía decaen exponencialmente en la escala s definida por (2.31) con la velocidad de enfriamiento adimensional, ζ_0 . Se encuentra de nuevo un buen acuerdo con los resultados de simulación de Dinámica Molecular para el caso de sistemas diluidos lejos de la inestabilidad transversal.

Estos resultados muestran que existen correlaciones de velocidad en un gas granular como consecuencia de la inelasticidad de las colisiones, incluso en el límite de baja densidad.

2.3.4. Representación estacionaria del HCS

Recientemente [35, 47] aprovechando las propiedades de escala del HCS, se ha propuesto una transformación que convierte a este estado en un estado estacionario. Esta transformación consiste básicamente en un cambio en la escala temporal, como veremos a continuación.

La ley de Haff, dada por (2.26) posee la interesante propiedad de volverse independiente de la temperatura inicial en el límite de tiempos largos. Más exactamente se reduce a

$$T_{HCS} \sim 4(\bar{\zeta}t)^{-2}, \quad (2.75)$$

siendo

$$\bar{\zeta} = \frac{\zeta_{HCS}(t)}{T_{HCS}^{1/2}(t)}. \quad (2.76)$$

Este límite de tiempos largos para la temperatura implica la existencia de un régimen asintótico en el cual el HCS se vuelve independiente de la condición inicial o, en otras palabras, todos los estados de enfriamiento homogéneo de un sistema con un α dado tienden a converger en el límite de tiempos largos. Este comportamiento sugiere que podemos obtener una representación estacionaria en la escala temporal τ definida por [35, 47]

$$\omega_0\tau = \ln \frac{t}{t_0}, \quad (2.77)$$

donde ω_0 y t_0 son constantes arbitrarias. Consistentemente, la velocidad de la partícula i en estas nuevas variables, \mathbf{W}_i , viene dada por

$$\mathbf{W}_i(\tau) = \omega_0 t_0 e^{\omega_0\tau} \mathbf{V}_i(t) = \omega_0 t \mathbf{V}_i(t). \quad (2.78)$$

En la nueva escala temporal, las partículas entre colisiones se aceleran, y la dinámica entre colisiones viene dada por

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{R}_i(\tau) = \mathbf{W}_i(\tau), \quad (2.79)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{W}_i(\tau) = \omega_0 \mathbf{W}_i(\tau). \quad (2.80)$$

Por otro lado, el efecto de una colisión entre las partículas i y j es modificar instantáneamente sus velocidades según las mismas reglas dadas por (2.1) y

(2.2), es decir,

$$\mathbf{W}_i \rightarrow \mathbf{W}'_i \equiv b_\sigma \mathbf{W}_i = \mathbf{W}_i - \frac{1+\alpha}{2} (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{W}_{ij}) \hat{\sigma}, \quad (2.81)$$

$$\mathbf{W}_j \rightarrow \mathbf{W}'_j \equiv b_\sigma \mathbf{W}_j = \mathbf{W}_j + \frac{1+\alpha}{2} (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{W}_{ij}) \hat{\sigma} \quad (2.82)$$

La invarianza de la regla de colisión es, por supuesto, una consecuencia del carácter instantáneo de la colisión o, en otras palabras, de la ausencia de una escala temporal intrínseca para esferas duras. En la escala τ , la ecuación de Boltzmann toma la forma

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \omega_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \cdot \mathbf{w} + \mathbf{w} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{w}, t) = J[\tilde{f}|\tilde{f}]. \quad (2.83)$$

Aquí J es el mismo operador de colisión definido por (2.9), pero sustituyendo las velocidades \mathbf{v} , \mathbf{v}_1 por \mathbf{w} , \mathbf{w}_1 . La función de distribución monoparticular escalada es

$$\tilde{f}(\mathbf{r}, \mathbf{w}, t) = (\omega_0 t)^{-d} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (2.84)$$

Por tanto, la única modificación de la ecuación de Boltzmann en las variables escaladas es la aparición de un nuevo término en la ecuación, como se esperaba, consecuencia de la nueva dinámica del sistema dada por (2.79) y (2.80). Este término tiene la forma característica de un termostato que permite al sistema estar en un estado estacionario, pero es importante resaltar que aquí ha aparecido a través de un simple cambio de variable.

Supongamos que nuestro sistema se encuentra en el HCS y que permanece en él a lo largo de su evolución. Para que esto sea así es necesario eliminar la posibilidad de que el sistema desarrolle espontáneamente inhomogeneidades espaciales debido a la existencia de perturbaciones con longitud de onda larga [12, 13, 60, 61]. En principio, la inestabilidad puede evitarse considerando sistemas suficientemente pequeños, como ya hemos indicado reiteradamente.

En la dinámica modificada, definimos una nueva temperatura del HCS, \tilde{T}_{HCS} , como

$$\frac{d}{2} n_H k_B \tilde{T}_{HCS}(\tau) = \int d\mathbf{w} \frac{1}{2} m w^2 \tilde{f}_{HCS}(\mathbf{w}, \tau) \quad (2.85)$$

donde $\tilde{f}_{HCS}(\mathbf{w}, \tau)$ es la función de distribución monoparticular escalada del HCS. La ecuación de evolución que obedece esta nueva temperatura es

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} - 2\omega_0 \right) \tilde{T}_{HCS}(\tau) = -\zeta \tilde{T}_{HCS}^{3/2}(\tau), \quad (2.86)$$

2.3. Estado de enfriamiento homogéneo (HCS)

siendo su solución

$$\tilde{T}_{HCS}(\tau) = \left(\frac{2\omega_0}{\bar{\zeta}}\right)^2 \left[1 + \left(\frac{2\omega_0}{\bar{\zeta}\tilde{T}_{HCS}^{1/2}(0)} - 1\right) e^{-\omega_0\tau}\right]^{-2}. \quad (2.87)$$

Consecuentemente, sea cual sea la temperatura inicial de nuestro sistema, ésta alcanza un valor estacionario, en el límite de tiempos largos, dado por

$$\tilde{T}_{st} = \left(\frac{2\omega_0}{\bar{\zeta}}\right)^2. \quad (2.88)$$

Como ya hemos comentado, esta expresión es válida siempre y cuando nuestro sistema permanezca en el HCS a lo largo de su evolución, y nos proporciona el valor de $\bar{\zeta}$ a partir de la temperatura estacionaria, \tilde{T}_{st} , alcanzada por el sistema con un ω_0 dado.

Debe señalarse que el hecho de que el sistema se encuentre en el HCS no implica por sí mismo que la temperatura en las variables escaladas tome este valor estacionario. Esto sólo sucede en el límite de tiempos largos. Sin embargo, lo que es relevante es que existe una correspondencia entre el estado estacionario en la representación escalada y el HCS asociado, para un valor arbitrario del parámetro ω_0 . Por supuesto, para un estado cualquiera del sistema, es posible relacionar cada propiedad en las variables originales con la correspondiente propiedad en la representación escalada. Los resultados cualitativos muestran que esta representación estacionaria del HCS es también válida para sistemas con densidades más altas [62]. Aunque matemáticamente equivalente, esta representación estacionaria es conveniente para las simulaciones numéricas del HCS, ya que elimina los problemas asociados con el rápido decaimiento de la energía cinética, como veremos en el próximo capítulo.

Capítulo 3

Fluctuaciones de energía cerca del punto crítico

En el Capítulo 1 vimos que los gases granulares tienen un comportamiento cualitativamente distinto al de los gases moleculares [1], diferencias que han sido ilustradas extensamente utilizando métodos teóricos, experimentales y de simulación [63]. Pero podemos, por otro lado, encontrar sorprendentes analogías entre los sistemas granulares y los moleculares. En concreto, en este capítulo mostraremos que el comportamiento estadístico de un sistema granular que evoluciona libremente cerca de la inestabilidad transversal posee fuertes similitudes con múltiples sistemas moleculares, incluyendo sistemas de equilibrio en la región crítica.

A fin de investigar el comportamiento de un gas granular en las proximidades de la inestabilidad transversal, se presentarán resultados de simulaciones de Dinámica Molecular para un gas granular de discos duros en el HCS. En concreto, se estudiará el comportamiento de ciertas magnitudes a medida que el tamaño del sistema se aproxima al crítico, considerando tanto sistemas diluidos como sistemas de mayor densidad. En el caso diluido podemos emplear las predicciones teóricas que tenemos para el HCS. En particular, el tamaño crítico viene dado por la expresión (2.65). Para los sistemas más densos, la predicción teórica anterior no es válida y tampoco se obtiene una predicción suficientemente precisa utilizando los resultados obtenidos a partir de la ecuación de Enskog. Por ello, tendremos que determinar el tamaño crítico a partir de la propia simulación.

3.1. Simulaciones de Dinámica Molecular en el HCS

Ya hemos indicado que, como suele hacerse normalmente, el gas granular se modelará en este trabajo como un sistema de partículas duras que se mueven libremente entre colisiones. Para simularlo empleamos el método de Dinámica Molecular conducido por sucesos, construido según el algoritmo de Allen-Tildesley [64], que se detalla en el Apéndice ???. El método de simulación de Dinámica Molecular particularizado para el caso de sistemas de partículas duras se reduce simplemente a identificar cuál es la próxima colisión que va a tener lugar en el sistema, mover las partículas el tiempo necesario para que se produzca esta colisión y modificar las velocidades de las partículas que colisionan. Partiendo de esta nueva configuración se vuelve a iniciar el proceso.

A la hora de realizar simulaciones numéricas de un sistema en el HCS nos encontramos con una dificultad asociada al carácter inelástico de las colisiones. Como el sistema se está enfriando continuamente, las velocidades de las partículas son cada vez menores, y llega un momento en que son de un orden de magnitud tal que se producen errores significativos de redondeo debido a la precisión del ordenador empleado. Para solucionar este problema se han intentado varios procedimientos. Uno de ellos se basa en emplear el hecho de que no existe ninguna escala temporal intrínseca en un sistema de partículas duras, y reescalar las velocidades de todas las partículas después de cada colisión, de modo que así la energía se fuerza a permanecer constante [65]. Aunque este método parece claro que debe conducir a resultados correctos en el caso de propiedades que, en el HCS, son independientes del tiempo, no es evidente cómo extraer de los datos de simulación propiedades de la dinámica real del sistema que involucren correlaciones de magnitudes en dos instantes de tiempo.

Este problema puede solucionarse empleando la representación del HCS descrita en la sección 2.3.4, que transforma a dicho estado en un estado estacionario. Para ello, en lugar de simular un sistema de partículas que entre colisiones se mueven libremente, se considera un sistema en el que las partículas, entre colisiones, se aceleran según la ecuación (2.80). Es necesario, por tanto, modificar el algoritmo para reflejar esta aceleración entre colisiones. Con este método, las trayectorias pueden seguirse un tiempo arbitrario, ya que se eliminan los problemas de precisión numérica provocados por el enfri-

amiento del sistema.

Hemos realizado simulaciones de Dinámica Molecular de un sistema de N discos duros ($d = 2$) que evolucionan libremente, encerrados en una caja cuadrada de lado L con condiciones de contorno periódicas. Las unidades de simulación empleadas han sido $\sigma = 1$, $m = 1$ y $T(0) = 1$. Nuestro propósito es realizar medidas en el HCS. Es necesario, por tanto, conseguir, en primer lugar, que nuestro sistema esté inicialmente en el HCS y, en segundo lugar, controlar que no abandone dicho estado. Para ello, partimos de una distribución espacial homogénea, con una distribución aleatoria de velocidades con valores comprendidos entre -0.5 y 0.5 . Ajustamos las velocidades de las partículas para conseguir que la velocidad total del sistema sea nula y que la temperatura tenga valor 1. Dejamos, en primer lugar, evolucionar al sistema elásticamente ($\alpha = 1$), hasta que se alcanza una distribución de velocidades Maxwelliana. Una vez que el sistema ha alcanzado esa distribución característica del equilibrio, activamos la inelasticidad, es decir, asignamos al coeficiente α el valor deseado ($\alpha < 1$), y dejamos evolucionar al sistema. Tras un pequeño transitorio el sistema alcanza el HCS, siempre y cuando su tamaño sea menor que el crítico.

Los valores escogidos para los parámetros de la simulación estacionaria han sido $\omega_0 = n_H \zeta_0 / \sqrt{2}$ y $t_0 = 1/\omega_0$. Esta elección para ω_0 está motivada por el hecho de que la temperatura estacionaria dada por (2.88) puede expresarse como

$$\tilde{T}_{st} = 2 \frac{m}{\sigma^{2(d-1)}} \left(\frac{\omega_0}{\zeta_0 n_H} \right)^2. \quad (3.1)$$

De este modo, y si el ζ_0 que tomamos para calcular ω_0 es el correspondiente a la velocidad de enfriamiento real del sistema, la temperatura estacionaria alcanzada en la simulación será igual a la unidad (en las unidades utilizadas). Para sistemas diluidos en el HCS, el valor para ζ_0 en la primera aproximación de Sonine viene dado por (2.38), y éste será el empleado en todas las simulaciones, incluso en el caso de sistemas con densidad moderada, lo que provocará que, para estos sistemas, la temperatura estacionaria alcanzada difiera de la unidad.

Un punto fundamental será relacionar los resultados que obtengamos en estas simulaciones con las magnitudes correspondientes del sistema con la dinámica original, pero esto es sencillo ya que esta nueva dinámica proviene simplemente de realizar un cambio de variable en la escala temporal.

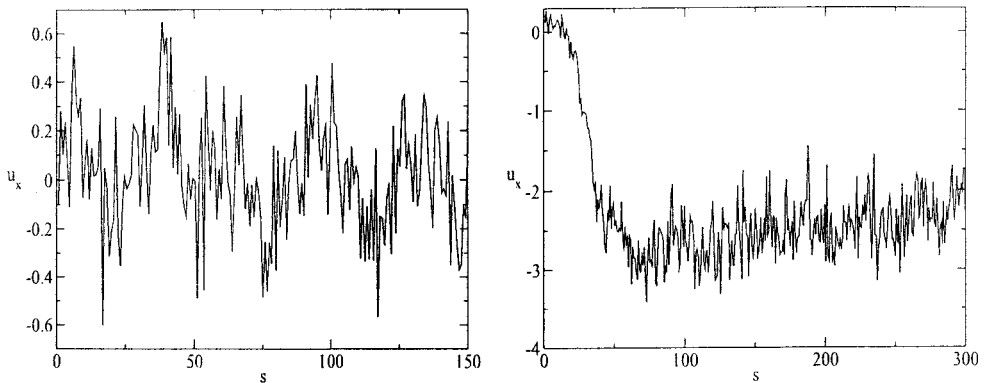


Figura 3.1: Evolución de la velocidad local como función del tiempo escalado s en un sistema de discos duros con $\alpha = 0.95$ y $n_H = 0.2\sigma^{-2}$. La figura de la izquierda corresponde a un sistema con tamaño inferior al crítico ($L/L_c \simeq 0.829$), y la de la derecha a uno con tamaño superior ($L/L_c \simeq 1.354$).

3.1.1. Criterios para saber que se sigue en el HCS

Como ya hemos comentado, el HCS no es estable para cualquier tamaño del sistema. Al ser el objetivo de este trabajo el estudio del comportamiento de ciertas propiedades en el HCS a medida que nos acercamos a la inestabilidad, será fundamental controlar de forma precisa en nuestras simulaciones que el sistema permanece durante toda la evolución en dicho estado. A continuación discutiremos los criterios que hemos utilizado en el presente trabajo para asegurarnos de que esto es así.

Por un lado, debido al tipo de simulación empleado, la simulación estacionaria, si nuestro sistema permanece en el HCS durante toda su evolución la temperatura alcanzará un valor estacionario en el límite de tiempos largos. No obstante, el que la temperatura alcance y se mantenga estacionaria no garantiza que el sistema esté en el HCS. Por ello, a fin de controlar a nivel más fundamental la posible aparición de vórtices de velocidad y/o agregados de partículas, hemos dividido nuestro sistema en celdas, de modo que podamos controlar la evolución tanto de la velocidad media como de la densidad en cada una de ellas. El tamaño de la celda se ha escogido lo suficientemente pequeño para que puedan observarse las fluctuaciones locales y lo suficientemente grande para que el número de partículas en ella nos permita promediar

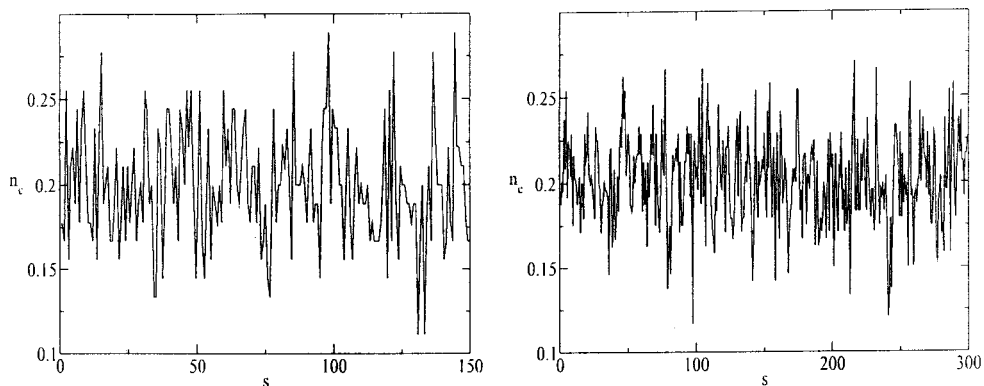


Figura 3.2: Evolución de la densidad de una celda para los sistemas de la figura 3.1.

adecuadamente. La formación de vórtices de velocidad llevaría a un aumento del valor de las componentes de la velocidad en la celda, que no oscilaría en torno a cero. Si se produjese la formación de un agregado de partículas veríamos como el valor de la densidad en la celda sería distinto del valor de la densidad del sistema homogéneo.

Para observar la diferencia en el comportamiento de la velocidad media y de la densidad en una celda tanto por encima como por debajo del tamaño crítico hemos realizado simulaciones en ambos rangos. En la figura 3.1 mostramos, tanto para un sistema en la región estable ($L < L_c$) como para uno en la inestable ($L > L_c$), la evolución de la componente x de la velocidad media en la celda, u_x , en función de la variable s , definida en (2.31), y que es proporcional al número de colisiones por partícula. Puede verse como, en el caso estable, u_x fluctúa alrededor del valor medio cero, mientras que, por el contrario, para el caso inestable y tras un transitorio, u_x comienza a fluctuar en torno a un valor distinto de cero, como consecuencia de la formación de vórtices de velocidad. Nótese la diferencia de escala entre ambas figuras. En lo referente al comportamiento de la densidad, en la figura 3.2 observamos que la densidad de la celda fluctúa alrededor del valor medio correspondiente, $n_H = 0.2\sigma^{-2}$, para los mismos dos valores de L que en la figura 3.1. Esto es así porque no se ha producido, en ningún caso, la formación de agregados de partículas.

3.2. Comportamiento de la velocidad de enfriamiento y del segundo momento de las fluctuaciones de la energía

En general, en las proximidades de un punto crítico, es de esperar que existan fluctuaciones cuya longitud de correlación es del orden del tamaño del sistema. Consecuentemente, a medida que nos aproximamos a la inestabilidad transversal, ciertas propiedades del sistema deben manifestar un comportamiento crítico peculiar. Nuestro estudio se centrará en el análisis de la energía total, único campo hidrodinámico global del sistema que puede fluctuar. Las condiciones periódicas de contorno utilizadas implican la conservación del número de partículas y la cantidad de movimiento. Sin embargo, el carácter local de la disipación de la energía en las colisiones, hace que la energía total no sólo disminuya monótonamente en el tiempo sino que lo haga fluctuando. Para investigar en detalle el efecto de las correlaciones críticas sobre el comportamiento de la energía del sistema, analizaremos el comportamiento de la velocidad de enfriamiento del sistema y del segundo momento de las fluctuaciones de la energía total.

En este punto conviene insistir en que el estudio se ha realizado tanto para sistemas diluidos como para otros con densidad moderadamente alta. Sin embargo, el tratamiento de los datos obtenidos será diferente en ambos casos, ya que mientras la teoría para gases granulares diluidos se conoce ampliamente, el conocimiento para sistemas con mayor densidad es más limitado. En concreto, la predicción teórica para la velocidad de enfriamiento y del segundo momento de las fluctuaciones de la energía en la región estable han sido presentadas en el capítulo anterior para sistemas diluidos, pero no existe un estudio análogo, es decir, con la misma fiabilidad, para densidad finita.

3.2.1. Sistemas diluidos

Como hemos comentado, hemos simulado un sistema de N discos duros ($d = 2$), empleando la representación estacionaria del HCS. Los resultados obtenidos se relacionan de manera directa con las magnitudes en el HCS. La densidad en todas las simulaciones que van a mostrarse en esta sección es $n_H = 0.02\sigma^{-2}$. A densidad fija, modificar el tamaño del sistema implica modificar el número de partículas N . El valor de la densidad considerado se

3.2. Velocidad de enfriamiento y segundo momento de las fluctuaciones

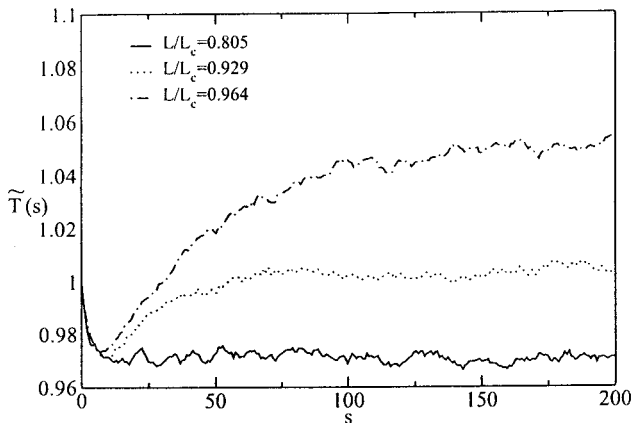


Figura 3.3: Evolución de la temperatura de un sistema con $n_H = 0.02$ y $\alpha = 0.80$, para diferentes valores de L .

ha encontrado que es suficientemente bajo como para garantizar que el comportamiento medio del sistema está descrito adecuadamente por la ecuación de Boltzmann, incluso en la región inestable del gas granular [35]. Se han considerado dos valores diferentes del coeficiente de restitución, $\alpha = 0.80$ y $\alpha = 0.90$, para los cuales el tamaño crítico predicho por la ecuación (2.65) es $L_c \simeq 304.3\sigma$ y $L_c \simeq 412.9\sigma$, respectivamente. Hemos estudiado el comportamiento de ciertas propiedades del sistema cuando vamos incrementando el valor de L para α y n_H constantes, aproximándonos al valor crítico. En todas las simulaciones, como ya hemos comentado en la sección anterior, hemos controlado que el sistema permanece en el HCS.

En la figura 3.3 hemos representado la temperatura en función de la variable s , proporcional al número de colisiones por partícula, para $\alpha = 0.80$ y diferentes valores del tamaño del sistema. Los resultados presentados corresponden a promediar sobre 200 trayectorias. Se observa que en todos los casos la temperatura del sistema alcanza un valor estacionario muy próximo a 1, que va aumentando a medida que lo hace el tamaño del sistema, L . También aumenta con el tamaño del sistema el tiempo necesario para alcanzar este valor estacionario. La temperatura estacionaria no es la magnitud más adecuada para caracterizar el estado del sistema, ya que su valor depende del valor de ω_0 escogido. Es más conveniente trabajar con la velocidad de

enfriamiento adimensionalizada, ζ_0 , que es una magnitud propia, intrínseca del sistema, no dependiente de ningún parámetro de la simulación estacionaria. Hemos calculado, por tanto, la velocidad de enfriamiento reducida, ζ_0 , como función de la longitud lineal del sistema, manteniendo α constante. La velocidad de enfriamiento está relacionada con la temperatura estacionaria a través de (3.1) de forma que puede ser obtenida a partir de ésta. De la figura 3.3, se desprende claramente que ζ_0 depende de L , puesto que \tilde{T}_{st} depende de L y el ω_0 es el mismo en todas las simulaciones correspondientes a la misma densidad y al mismo valor coeficiente de restitución.

Dado que las leyes de potencia son habituales en las proximidades de un punto crítico, trataremos de determinar si el comportamiento de ζ_0 viene dado por una ley de potencias de la distancia a la inestabilidad $\delta\tilde{L} \equiv (L_c - L)/L_c$, para tamaños próximos a L_c , para valores de n_H y α constantes. Para ello, en las figuras 3.4 y 3.5 hemos representado el comportamiento de ζ_0 como función de $\delta\tilde{L}$ para los dos valores de α estudiados. Los símbolos son los resultados de las simulaciones de Dinámica Molecular, habiéndose determinado las barras de error a partir de las desviaciones del valor instantáneo respecto del valor estacionario medio. Las simulaciones muestran que ζ_0 decrece monótonamente a medida que L se aproxima a su valor crítico. El decaimiento es imperceptible en las figuras 3.4 y 3.5 cuando se representa $\ln \zeta_0^{-2}$ como función de $\ln \delta\tilde{L}$, para ambos valores de α , ya que la variación de ζ_0 es muy suave incluso en las proximidades de la inestabilidad. Para hacer explícita la dependencia respecto de L , hemos representado $\ln[\zeta_0^{-2}(L) - \zeta_0^{-2}(0)]$, donde $\zeta_0(0)$ es el valor asintótico de la velocidad de enfriamiento escalada, bien lejos del punto de transición, y obtenido también a partir de las simulaciones. Los resultados representados en las figuras muestran que la velocidad de enfriamiento, en las proximidades de la inestabilidad, verifica una ley del tipo

$$\zeta_0^{-2}(L) \sim \zeta_0^{-2}(0) + A_\zeta \delta\tilde{L}^{-1}, \quad (3.2)$$

siendo $A_\zeta \simeq 0.017$, para $\alpha = 0.80$, y $A_\zeta \simeq 0.019$ para $\alpha = 0.90$. En las figuras 3.4 y 3.5 la ley (3.2) viene representada por la línea continua. Si este comportamiento se mantuviese hasta el punto de inestabilidad, esto implicaría que la velocidad de enfriamiento tendería a cero como $(\delta\tilde{L}/A_\zeta)^{1/2}$. Cabe notar, sin embargo, que las correcciones a $\zeta_0(0)$ en todo el rango de L considerados, aunque verificando la ley (3.2), siguen siendo aún muy pequeñas.

3.2. Velocidad de enfriamiento y segundo momento de las fluctuaciones

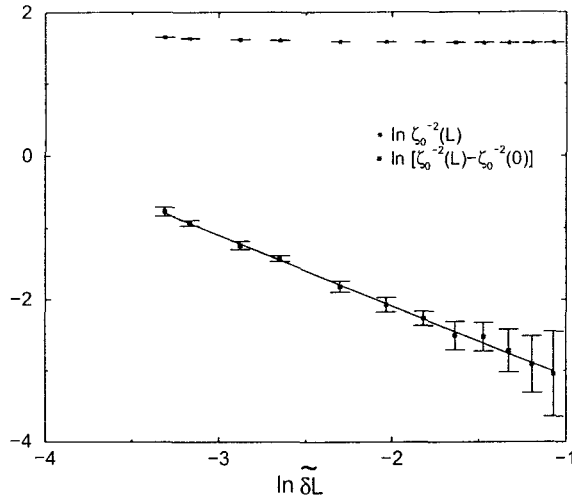


Figura 3.4: Velocidad de enfriamiento adimensional ζ_0 como función de la distancia a la inestabilidad $\delta\tilde{L}$ para un sistema de discos duros inelásticos con $\alpha = 0.80$ y $n_H = 0.02\sigma^{-2}$. Los símbolos corresponden a los resultados de simulación y la línea continua es el ajuste a la ley de potencia descrita en el texto.

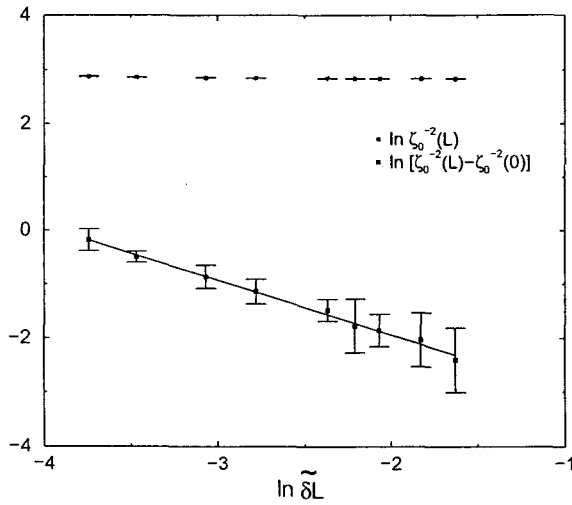


Figura 3.5: Análogo a la figura 3.4 pero para un sistema con $\alpha = 0.90$ y $n_H = 0.02\sigma^{-2}$.

Hemos estudiado también el segundo momento de las fluctuaciones de la energía total E , definido como

$$\sigma_E^2 \equiv \frac{\langle\langle E^2(t) \rangle\rangle}{\langle E(t) \rangle^2} = \frac{\langle E^2(t) \rangle - \langle E(t) \rangle^2}{\langle E(t) \rangle^2}, \quad (3.3)$$

donde $\langle \dots \rangle$ denota promedio sobre el colectivo generado por un número de trayectorias [37]. Esta cantidad no depende del tiempo en el HCS, debido a la propiedad de escala de la función de distribución.

Es importante ver cómo se relaciona esta magnitud con lo medido en la simulación estacionaria. La relación que existe entre la energía total del sistema en una y otra representación viene dada por

$$\begin{aligned} E(t) &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m V_i(t)^2 \\ &= \frac{1}{(\omega_0 t_0)^2} e^{-2\omega_0 \tau} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m W_i(\tau)^2 = \frac{1}{(\omega_0 t_0)^2} e^{-2\omega_0 \tau} E_{est}(\tau), \end{aligned} \quad (3.4)$$

siendo E_{est} la energía total del sistema en la simulación estacionaria. Según la expresión anterior, la medida de σ_E^2 en la simulación estacionaria lleva al mismo resultado que si se midiese en el HCS.

En la figura 3.6 se representa $N\sigma_E^2$ en función de la variable s para un sistema con $\alpha = 0.80$. Al igual que ocurría con la temperatura, el tiempo necesario para llegar a un valor estacionario es mayor para los sistemas con L más próximo a L_c . Los resultados para los valores estacionarios de $N\sigma_E^2$ como función de $\widetilde{\delta L}$ para un sistema con $\alpha = 0.80$ se representan en la figura 3.7. Los símbolos corresponden a los resultados de Dinámica Molecular y las barras de error se han determinado, al igual que en el caso de ζ_0 , a partir de las desviaciones del valor instantáneo respecto del valor estacionario medio. En la figura se ve que $N\sigma_E^2(L)$ es prácticamente constante e independiente de L para $L \ll L_c$, lo cual indica que $\sigma_E \propto N^{-1/2}$, como era de esperar. De hecho, el valor en esta región, que denotamos por $N\sigma_E^2(0)$, es predicho de manera adecuada por los resultados obtenidos en [37] usando los métodos de la Teoría Cinética. Aunque es una función de α que crece a medida que α decrece, su valor permanece pequeño, al menos para sistemas no demasiado inelásticos. Por otro lado, cuando L se aproxima a su valor crítico, las fluctuaciones de energía crecen muy rápidamente. Esto se ve claramente estudiando la cantidad $N[\sigma_E^2(L) - \sigma_E^2(0)]$, que también se representa en la figura 3.7.

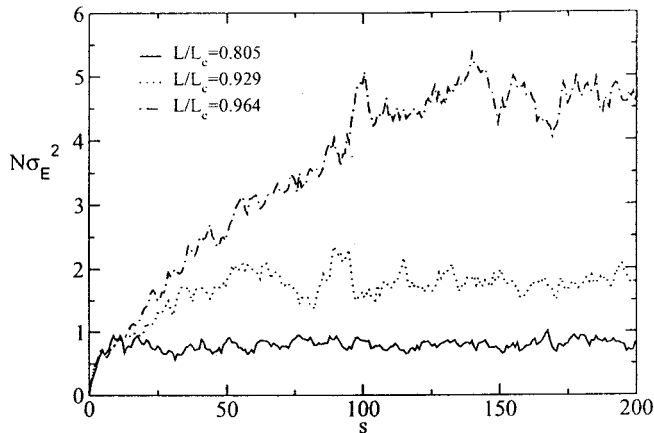


Figura 3.6: Evolución de $N\sigma_E^2$ como función del tiempo escalado s para un sistema con $n_H = 0.02$ y $\alpha = 0.80$, y diferentes valores de L/L_c .

Como valor para $\sigma_E^2(0)$ hemos empleado la predicción teórica para sistemas diluidos obtenidos utilizando (2.70). Se observa que, suficientemente cerca de la inestabilidad, el segundo momento de las fluctuaciones de la energía total está descrito de forma adecuada por la ley crítica

$$\sigma_E(L) \sim A_E(\widetilde{\delta L})^{-1}, \quad (3.5)$$

donde $A_E \simeq 1.5 \times 10^{-3}$ es su amplitud crítica, para $\alpha = 0.80$.

Al escribir la ecuación anterior, hemos usado el hecho de que cerca de la inestabilidad podemos aproximar $N \sim N_c = n_H L_c^2$. El mismo comportamiento se observa para $\alpha = 0.90$ como podemos observar en la figura 3.8 pero con una amplitud $A_E \simeq 6 \times 10^{-4}$. Por tanto, los resultados de simulación indican un comportamiento crítico de las fluctuaciones, con un exponente crítico de valor -1 y una amplitud que depende del valor del coeficiente de restitución α . Por supuesto, la validez de lo anterior se basa en la suposición de que el comportamiento anterior sigue siendo el mismo hasta que el sistema está asintóticamente cerca de la inestabilidad. Sin embargo, debe señalarse que suficientemente cerca de L_c el comportamiento divergente anterior es de esperar que tienda a desaparecer debido a efectos no lineales, ya que esta magnitud no puede tomar, en ningún caso, valores arbitrariamente grandes.

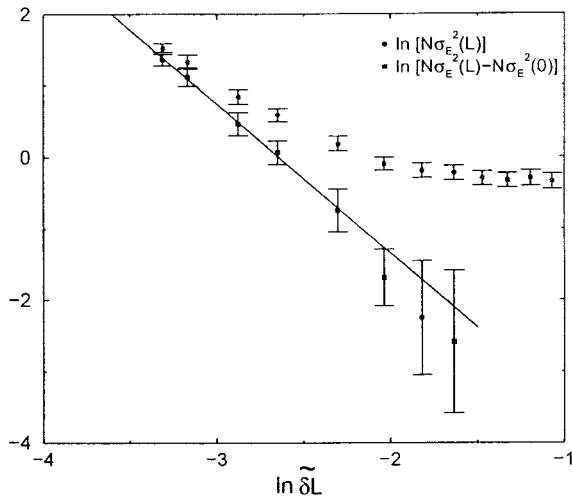


Figura 3.7: Segundo momento de las fluctuaciones de energía $N\sigma_E^2$ como función de la distancia $\widetilde{\delta L}$ a la inestabilidad para $\alpha = 0.80$ y $n_H = 0.02\sigma^{-2}$. La línea continua es el ajuste a la ley de potencias definida en el texto.

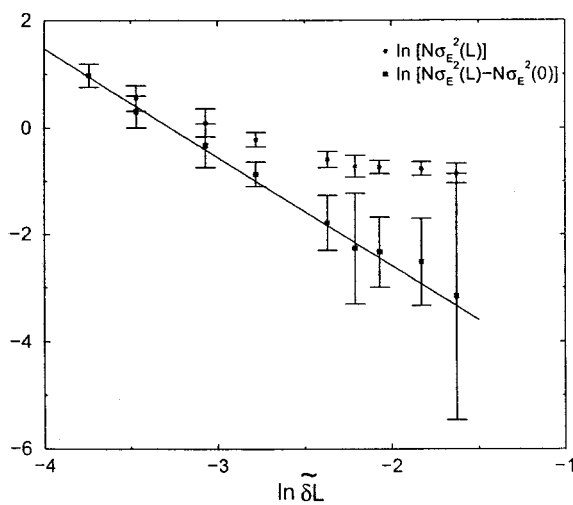


Figura 3.8: Análogo a la figura 3.7 para un sistema con $\alpha = 0.90$ y $n_H = 0.02\sigma^{-2}$.

De hecho, las simulaciones realizadas indican que este podría ser el caso, ya que suficientemente cerca de la inestabilidad las fluctuaciones comienzan a no crecer según (3.5), sino de forma más lenta.

3.2.2. Densidades moderadas

Una dificultad fundamental que encontramos para el estudio de sistemas con densidad finita es la ausencia de una teoría que nos permita predecir el valor del tamaño crítico del sistema, L_c , con la suficiente precisión. En consecuencia, éste ha sido determinado a partir de las propias simulaciones, ya que los valores del tamaño crítico obtenidos por la teoría de Enskog [56] se desvían significativamente de los observados en las simulaciones. En nuestro estudio, hemos considerado dos valores diferentes de la densidad, $n_H = 0.1\sigma^{-2}$ y $n_H = 0.2\sigma^{-2}$, y para cada uno de ellos dos valores del coeficiente de restitución, $\alpha = 0.95$ y $\alpha = 0.98$.

En la figura 3.9 se representa el valor de $N\sigma_E^2$ para distintos valores del tamaño del sistema para $n_H = 0.1\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.95$. Al igual que en el caso de baja densidad, observamos que el valor estacionario de σ_E^2 crece a medida que lo hace el tamaño del sistema. Los resultados presentados corresponden a promediar sobre 100 trayectorias.

En la sección anterior hemos visto que, en las proximidades de la inestabilidad, $N[\sigma_E^2(L) - \sigma_E^2(0)]$ es proporcional a $\widetilde{\delta L}^{-2}$. Supongamos este mismo comportamiento en el caso de alta densidad y, a partir de esta hipótesis, determinemos L_c . La consistencia de los resultados nos indicará si la suposición anterior es acertada. Para ello, utilizaremos que, si representamos $[N\sigma_E^2(L) - N\sigma_E^2(0)]^{-1/2}$ frente a L y hacemos un ajuste lineal, la ordenada en el origen y la pendiente de la recta de ajuste nos permitirán obtener los valores de L_c y A_E . El problema es que, para ello, necesitamos conocer el valor de $\sigma_E^2(0)$, y no hay tampoco una predicción teórica precisa para esta cantidad en el caso de densidades moderadas. Utilizaremos, por tanto, la simulación para determinar también $\sigma_E^2(0)$. Los resultados de la simulación muestran que, para valores de L lejos del tamaño crítico, las fluctuaciones de energía oscilan en torno a un valor prácticamente constante, independiente de L , como puede verse en la figura 3.10, en la que hemos representado $N\sigma_E^2$ como función del tamaño del sistema L . Tomaremos entonces como valor de $N\sigma_E^2(0)$ el valor constante que se alcanza para $L \ll L_c$ y que presentamos en la Tabla 3.1. En el caso diluido, la predicción teórica dada por (2.70) es

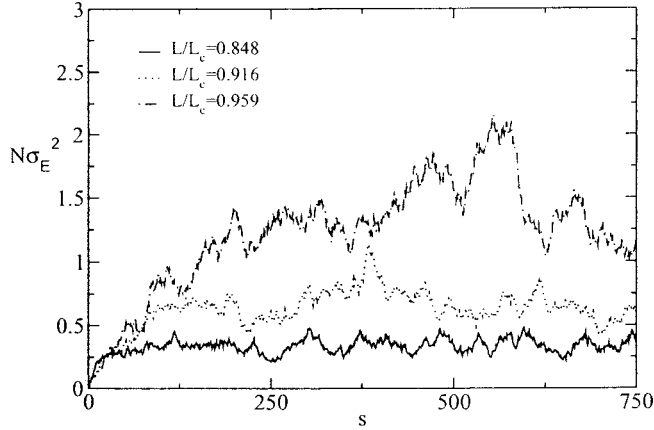


Figura 3.9: Evolución de $N\sigma_E^2$ para un sistema con $n_H = 0.1\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.95$ y distintos valores de L/L_c .

$N\sigma_E^2(0) = 0.2064$ para $\alpha = 0.95$ y $N\sigma_E^2(0) = 0.0854$ para $\alpha = 0.98$. Si comparamos estos valores con los obtenidos en las simulaciones para los sistemas con mayor densidad encontramos que el valor de esta magnitud depende de la densidad, aumentando con ésta.

En la Tabla 3.1 damos también los resultados obtenidos para los tamaños críticos. Para $n_H = 0.2\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.95$ el valor obtenido coincide con el de baja densidad, $L_c^B \simeq 57.2\sigma$, y no con el de la teoría de Enskog [56], $L_c^E \simeq 54.0\sigma$. Para esta misma densidad y $\alpha = 0.98$, el valor de L_c que nos da la simulación está entre el valor $L_c^B \simeq 89.3\sigma$ y $L_c^E \simeq 84.8\sigma$, al igual que sucede para el caso de $n_H = 0.1\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.95$ en el que $L_c^B \simeq 114.4\sigma$ y $L_c^E \simeq 109.9\sigma$.

Las mayores discrepancias las encontramos en el caso de $n_H = 0.1\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.98$ en las que el valor crítico obtenido está por debajo tanto del valor de baja densidad ($L_c^B \simeq 178.7\sigma$) como del de Enskog ($L_c^E \simeq 172.3\sigma$). Si este mismo tipo de análisis para la determinación del tamaño crítico se realiza para el caso de los sistemas diluidos de la sección anterior, se obtiene un resultado para L_c en total acuerdo al dado por (2.65).

En la Tabla 3.1 damos también los valores obtenidos para la amplitud A_E . Podemos concluir, en vista de estos resultados, que la amplitud de las fluctuaciones de la energía aumentan conforme lo hace la inelasticidad a n_H

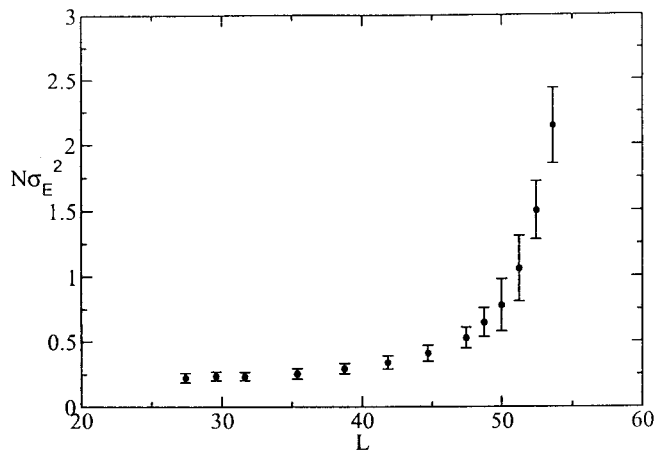


Figura 3.10: Comportamiento de $N\sigma_E^2$ para un sistema de discos duros con $n_H = 0.2$ y $\alpha = 0.95$ como función del tamaño del sistema. Se observa como, para valores de L mucho menores que el crítico, los valores tienden a un valor constante.

constante y aumentan con la densidad, para un α dado.

Una vez que tenemos el valor de L_c para cada valor de los parámetros es inmediato obtener las amplitudes A_ζ que rigen el decaimiento de la velocidad de enfriamiento. En la figura 3.11 se muestran las evoluciones de las temperaturas en la representación en que el HCS lleva a un estado estacionario para un sistema con $n_H = 0.2\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.95$, para distintos valores de L/L_c . La temperatura que se alcanza, incluso para tamaños alejados de L_c , difiere de la unidad, ya que el valor de ζ_0 que se ha considerado para calcular ω_0 es el dado por (2.38), válido en el límite diluido y no en el caso de sistemas densos. La dependencia con n_H y α de A_ζ es análoga a la de A_E . Así pues, estos efectos aumentan con la inelasticidad y con la densidad del sistema considerado. En la Tabla 3.1 se recogen los valores para las velocidades de enfriamiento adimensionalizadas lejos de la inestabilidad, $\zeta_0(0)$, obtenidas también de la simulación así como las amplitudes A_ζ . Los valores de $\zeta_0(0)$ obtenidos coinciden con los dados por la teoría de Enskog hasta la segunda cifra significativa.

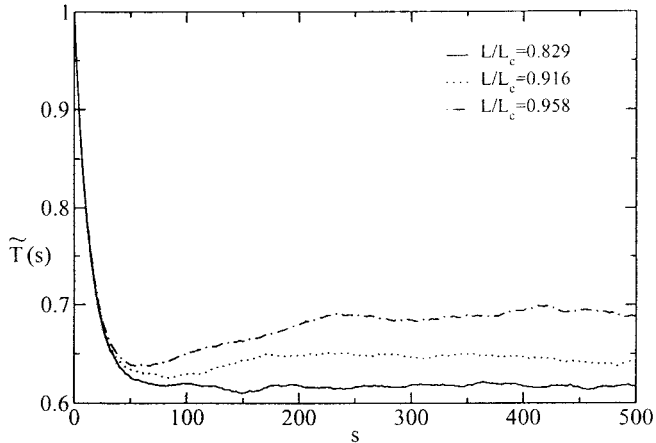


Figura 3.11: Evolución de la temperatura del sistema para $n_H = 0.2\sigma^{-2}$, $\alpha = 0.95$ y diferentes valores de L . A medida que L se aproxima a L_c , es mayor el tiempo necesario para llegar al estacionario.

$n_H\sigma^2$	α	$N\sigma_E^2(0)$	L_c	$A_E \times 10^3$	$\zeta_0(0)$	$A_\zeta \times 10^3$
0.2	0.95	0.2349	57.2	3.6	0.1584	4.59
0.2	0.98	0.0976	87.2	1.34	0.06459	2.34
0.1	0.95	0.2250	111.8	1.45	0.1375	2.38
0.1	0.98	0.0921	168.5	0.47	0.05610	0.50

Tabla 3.1: Valores de los tamaños críticos L_c en unidades de σ , determinados a partir de las simulaciones, así como de $N\sigma_E^2(0)$, $\zeta_0(0)$ y de las amplitudes A_E y A_ζ que rigen el comportamiento de σ_E y ζ_0 respectivamente.

3.3. Función de correlación temporal de la energía

Estudiamos ahora cómo decae en el tiempo una fluctuación de la energía total a través de su función de correlación temporal, definida como

$$C_{EE}(t, t') = \frac{\langle \delta E(t) \delta E(t') \rangle}{\langle E(t) \rangle \langle E(t') \rangle}, \quad (3.6)$$

donde $\delta E(t)$ fue definido en la ecuación (2.68). En el apartado 2.3.3 vimos que, lejos de la inestabilidad y para sistemas diluidos, las fluctuaciones de energía decaían exponencialmente, en la escala s , con la velocidad de enfriamiento adimensionalizada, ζ_0 , es decir $C_{EE}(t, t') \propto e^{-\frac{\zeta_0}{2}[s(t)-s(t')]}$, no existiendo hasta la fecha predicción teórica para sistemas con densidad finita. Veamos cuál es el comportamiento que presenta $C_{EE}(t, t')$ en las proximidades de la inestabilidad transversal.

En nuestra simulación, hemos medido $C_{EE}(t, t')$ para los mismos valores de la densidad y del coeficiente de restitución considerados para el resto de las magnitudes analizadas en los apartados anteriores. Evidentemente, es necesario tener clara la relación entre lo que se mide en la simulación estacionaria y las magnitudes correspondientes en el HCS. En este caso, y al igual que sucedía para σ_E^2 , la magnitud $C_{EE}(t, t')$ posee el mismo valor en ambas descripciones como consecuencia de (3.4).

En la figura 3.12 se representan los valores obtenidos para C_{EE} en la escala s para un sistema con $n_H = 0.2\sigma^{-2}$, $\alpha = 0.95$, y distintos valores de L/L_c . Se observa cómo estas correlaciones decaen más lentamente a medida que L se aproxima a L_c . Si representamos C_{EE} en escala logarítmica (figura 3.12 derecha) podemos ver que presenta un decaimiento exponencial, al igual que sucedía lejos de la inestabilidad para sistemas diluidos, pero más lento para los sistemas con mayor tamaño. Esto es debido a que cerca de la inestabilidad existen mayores correlaciones y una fluctuación de la energía tarda más en decaer. Como se puede ver en la figura 3.12, el comportamiento exponencial comienza para $s - s' \sim 10$, continuando hasta $s - s' \sim 60$. En esta región es donde hemos realizado el ajuste para ver el decaimiento. Esto es así en el caso de los sistemas con mayor densidad, mientras que en los sistemas diluidos el buen ajuste a la exponencial se observa prácticamente desde los primeros instantes.

Se tiene, por tanto, que las correlaciones temporales de la energía obede-

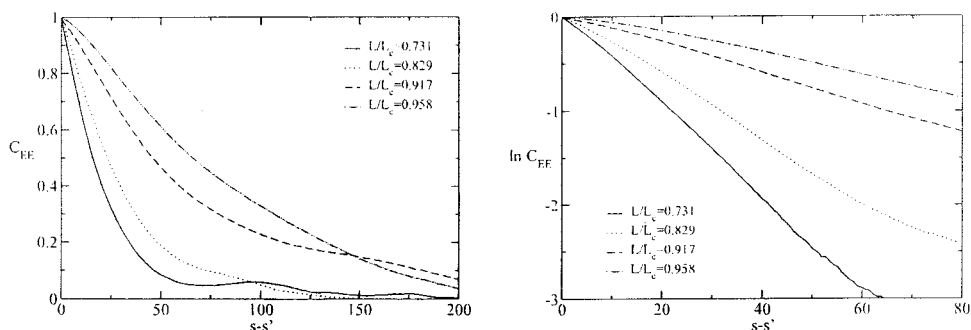


Figura 3.12: Decaimiento de la función de correlación de las fluctuaciones de la energía para un sistema con $n_H = 0.2\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.95$. Se observa que a mayor tamaño del sistema, el decaimiento se produce más lentamente. En la figura de la derecha mostramos estos mismos resultados en escala logarítmica.

con la ley

$$C_{EE}(t, t') \propto e^{-\frac{s[t]-s[t']}{s_c}}. \quad (3.7)$$

donde s_c , cerca de la inestabilidad, depende de L .

En la figura 3.13 hemos representado los valores para s_c^{-1} en función de la distancia escalada a la inestabilidad, $\delta\tilde{L}$. Se observa que para valores alejados de L_c , las fluctuaciones decaen con un tiempo característico independiente de L . En el caso diluido, este valor está en buen acuerdo con la predicción teórica dada por (2.74) para el caso de sistemas alejados de la inestabilidad, esto es, con $\zeta_0/2$. En el caso de alta densidad, el valor que se alcanza para $L \ll L_c$ no coincide, evidentemente, con el valor teórico de $\zeta_0/2$ en la primera aproximación de Sonine, ya que éste sólo es válido para sistemas diluidos, pero se observa que también el comportamiento lejos de L_c es independiente de L .

En las proximidades de la inestabilidad se observa un comportamiento lineal con $\delta\tilde{L}$ de s_c^{-1} . Así, para L próximo L_c , tenemos que

$$s_c^{-1} \sim A_s \delta\tilde{L}. \quad (3.8)$$

Los valores de A_s obtenidos se recogen en la Tabla 3.2. Como puede verse, este coeficiente aumenta con la inelasticidad, para n_H fijo, no siendo clara su dependencia con n_H para α fijo.

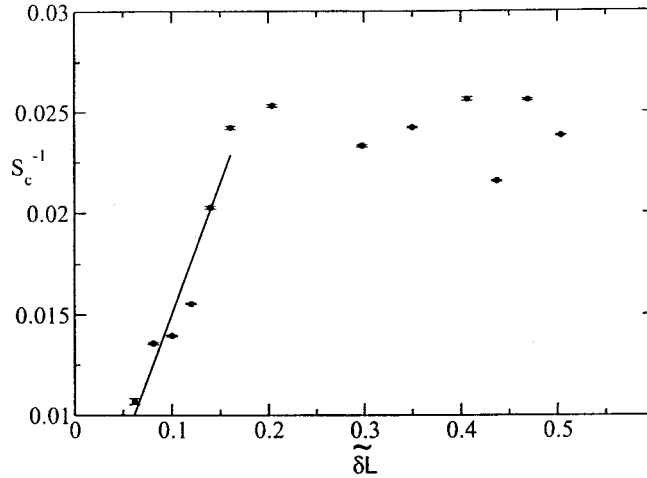


Figura 3.13: Tiempos característicos que rigen el decaimiento de las fluctuaciones de energía para $n_H = 0.1$ y $\alpha = 0.98$. Para tamaños del sistema alejados del crítico, el decaimiento se produce según un valor constante, y cerca de L_c se observa un comportamiento lineal con $\widetilde{\delta L}$, representado por la línea continua.

$n_H \sigma^2$	α	A_s
0.2	0.95	0.253
0.2	0.98	0.079
0.1	0.95	0.206
0.1	0.98	0.13
0.02	0.80	1.188
0.02	0.90	0.701

Tabla 3.2: Valores del coeficiente A_s que rige el decaimiento de las fluctuaciones de la energía para los distintos valores de los parámetros considerados en las simulaciones.

3.4. Distribución de las fluctuaciones de la energía

En esta sección estudiaremos la forma de la distribución de probabilidades de las fluctuaciones de la energía total, para distintos valores del tamaño del sistema. Definimos las fluctuaciones relativas de la energía como

$$\widetilde{\delta E} \equiv \frac{[E(t) - \langle E(t) \rangle]}{\langle E(t) \rangle}. \quad (3.9)$$

Para cada trayectoria de un sistema, el rango de valores de $\widetilde{\delta E}$ se ha dividido en intervalos que no se solapan y se ha construido la distribución de frecuencias usando todas las trayectorias correspondientes a los mismos valores de L y α .

Como ya hemos comentado en el capítulo anterior, la función densidad de probabilidad de una fluctuación de la energía ha sido estudiada para $L \ll L_c$ [37, 48], observándose un buen ajuste a una distribución gaussiana. Este comportamiento, sin embargo, no se mantiene a medida que L se aproxima a L_c . En la figura 3.14 representamos la distribución para un sistema con $n_H = 0.02\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.90$ para dos valores de L , uno bien alejado de L_c , observándose una distribución gaussiana, y otro con L próximo a L_c . En este último caso, la distribución es asimétrica en torno al valor medio. Como puede verse, se extiende hacia valores positivos de $\widetilde{\delta E}$. El mismo comportamiento cualitativo se observa para todo el rango de densidades que hemos estudiado.

3.4.1. Función de distribución escalada

Para analizar en más detalle la estructura de las fluctuaciones de energía, hacemos la suposición injustificada, a priori, de que la función de distribución de probabilidades de las fluctuaciones relativas de la energía, $P_L(\widetilde{\delta E})$, en las proximidades de la inestabilidad transversal, verifica la relación de escala

$$P_L(\widetilde{\delta E}) = \frac{1}{\sigma_E} \widetilde{f} \left(\frac{\widetilde{\delta E}}{\sigma_E} \right), \quad (3.10)$$

donde \widetilde{f} es una función de escala. Se asume por tanto que toda la dependencia de \widetilde{f} con α y L ocurre a través de σ_E . Si consideramos entonces

3.4. Distribución de las fluctuaciones de la energía

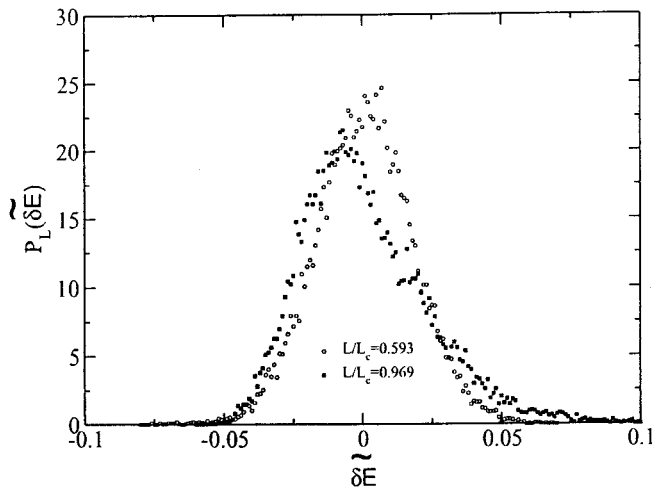


Figura 3.14: Distribución de probabilidades de las fluctuaciones relativas de la energía, $P_L(\delta E)$, para un sistema con $n_H = 0.02\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.90$ para dos valores de L , uno alejado de L_c , en el cual la distribución es gaussiana y otro más próximo a la inestabilidad. En este último caso se observa claramente la asimetría.

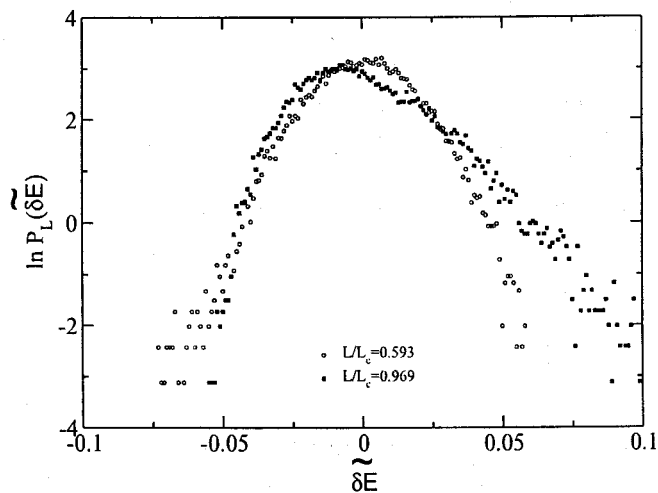


Figura 3.15: Distribuciones de la figura anterior representadas en escala logarítmica.

$$\sigma_E P_L(\widetilde{\delta E}) = \widetilde{f} \left(\frac{\widetilde{\delta E}}{\sigma_E} \right), \quad (3.11)$$

toda la dependencia en L se ha eliminado en la parte derecha de esta expresión cuando la consideramos como una función de $\widetilde{\delta E}/\sigma_E$. En la medida que la suposición anterior se verifique cerca de la inestabilidad, los datos para sistemas con diferentes tamaños tenderían a colapsar a medida que L se aproxima a L_c . Más aún, este colapso debe ocurrir en una función que no depende de α .

En la figura 3.16 se representan las distribuciones normalizadas según (3.11) para $\alpha = 0.80$ y $\alpha = 0.90$. En cada caso se presentan resultados para distintos tamaños del sistema. Por motivos que explicaremos más adelante, lo que realmente se representa en la figura es $\sigma_E P_L(-\widetilde{\delta E})$. Se observa que los datos colapsan, como implica la ley de escala (3.11), sobre más de 3 órdenes de magnitud, especialmente cuando nos centramos en los resultados para los dos sistemas de mayor tamaño. Las fluctuaciones son fuertemente no gaussianas y asimétricas alrededor del valor medio. Ésta es una manifestación de la presencia de una longitud de correlación del orden del tamaño del sistema, de modo que éste no puede ser dividido en regiones mesoscópicas estadísticamente independientes y, por tanto, no hay razón para esperar que las fluctuaciones de las cantidades globales sean gaussianas.

La forma de la función de distribución de probabilidades de la figura 3.16 es muy similar a la encontrada en otros sistemas de equilibrio y de no equilibrio [66, 67]. Por ejemplo, en el caso del modelo bidimensional XY, se encuentra que la forma de la función densidad de probabilidad de las fluctuaciones de la magnetización total, $y = (m - \langle m \rangle)/\sigma_m$, siendo m la magnetización y σ_m su varianza, en la aproximación armónica, para temperaturas significativamente inferiores que la de la transición de Kosterlitz-Thouless, puede aproximarse por la función $\Pi(y)$ [67] definida por

$$\Pi(y) = K(e^{x-e^x})^a, \quad x = b(y - s), \quad a = \pi/2. \quad (3.12)$$

La región de valores positivos grandes de y de esta función es aproximadamente gaussiana, mientras que para valores negativos grandes presenta una cola exponencial. Un gran número de sistemas fuera del equilibrio que muestran criticidad autoorganizada presentan datos que colapsan en una distribución de probabilidad muy similar a $\Pi(y)$ [66, 67]. El mismo tipo de comportamiento se ha observado también en experimentos con flujos

3.4. Distribución de las fluctuaciones de la energía

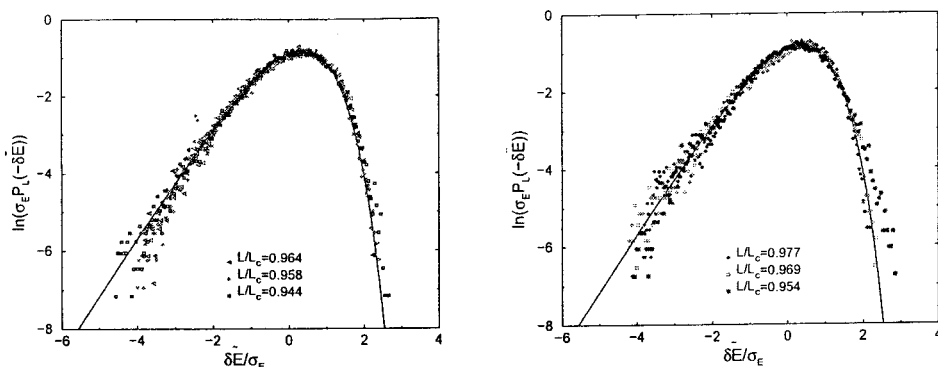


Figura 3.16: Función densidad de probabilidad de las fluctuaciones de la energía total relativa $\sigma_E P_L(-\delta E)$ para un sistema de discos duros inelásticos con $n_H = 0.02\sigma^{-2}$ para $\alpha = 0.80$ (izquierda) y $\alpha = 0.90$ (derecha). Los símbolos son de las simulaciones y la línea continua es la ecuación (3.12).

turbulentos confinados [68]. En nuestro contexto, en principio, debería ser $\Pi(y) = \sigma_E P_L(y)$ con $y = \delta E$, pero para obtener un buen acuerdo con los resultados de Dinámica Molecular, hemos cambiado δE por $-\delta E$ en la identificación de y . Los valores de los tres parámetros en la ecuación (3.12) se obtienen por normalización, valor medio nulo y varianza uno, con los resultados $K = 2.14$, $b = 0.938$, y $s = 0.374$. Por tanto la ecuación (3.12) no tiene ningún parámetro ajustable. La función $\Pi(y)$ se ha representado también en la figura 3.16 y se encuentra un sorprendente buen acuerdo con los datos experimentales.

El cambio en el signo de las fluctuaciones, esto es, el hecho de que las fluctuaciones de energía en un gas granular estén descritas por una función que es la simétrica con respecto al origen de la de los sistemas ordinarios, puede ser debido al carácter disipativo de los medios granulares. En el HCS el gas está continuamente disipando energía en las colisiones sin que haya ningún aporte externo de la misma. Por el contrario, en los sistemas moleculares se tiene que suministrar continuamente energía al sistema para conseguir mantenerlo en un estado estacionario de no equilibrio.

Como para el resto de propiedades estudiadas, los resultados que se obtienen para sistemas con densidad mayor también presentan un ajuste muy bueno a la misma función densidad de probabilidad, como puede observarse en la figura 3.17. Esto nos lleva a concluir que este escalamiento es una

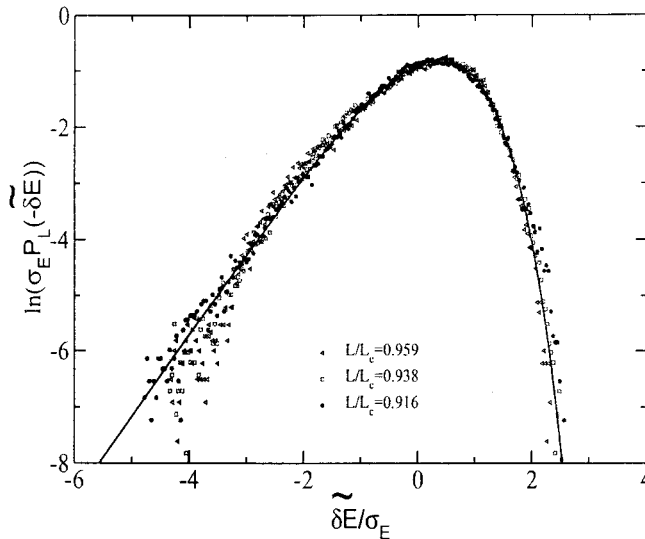


Figura 3.17: Función densidad de probabilidad de las fluctuaciones de la energía total relativa para un sistema de densidad $n_H = 0.1\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.95$. Nuevamente, los símbolos son los resultados de la simulación y la línea continua es la ecuación (3.12).

propiedad independiente de la densidad del sistema, con la única exigencia de considerar tamaños próximos al crítico. Observamos, por tanto, que los resultados no sólo colapsan para distintos valores de α y del tamaño del sistema, sino también para el caso de distintas densidades.

3.5. Conclusiones

En este capítulo hemos presentado resultados obtenidos mediante simulaciones de Dinámica Molecular para sistemas de discos duros inelásticos en el HCS, en la región de parámetros que corresponde a las proximidades de la inestabilidad transversal. Para el rango de valores de los parámetros considerado se ha observado que

- La velocidad de enfriamiento tiende a cero con de forma suave como

$(\widetilde{\delta L})^{1/2}$ a medida que el sistema se aproxima a la inestabilidad transversal. Aquí $\widetilde{\delta L} = (L_c - L)/L_c$, siendo L_c la dimensión crítica del sistema.

- El segundo momento de las fluctuaciones de la energía presenta un comportamiento potencial divergente a medida que nos acercamos a la inestabilidad, aumentando según $\widetilde{\delta L}^{-2}$.
- La función de correlación temporal de la energía presenta cerca de la inestabilidad un decaimiento exponencial, más lento cuanto más cerca estamos del tamaño crítico. La velocidad de decaimiento disminuye como $\widetilde{\delta L}$ al aproximarnos a la inestabilidad.
- También se observa que la función de distribución de probabilidades de las fluctuaciones de la energía es no gaussiana y asimétrica en torno al valor medio. Además, escalada de la forma adecuada, colapsa para todos los valores de α y n_H considerados en una función que tiene la misma forma que la que se encuentra en otros sistemas de equilibrio y de no equilibrio.

Capítulo 4

Teoría mesoscópica de las fluctuaciones críticas para gases granulares aislados

Los resultados de simulación presentados en el capítulo anterior muestran que las fluctuaciones de la energía total de un sistema en el HCS, en las proximidades de la λ , exhiben un comportamiento crítico característico [69]. Abordaremos en este capítulo el estudio de este problema desde un punto de vista teórico, empleando para ello una teoría hidrodinámica fluctuante. Nuestro objetivo es tratar de identificar cuáles son los mecanismos físicos responsables del comportamiento observado en las simulaciones.

Revisaremos, en primer lugar, las ecuaciones de la hidrodinámica fluctuante para sistemas elásticos [70] y presentaremos una extensión de éstas para sistemas cuasielásticos, es decir, sistemas de partículas cuyo coeficiente de restitución normal está muy próximo a la unidad [71]. Los resultados que obtengamos se restringirán a este límite, si bien, en lo que a la densidad se refiere, esperamos que nuestras predicciones sean válidas tanto para sistemas diluidos como para sistemas con densidad finita. Al aproximarnos al tamaño crítico, el campo local cuyas fluctuaciones comienzan a ser relevantes es la velocidad transversal, ya que es la inestabilidad transversal la primera que aparece al aumentar el tamaño del sistema. Nos centraremos, por ello, en la ecuación de Langevin para la velocidad transversal, y veremos cómo las fluctuaciones de este campo son el origen de los comportamientos observados [62]. Además, la teoría será consistente con la propiedad de escala observada para la función de distribución de probabilidades de la energía.

4.1. Revisión de las ecuaciones de la hidrodinámica fluctuante para sistemas elásticos

Las ecuaciones hidrodinámicas presentadas en la sección 2.2 nos permiten conocer la evolución para los valores medios de los campos hidrodinámicos, pero no hacer predicciones sobre las fluctuaciones de los mismos. Para esto último, necesitamos conocer las ecuaciones que verifican los campos fluctuantes.

En el caso elástico, el estudio de las fluctuaciones de los campos hidrodinámicos fue llevado a cabo por Landau y Lifshitz [70]. Los campos hidrodinámicos fluctuantes alrededor del equilibrio obedecen el conjunto de ecuaciones. Para $\alpha = 1$, las ecuaciones hidrodinámicas (2.14)-(2.16) se reducen a

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{n}\tilde{\mathbf{u}}) = 0, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}} + (m\tilde{n})^{-1} \nabla \cdot \mathbf{P} = 0, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{T} + \frac{2}{\tilde{n}d} (\mathbf{P} : \nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \mathbf{q}) = 0, \quad (4.3)$$

donde la tilde indica que estamos tratando con campos fluctuantes macroscópicos. Estas ecuaciones expresan la conservación de la masa, la cantidad de movimiento y la energía, y son válidas para cualquier evolución del fluido, incluyendo cambios fluctuantes en el estado del mismo. A continuación, consideremos los campos como la suma de dos términos, uno determinista, correspondiente al valor medio, y otro fluctuante. Si admitimos que las fluctuaciones son pequeñas alrededor del valor medio, podemos linealizar las ecuaciones en torno al mismo.

Para que nuestra descripción sea completa es necesario especificar la forma precisa del tensor de presiones y del vector flujo de calor. En el caso elástico que estamos considerando en este apartado, las expresiones generales para ellos vienen dadas en función de los gradientes de la velocidad y la temperatura. En presencia de fluctuaciones, existen en el fluido presiones y flujos de calor locales espontáneos que no están relacionados con estos gradientes. Entonces, podemos escribir el tensor de presiones y el vector flujo de calor como la suma de dos partes: una determinista, que será la que estará expresada en función de los campos hidrodinámicos, y otra, que constituirá un

4.1. Revisión de las ecuaciones de la hidrodinámica fluctuante para sistemas elásticos

término de ruido en la ecuación en la que aparece. Tenemos entonces que

$$P_{ij}(\mathbf{r}, t) = P_{ij}^{det}(\mathbf{r}, t) + P_{ij}^{fluc}(\mathbf{r}, t), \quad (4.4)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{q}^{det}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{q}^{fluc}(\mathbf{r}, t). \quad (4.5)$$

Llegados a este punto, es necesario determinar cuáles son las propiedades de los términos de ruido P_{ij}^{fluc} y \mathbf{q}^{fluc} . Esto puede hacerse a a partir de las fórmulas generales de la teoría de las fluctuaciones [72], obteniéndose

$$\langle P_{ij}^{fluc}(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad (4.6)$$

$$\langle q_i^{fluc}(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad (4.7)$$

y

$$\begin{aligned} \langle P_{ij}^{fluc}(\mathbf{r}_1, t_1) P_{lm}^{fluc}(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle \\ = 2k_B T \eta_0 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2) (\delta_{il} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jl} - \frac{2}{d} \delta_{ij} \delta_{lm}), \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\langle q_i^{fluc}(\mathbf{r}_1, t_1) q_j^{fluc}(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle = 2k_B T^2 \kappa_0 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2) \delta_{ij}. \quad (4.9)$$

con η_0 y κ_0 los coeficientes de viscosidad tangencial y de conductividad térmica para sistemas elásticos, respectivamente. A partir de estas propiedades es posible determinar las funciones de correlación de los campos hidrodinámicos fluctuantes. Las ecuaciones (4.8) y (4.9) formulan sendos teoremas de fluctuación-disipación para los sistemas elásticos.

Este mismo problema, partiendo de una descripción de tipo cinético, fue abordado por Bixon y Zwanzig [73], quienes obtuvieron una generalización de la ecuación de Boltzmann linealizada, la denominada ecuación de Boltzmann-Langevin, que incluye un término de fuerza fluctuante. Consecuentemente, estos resultados están limitados al caso de gases diluidos. La ecuación fluctuante se relaciona con la ecuación de Boltzmann del mismo modo en que lo hace la ecuación para la velocidad de una partícula browniana con la ecuación para su velocidad media. Las expresiones obtenidas para las correlaciones del tensor de presiones y del vector flujo de calor a partir de la ecuación de Boltzmann-Langevin coinciden con los propuestos por Landau y Lifshitz, ecuaciones (4.8) y (4.9). coinciden en ambas descripciones.

4.2. Extensión a un medio granular ligeramente inelástico

Para el estudio de las fluctuaciones en un sistema granular, necesitamos unas ecuaciones hidrodinámicas fluctuantes análogas a las presentadas en la sección anterior, pero extendidas para el caso de sistemas inelásticos, no existiendo hasta la fecha una deducción fundamentada de la hidrodinámica fluctuante para sistemas inelásticos comparable a la existente para sistemas moleculares. Actualmente se están realizando trabajos que están orientados a obtener las ecuaciones hidrodinámicas fluctuantes y las propiedades de los términos de ruido a partir de la extensión de la ecuación de Boltzmann-Langevin al caso de sistemas inelásticos [59]. Los resultados que en su caso se obtengan de este modo serán válidos en principio para cualquier valor del coeficiente de restitución, α .

Consideraremos que las fluctuaciones de los campos son pequeñas y que, por tanto, su evolución vendrá bien descrita por el orden lineal. Las ecuaciones hidrodinámicas fluctuantes serán, por tanto, ecuaciones de Langevin lineales obtenidas mediante la linealización de las ecuaciones de Navier-Stokes para un gas granular alrededor del HCS. La dificultad se encuentra en la determinación de las propiedades de los términos de ruido. Si nos restringimos a sistemas ligeramente inelásticos, esto es, con $1 - \alpha \ll 1$, podemos considerar que los términos de ruido vendrán descritos por las mismas propiedades que en la teoría estándar para los gases moleculares normales [71], pero sustituyendo las expresiones para los coeficientes de transporte por las correspondientes en el caso inelástico. No hay razones para esperar que esto sea cierto en general para un gas granular, excepto como una aproximación en el límite cuasielástico. Por tanto, los resultados que obtengamos aquí serán válidos sólo en ese límite.

Definimos las desviaciones de los campos fluctuantes con respecto a su valor en el HCS como

$$\delta\tilde{n}(\mathbf{r}, t) = \tilde{n}(\mathbf{r}, t) - n_H, \quad (4.10)$$

$$\delta\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t), \quad (4.11)$$

$$\delta\tilde{T}(\mathbf{r}, t) = \tilde{T}(\mathbf{r}, t) - T_{HCS}(t). \quad (4.12)$$

Emplearemos en lo que sigue las variables adimensionales \mathbf{l} y s definidas en

las ecuaciones (2.31). En estas variables, definimos los campos adimensionales

$$\tilde{\rho}(\mathbf{l}, s) = \frac{\delta \tilde{n}(\mathbf{r}, t)}{n_H}, \quad (4.13)$$

$$\tilde{\omega}(\mathbf{l}, s) = \frac{\delta \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)}{v_0(t)}, \quad (4.14)$$

$$\tilde{\theta}(\mathbf{l}, s) = \frac{\delta \tilde{T}(\mathbf{r}, t)}{T_{HCS}(t)}, \quad (4.15)$$

y $\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(s)$, $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}(s)$ y $\tilde{\theta}_{\mathbf{k}}(s)$, como la transformada de Fourier de los correspondientes campos hidrodinámicos,

$$\tilde{y}_{\mathbf{k}} = \int d\mathbf{l} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}} \tilde{y}(\mathbf{l}, s). \quad (4.16)$$

En concreto, nos interesará la ecuación que verifica la velocidad transversal que está desacoplada de las ecuaciones de los otros campos, puesto que son las fluctuaciones de este campo las que crecen en el rango de valores de tamaño del sistema considerados, esto es, en las proximidades de la inestabilidad transversal.

Como hemos comentado, consideraremos que las fluctuaciones de los campos son pequeñas y nos restringiremos a ecuaciones de Langevin lineales. Habíamos visto en la sección 2.3.2, que las componentes de Fourier del campo de vorticidad o campo transversal de velocidades verificaban la ecuación (2.60). La ecuación de Langevin que, en las unidades reducidas que hemos introducido, verifica el campo fluctuante $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}_{\perp}}(s)$ viene dada por [70, 71]

$$\left[\frac{\partial}{\partial s} - \frac{\zeta_0}{2} + \tilde{\eta} k^2 \right] \tilde{\omega}_{\mathbf{k}_{\perp}}(s) = \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}_{\perp}}(s) \quad (4.17)$$

donde, análogamente a en la ecuación (2.60), $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}_{\perp}}(s)$ representa la componente de $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}(s)$ perpendicular a \mathbf{k} . El ruido $\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}_{\perp}}(s)$ que hemos introducido en la ecuación (4.17) es blanco y gaussiano y verifica

$$\langle \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}_{\perp}}(s) \rangle_{HCS} = \mathbf{0}, \quad (4.18)$$

y

$$\langle \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}_{\perp}}(s) \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}'_{\perp}}(s') \rangle_{HCS} = \frac{V^{*2}}{N} \delta(s - s') \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \tilde{\eta} k^2 \mathbf{I}. \quad (4.19)$$

Aquí \mathbf{I} representa al tensor unitario de dimensión $d-1$ y V^* es el volumen del sistema en unidades de $l = (n_H \sigma^{(d-1)})^{-1}$. Las ecuaciones (4.18) y (4.19) se siguen de las ecuaciones (4.6) y (4.8) particularizadas para el HCS, es decir, sustituyendo T por T_{HCS} y η_0 por la viscosidad de un fluido granular a la temperatura T_{HCS} y densidad n_H . La mayor ventaja de emplear las nuevas variables es que el coeficiente en la ecuación de Langevin (4.17) así como la amplitud del ruido dado por la ecuación (4.19) son independientes del tiempo. Este no es el caso si la ecuación de Langevin se escribe en términos de los campos y escalas espacial y temporal originales, debido a la dependencia del estado de referencia, el HCS, respecto del tiempo.

Como hemos visto existe un valor mínimo de k , k_{\perp}^c , y, por tanto, un valor máximo del tamaño lineal del sistema, L_c , para el cuál la velocidad transversal se vuelve inestable. Para sistemas con $L < L_c$, el HCS es estable y, en ese caso, la solución para tiempos largos de la ecuación (4.17) no depende de la condición inicial, y puede escribirse como

$$\tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}(s) = \int_{-\infty}^s ds' e^{(s-s')\lambda_{\perp}(k)} \xi_{\mathbf{k}\perp}(s'). \quad (4.20)$$

con $\lambda_{\perp}(k)$ definido en la ecuación (2.63). Entonces, usando (4.19) podemos calcular la función de correlación de un tiempo de las velocidades transversales, obteniéndose

$$\langle \tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}(s) \tilde{\omega}_{\mathbf{k}'\perp}(s) \rangle_H = -\frac{V^{*2}}{2N} \frac{\tilde{\eta} k^2}{\lambda_{\perp}(k)} \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \mathbf{I}, \quad (4.21)$$

y, en particular

$$\langle \tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}(s) \cdot \tilde{\omega}_{\mathbf{k}'\perp}(s) \rangle_H = -\frac{V^{*2}(d-1)}{2N} \frac{\tilde{\eta} k^2}{\lambda_{\perp}(k)} \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \quad (4.22)$$

y

$$\langle |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}(s)|^2 \rangle_H = -\frac{V^{*2}(d-1)}{2N} \frac{\tilde{\eta} k^2}{\lambda_{\perp}(k)}. \quad (4.23)$$

Esto muestra que, conforme L se aproxima a L_c desde abajo, la amplitud de las fluctuaciones de las componentes transversales de la velocidad crece muy rápidamente debido a la contribución de los valores de k próximos a k_{\perp}^c . Este no es el caso para las fluctuaciones de los otros campos hidrodinámicos, cuyas ecuaciones de Langevin están desacopladas de la ecuación (4.17). Podemos esperar, por tanto, que es posible considerar un rango de valores $\delta L = L_c -$

L tal que las fluctuaciones de las componentes transversales del campo de velocidad, aunque aún pequeñas, dominan sobre las fluctuaciones de los otros campos hidrodinámicos, ya que, como ya se ha comentado, la inestabilidad transversal es la primera que aparece al ir aumentando el tamaño del sistema.

4.3. La energía total

En el Capítulo 3 estudiamos, utilizando simulaciones de Dinámica Molecular, como se comportaba la energía total del sistema a medida que nos acercábamos a la inestabilidad transversal. Dedicaremos esta sección a definir la energía fluctuante de forma adecuada y a determinar su evolución en función de los campos hidrodinámicos fluctuantes \tilde{n} , $\tilde{\mathbf{u}}$ y \tilde{T} .

La energía total de un fluido granular de N esferas ($d = 3$) o discos ($d = 2$) duros inelásticos de masa m en un microestado dado definido por las posiciones y las velocidades de las partículas $\{\mathbf{R}_i(t), \mathbf{V}_i(t); i = 1, \dots, N\}$ puede expresarse como

$$\mathcal{E}(t) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m V_i^2(t) = \int d\mathbf{r} \left[\frac{d}{2} \mathcal{N}(\mathbf{r}, t) \mathcal{T}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} m \mathcal{N}(\mathbf{r}, t) U^2(\mathbf{r}, t) \right] \quad (4.24)$$

donde la densidad numérica microscópica $\mathcal{N}(\mathbf{r}, t)$, la temperatura $\mathcal{T}(\mathbf{r}, t)$ y el campo de velocidades $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ están definidos como

$$\mathcal{N}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N \delta[\mathbf{r} - \mathbf{R}_i(t)], \quad (4.25)$$

$$\mathcal{N}(\mathbf{r}, t) \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N \mathbf{V}_i(t) \delta[\mathbf{r} - \mathbf{R}_i(t)], \quad (4.26)$$

$$\frac{d}{2} \mathcal{N}(\mathbf{r}, t) \mathcal{T}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m [\mathbf{V}_i(t) - \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)]^2 \delta[\mathbf{r} - \mathbf{R}_i(t)]. \quad (4.27)$$

Admitimos que estas cantidades pueden identificarse con los campos hidrodinámicos fluctuantes, de manera que podemos reescribir la ecuación (4.24) en la forma [74]

$$\tilde{E}(t) = \int d\mathbf{r} \left[\frac{d}{2} \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \tilde{T}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} m \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \tilde{u}^2(\mathbf{r}, t) \right] \quad (4.28)$$

con la tilde indicando como siempre que estamos tratando con campos fluctuantes macroscópicos.

La teoría que vamos a desarrollar será válida para sistemas en el HCS. A un nivel macroscópico, habíamos visto que este estado estaba caracterizado por una densidad constante y uniforme n_H , un campo de velocidades nulo y una temperatura uniforme dependiente del tiempo $T_{HCS}(t)$ que obedece la ley de Haff, ecuación (2.26).

Vamos a restringirnos, además, a situaciones en las que las amplitudes de las fluctuaciones de los campos hidrodinámicos son, en media, pequeñas. En ese caso, reteniendo hasta el segundo orden en las desviaciones de los campos hidrodinámicos, podemos escribir que las fluctuaciones de la energía total respecto a su valor en el HCS vienen dadas por

$$\begin{aligned} \delta\tilde{E}(t) &= \tilde{E}(t) - E_{HCS}(t) \\ &= \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{d}{2} n_H \delta\tilde{T}(\mathbf{r}, t) + \frac{d}{2} \delta\tilde{n}(\mathbf{r}, t) \delta\tilde{T}(\mathbf{r}, t) + \frac{m}{2} n_H [\delta\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)]^2 \right\} \end{aligned} \quad (4.29)$$

donde $E_{HCS}(t) = \frac{d}{2} N T_{HCS}(t)$ y las desviaciones $\delta\tilde{n}$, $\delta\tilde{\mathbf{u}}$ y $\delta\tilde{T}$ fueron introducidas e las ecuaciones (4.10)–(4.12).

Si se reescribe la expresión anterior en función de los campos adimensionales en el espacio de Fourier dados por (4.13)–(4.16) obtenemos

$$\varepsilon(s) = \frac{\tilde{\theta}_0(s)}{V^*} + \frac{1}{V^{*2}} \sum_{\mathbf{k}} \left[\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(s) \tilde{\theta}_{-\mathbf{k}}(s) + \frac{2}{d} |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}(s)|^2 \right] \quad (4.30)$$

donde

$$\varepsilon(s) = \frac{\delta\tilde{E}(s)}{E_{HCS}(s)}. \quad (4.31)$$

Admitimos además, que después de un tiempo del orden del tiempo medio entre colisiones el sistema alcanza un régimen hidrodinámico en el cual toda la energía del sistema se almacena en los modos hidrodinámicos. En este régimen, el comportamiento de los campos hidrodinámicos está descrito por las ecuaciones hidrodinámicas fluctuantes linealizadas.

Consideremos el rango de valores de $\delta L \equiv L_c - L$ tal que las fluctuaciones relevantes sean las del campo velocidad transversal. En esta región de parámetros podemos despreciar los términos $\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(s) \tilde{\theta}_{-\mathbf{k}}(s)$ del sumatorio en \mathbf{k} de la ecuación (4.30), frente a las fluctuaciones de la velocidad transversal. Dicha ecuación involucra además a la componente $k = 0$ de las fluctuaciones de la

temperatura, $\tilde{\theta}_0(s)$ y este término debe ser analizado cuidadosamente. Para ello, vamos a obtener la ecuación de Langevin para las fluctuaciones de la energía total del sistema, $\delta\tilde{E}(t)$, a partir de la linealización de la ecuación macroscópica media para la energía total, que puede escribirse como

$$\frac{dE(t)}{dt} = -\frac{d}{2} \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}, t) \zeta_{HCS}(T) T(\mathbf{r}, t). \quad (4.32)$$

Si tenemos en cuenta que

$$\zeta_{HCS}(T) \propto T^{1/2}, \quad (4.33)$$

se llega a

$$\frac{\partial}{\partial T} [\zeta_{HCS}(T)T] = \frac{3}{2T} \zeta_{HCS}(T)T = \frac{3}{2} \zeta_{HCS}(T) \quad (4.34)$$

Además, como el número total de partículas no fluctúa, esto es,

$$\int d\mathbf{r} \delta\tilde{n}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (4.35)$$

obtenemos

$$\frac{d\delta\tilde{E}(t)}{dt} = -\frac{3d}{4} n_H \zeta_{HCS}(T_{HCS}) \int d\mathbf{r} \delta\tilde{T}(\mathbf{r}, t). \quad (4.36)$$

Dado que los ruidos que estamos considerando en nuestra teoría son los mismos que para los fluidos ordinarios, no aparece término de ruido en la ecuación anterior, ya que se trata de la ecuación para la energía total del sistema que se conserva en el caso de colisiones elásticas. No obstante, hay que señalar que para los gases granulares, como consecuencia de la inelasticidad, existe un término de ruido adicional en la ecuación para la energía total que no aparece en el caso elástico [37] y que es despreciable en el límite cuasielástico que estamos considerando. Como podemos observar, la diferencia que existe con el análisis lineal es que no podemos aproximar $\delta\tilde{E}(t)$ por $\frac{d}{2} n_H \int d\mathbf{r} \delta\tilde{T}(\mathbf{r}, t)$.

A partir de la ecuación (4.36) es inmediato escribir la ecuación de evolución de $\varepsilon(s)$,

$$\frac{d\varepsilon(s)}{ds} = \zeta_0 \varepsilon(s) - \frac{3}{2} \frac{\zeta_0}{V^*} \tilde{\theta}_0(s) = \zeta_0 \left[\varepsilon(s) - \frac{3}{2V^*} \tilde{\theta}_0(s) \right]. \quad (4.37)$$

La ecuación (4.37) indica que existe un acoplo entre las fluctuaciones de la energía total y las fluctuaciones de la temperatura promediada sobre el

volumen del sistema. La combinación de las ecuaciones (4.17) y (4.37) nos lleva a

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon(s)}{ds} &= \zeta_0 \left[\varepsilon(s) - \frac{3}{2} \left\{ \varepsilon(s) - \frac{1}{V^{*2}} \sum_{\mathbf{k}} \left[\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(s) \tilde{\theta}_{-\mathbf{k}}(s) + \frac{2}{d} |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}(s)|^2 \right] \right\} \right] \\ &= -\zeta_0 \left\{ \frac{\varepsilon(s)}{2} - \frac{3}{2V^{*2}} \sum_{\mathbf{k}} \left[\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(s) \tilde{\theta}_{-\mathbf{k}}(s) + \frac{2}{d} |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}(s)|^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

A continuación, vamos a despreciar las fluctuaciones de densidad considerando que estamos en un régimen caracterizado por

$$0 < \delta\tilde{L} = \frac{L_c - L}{L_c} \ll 1, \quad (4.39)$$

esto es, cerca de la inestabilidad transversal. Se obtiene así

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon(s)}{ds} &= -\frac{\zeta_0}{2} \left[\varepsilon(s) - \frac{6}{dV^{*2}} \sum_{\mathbf{k}} |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}(s)|^2 \right] \\ &\simeq -\frac{\zeta_0}{2} \left[\varepsilon(s) - \frac{6}{dV^{*2}} \sum_{\mathbf{k}} |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}(s)|^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.40)$$

En la última transformación en (4.40) hemos despreciado también las contribuciones de los modos longitudinales ya que, para el rango de valores de L que estamos considerando, las únicas contribuciones relevantes van a ser las dadas por las componentes transversales.

4.4. La velocidad de enfriamiento efectiva

Como primera aplicación de la ecuación (4.40) vamos a calcular el valor medio de $\varepsilon(s)$ en el límite de tiempos largos. En este límite la ecuación nos dice que la magnitud $\varepsilon(s)$ es estacionaria, consistentemente con las propiedades de escala del HCS. Consecuentemente, de (4.40) se tiene

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle_{st} &= \lim_{s \rightarrow \infty} \langle \varepsilon(s) \rangle_{HCS} = \frac{6}{dV^{*2}} \lim_{s \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{k}} |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}(s)|^2 \\ &= -\frac{3(d-1)}{dN} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{\eta}k^2}{\lambda_{\perp}(k)}, \end{aligned} \quad (4.41)$$

donde hemos usado la ecuación (4.23). Podemos simplificar esta expresión utilizando otra vez más que estamos considerando la región en que $\widetilde{\delta L} \ll 1$. En esta región, la suma en \mathbf{k} que aparece en (4.41) está dominada por los $2d$ modos con k menor, es decir aquellos con $k = 2\pi/L^*$, para los cuales

$$\begin{aligned}\lambda_{\perp}(k) &= \lambda_{\perp}(k_{min}) = \frac{\zeta_0}{2} - \tilde{\eta} \left(\frac{2\pi}{L^*} \right)^2 \\ &= \frac{\zeta_0}{2} \left[1 - \left(\frac{L_c}{L} \right)^2 \right] \\ &= \frac{\zeta_0}{2} \left[1 - \left(1 - \widetilde{\delta L} \right)^{-2} \right] \simeq -\zeta_0 \widetilde{\delta L}\end{aligned}\quad (4.42)$$

Entonces, la ecuación (4.41) toma la forma

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon \rangle_{st} &= \frac{3(d-1)}{N} \frac{2\tilde{\eta}}{\zeta_0 \delta L} \left(\frac{2\pi}{L^*} \right)^2 \simeq \frac{6(d-1)}{N} \frac{\tilde{\eta}}{\zeta_0} \left(\frac{2\pi}{L_c^*} \right)^2 \frac{1}{\widetilde{\delta L}} \\ &= \frac{3(d-1)}{N} (\widetilde{\delta L})^{-1} \simeq \frac{3(d-1)}{n_H L_c^d} (\widetilde{\delta L})^{-1}\end{aligned}\quad (4.43)$$

Este resultado nos muestra que el valor estacionario de $\langle \varepsilon \rangle$ alcanzado no es independiente del tamaño del sistema, sino que aumenta a medida que nos acercamos a la inestabilidad como $\widetilde{\delta L}^{-1}$. Más explícitamente, utilizando la definición de $\varepsilon(s)$, ecuación (4.31), la ecuación (4.43) es equivalente a

$$E(t) = E_{HCS}(t) \left[1 + \frac{3(d-1)}{n_H L_c^d} (\widetilde{\delta L})^{-1} \right]. \quad (4.44)$$

Por tanto, hemos obtenido una renormalización de la energía total media del sistema que es debida a las fluctuaciones de la componente transversal del campo de velocidades.

Veamos ahora qué le sucede a la temperatura. Despreciando las fluctuaciones en densidad, la ecuación (4.30) puede escribirse como

$$\frac{\langle \tilde{\theta}_0(s) \rangle_{HCS}}{V^*} = \langle \varepsilon(t) \rangle_{HCS} - \frac{2d}{V^{*2}} \sum_{\mathbf{k}} \langle |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}(s)|^2 \rangle_{HCS}. \quad (4.45)$$

En el límite de tiempos largos, la relación entre los valores estacionarios de la temperatura y de la energía viene dada por

$$\frac{\langle \tilde{\theta}_0 \rangle_{st}}{V^*} \equiv \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{\langle \tilde{\theta}_0(s) \rangle_{HCS}}{V^*} = \langle \varepsilon \rangle_{st} - \frac{1}{3} \langle \varepsilon \rangle_{st} = \frac{2}{3} \langle \varepsilon \rangle_{st}, \quad (4.46)$$

donde hemos empleado la segunda igualdad de (4.41). Entonces, sustituyendo la ecuación (4.43) en (4.46) se obtiene

$$\frac{\langle \tilde{\theta}_0 \rangle_{st}}{V^*} = \frac{2(d-1)}{n_H L_c^d} (\tilde{\delta L})^{-1} \quad (4.47)$$

o, más explícitamente

$$\bar{T}(t) = T_{HCS}(t) \left[1 + \frac{2(d-1)}{n_H L_c^d} (\tilde{\delta L})^{-1} \right], \quad (4.48)$$

donde \bar{T} es una temperatura media renormalizada integrada en todo el volumen del sistema, definida como

$$\bar{T}(t) = \frac{1}{V} \int dr T(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \int dr \langle \tilde{T}(\mathbf{r}, t) \rangle_{HCS} \quad (4.49)$$

con V el volumen del sistema en la escala original.

Estudiemos ahora la forma de la ley de Haff renormalizada. Si consideramos la temperatura $\bar{T}(t)$, se sigue de la ecuación (2.26) y del escalamiento (2.31)

$$\frac{\partial \bar{T}(t)}{\partial t} = -\zeta_{HCS}(T_{HCS}) \bar{T}(t). \quad (4.50)$$

Como $\zeta_{HCS} \propto T_{HCS}^{1/2}$, entonces

$$\zeta_{HCS}(T_{HCS}) = \zeta_{HCS}(\bar{T}) \left[1 + \frac{2(d-1)}{n_H L_c^d} (\tilde{\delta L})^{-1} \right]^{-1/2}, \quad (4.51)$$

así que la ecuación (4.50) puede reescribirse como

$$\frac{\partial \bar{T}(t)}{\partial t} = -\bar{\zeta}_{HCS}(\bar{T}) \bar{T}(t), \quad (4.52)$$

con

$$\bar{\zeta}_{HCS}(T) = \zeta_{HCS}(T) \left[1 + \frac{2(d-1)}{n_H L_c^d} (\tilde{\delta L})^{-1} \right]^{-1/2} \quad (4.53)$$

En los resultados de simulación mostrados en el capítulo anterior, la magnitud “temperatura” que hemos medido ha sido una temperatura efectiva $T_{ef}(t)$ definida como

$$\frac{d}{2} N T_{ef}(t) = E(t). \quad (4.54)$$

4.4. La velocidad de enfriamiento efectiva

$n_H \sigma^2$	α	$A_\zeta^{*T} \times 10^3$	$A_\zeta^{*S} \times 10^3$	$A_E^T \times 10^3$	$A_E^S \times 10^3$	A_S^T	A_S^S
0.02	0.9	0.88	1.11	0.62	0.6	0.474	0.701
0.02	0.8	1.62	3.63	1.15	1.5	0.899	1.188
0.1	0.98	1.06	0.50	0.75	0.47	0.113	0.13
0.1	0.95	2.4	2.38	1.7	1.45	0.277	0.206
0.2	0.98	1.97	2.34	1.4	1.34	0.130	0.079
0.2	0.95	4.59	7.78	3.24	3.6	0.319	0.253

Tabla 4.1: Comparación entre las predicciones teóricas y los resultados de simulación para las amplitudes A_ζ^* , A_E y A_S .

Para esta temperatura efectiva tenemos que

$$T_{ef}(t) = T_{HCS}(t) \left[1 + \frac{3(d-1)}{n_H L_c^d} (\widetilde{\delta L})^{-1} \right], \quad (4.55)$$

que implica

$$\frac{dT_{ef}(t)}{dt} = -\zeta_{HCS}(T_{HCS})T_{ef}(t). \quad (4.56)$$

La ecuación anterior puede expresarse como

$$\frac{dT_{ef}(t)}{dt} = -\zeta_{ef}(T_{ef})T_{ef}(t) \quad (4.57)$$

con

$$\zeta_{ef} = \zeta_{HCS} \left[1 + \frac{3(d-1)}{n_H L_c^d} (\widetilde{\delta L})^{-1} \right]^{-1/2}. \quad (4.58)$$

Por otro lado, en el capítulo anterior estudiamos la dependencia respecto del tamaño del sistema de la velocidad de enfriamiento efectiva adimensionalizada definida como

$$\zeta_{0,ef} = \frac{\zeta_{ef}(T)l}{v_0(T)}, \quad (4.59)$$

como puede verse en el Apéndice D. La teoría aquí desarrollada predice para esta cantidad, cerca de la inestabilidad transversal, la expresión

$$\zeta_{0,ef} = \zeta_0 \left[1 + \frac{3(d-1)}{n_H L_c^d} (\widetilde{\delta L})^{-1} \right]^{-1/2}, \quad (4.60)$$

Entonces,

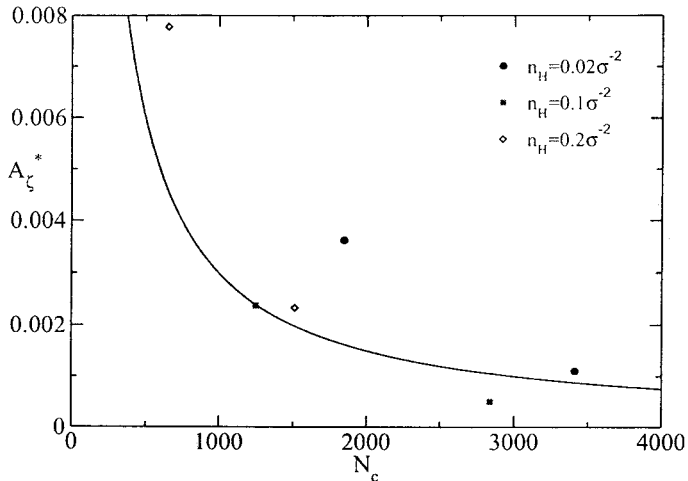


Figura 4.1: Amplitud A_ζ^* con la que decae la velocidad de enfriamiento en función del número crítico de partículas. La línea continua es la predicción teórica dada por (4.62) y los puntos corresponden a las simulaciones de Dinámica Molecular. Para una misma densidad, el mayor N_c (y L_c) se corresponde con el mayor valor de α .

$$\frac{\zeta_{0,ef}^{-2} - \zeta_0^{-2}}{\zeta_0^{-2}} = A_\zeta^* (\widetilde{\delta L})^{-1}, \quad (4.61)$$

siendo

$$A_\zeta^* = \frac{3(d-1)}{n_H L_c^d}. \quad (4.62)$$

Esta amplitud, como puede verse, depende del número crítico de partículas $N_c = n_H L_c^d$ y se relaciona con la que habíamos definido en la ecuación (3.2) por

$$A_\zeta^* = A_\zeta \zeta_0^2. \quad (4.63)$$

En la Tabla 4.1 mostramos los valores teóricos y los obtenidos a partir de las simulaciones de las amplitudes A_ζ^* . La comparación entre ambas puede ser considerada satisfactoria, en el sentido en que la teoría predice correctamente los órdenes de magnitud, especialmente teniendo en cuenta el pequeño valor de las magnitudes medidas.

A fin de mostrar la comparación de los resultados de simulación y la teoría de una forma más visual, en la figura 4.1 hemos representado esta amplitud A_ζ^* como función del número crítico de partículas $N_c = \dot{n}_H L_c^2$. La línea continua se corresponde con la predicción teórica, es decir, la ecuación (4.62), y los puntos son los resultados de la simulación. Se han utilizado símbolos iguales para los sistemas con la misma densidad, correspondiendo el punto de menor N_c al menor α para una densidad dada. Como puede verse, las mayores discrepancias entre teoría y simulación ocurren para $n_H = 0.02\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.80$. Esto puede deberse al hecho de que la teoría desarrollada es válida en el límite cuasielástico, y el valor $\alpha = 0.80$ ya está bastante alejado de este límite.

4.5. Fluctuaciones y correlaciones de la energía total

Pasamos ahora a estudiar la función de correlación de la energía. Trataremos de recuperar, a partir de la teoría hidrodinámica desarrollada, el valor de $\sigma_E(\delta L)$ y el decaimiento exponencial observado en las simulaciones. Para ello, escribamos la ecuación (4.40) de una forma más compacta como

$$\frac{d\varepsilon(s)}{ds} = -\frac{\zeta_0}{2} [\varepsilon(s) - \bar{\omega}(s)], \quad (4.64)$$

con

$$\bar{\omega}(s) = \frac{6}{dV^{*2}} \sum_{\mathbf{k}} |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}(s)|^2. \quad (4.65)$$

Definimos

$$\delta'\varepsilon(s) = \varepsilon(s) - \langle \varepsilon \rangle_{st}, \quad (4.66)$$

y

$$\delta'\bar{\omega}(s) = \bar{\omega}(s) - \langle \bar{\omega} \rangle_{st}. \quad (4.67)$$

Hemos empleado la prima para indicar que estamos considerando desviaciones con respecto a los valores medios renormalizados, esto es, incluyendo los efectos de las fluctuaciones no lineales, y no los valores de las ecuaciones macroscópicas.

De la ecuación (4.64) se obtiene que

$$\langle \bar{\omega} \rangle_{st} \equiv \langle \varepsilon \rangle_{st}, \quad (4.68)$$

y podemos escribir la ecuación para $\delta'\varepsilon(s)$ a partir de (4.64),

$$\frac{d}{ds}\delta'\varepsilon(s) = -\frac{\zeta_0}{2} [\delta'\varepsilon(s) - \delta'\bar{\omega}(s)]. \quad (4.69)$$

En el límite de tiempos largos, una vez que el sistema ha olvidado la condición inicial, la solución de esta ecuación viene dada por

$$\delta'\varepsilon(s) = \frac{\zeta_0}{2} \int_{-\infty}^s ds' e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s-s')} \delta'\bar{\omega}(s'). \quad (4.70)$$

Así, para calcular la función de correlación temporal de $\delta'\varepsilon$ necesitamos conocer cuál es la función de correlación de $\delta'\bar{\omega}$. Los cálculos que conducen a los resultados que vamos a presentar a continuación se detallan en el Apéndice C. Un cálculo estándar usando (4.19) y (4.20), y considerando que el término de ruido es gaussiano muestra que, en las proximidades de la inestabilidad transversal, la función de correlación temporal de las fluctuaciones de la velocidad transversal, con $s \geq s'$, viene dada por

$$\langle \delta'\bar{\omega}(s) \delta'\bar{\omega}(s') \rangle_{HCS} = \frac{9(d-1)}{N^2 d} (\widetilde{\delta L})^{-2} e^{-(s-s')/s_c}, \quad (4.71)$$

donde s_c es un tiempo de relajación “crítico”

$$s_c = \frac{1}{2\zeta_0 \widetilde{\delta L}}. \quad (4.72)$$

Si usamos la ecuación (4.71) en (4.70) se obtiene fácilmente la función de correlación de $\delta'\varepsilon$

$$\langle \delta'\varepsilon(s) \delta'\varepsilon(s') \rangle_{HCS} = \frac{9(d-1)}{N^2 d} (\widetilde{\delta L})^{-2} e^{-(s-s')/s_c}, \quad (4.73)$$

válida para $s \geq s'$. Por tanto, vemos cómo las fluctuaciones de la energía total escalada decaen del mismo modo que las fluctuaciones de la energía cinética asociada con los modos transversales de la velocidad. Más concretamente, ambas decaen con un tiempo de relajación característico dado por (4.72) que diverge como $(\widetilde{\delta L})^{-1}$, siendo la amplitud de la divergencia función de la velocidad de enfriamiento. Este resultado está de acuerdo con los resultados de simulación obtenidos en el capítulo anterior, identificando $s_c^{-1} \sim A_S \widetilde{\delta L}$. En la Tabla 4.1 se presentan los valores obtenidos tanto para la predicción teórica

como para los resultados de simulación de Dinámica Molecular. Observamos que reproduce de forma adecuada el orden de magnitud. Los valores teóricos, A_S^T , para las densidades $n_H = 0.1\sigma^{-2}$ y $n_H = 0.2\sigma^{-2}$ se han calculado empleando el valor de ζ_0 de la teoría de Enskog.

A partir de esta expresión es inmediato obtener las correlaciones para el mismo instante de tiempo. Para $s = s'$ la ecuación (4.73) se reduce a

$$\langle [\delta'\varepsilon(s)]^2 \rangle_{HCS} = \langle (\delta'\varepsilon)^2 \rangle_{st} = \frac{9(d-1)}{N^2 d} (\widetilde{\delta L})^{-2} \simeq \frac{9(d-1)}{n_H^2 L_c^{2d}} (\widetilde{\delta L})^{-2}. \quad (4.74)$$

La expresión anterior nos muestra que las fluctuaciones de energía crecen con $(\widetilde{\delta L})^{-2}$ a medida que nos aproximamos a la inestabilidad transversal. Este comportamiento está de acuerdo con el observado en las simulaciones y presentado en el capítulo anterior.

Veamos la relación entre $\langle [\delta'\varepsilon(s)]^2 \rangle_{st}$ y $\sigma_E^2 = (\langle \widetilde{E}^2 \rangle_{HCS} - \langle \widetilde{E} \rangle_{HCS}^2) / \langle \widetilde{E} \rangle_{HCS}^2$, que es lo que medimos en la simulación. Puede verse fácilmente que

$$\langle [\delta'\varepsilon(s)]^2 \rangle_{HCS} = \frac{\langle \widetilde{E}^2 \rangle_{HCS} - \langle \widetilde{E} \rangle_{HCS}^2}{E_{HCS}^2} = \sigma_E^2 \frac{\langle \widetilde{E} \rangle_{HCS}^2}{E_H^2}. \quad (4.75)$$

Como la variación de la energía, $\langle \widetilde{E} \rangle_{HCS}$, con $\widetilde{\delta L}$ es pequeña, podemos considerar que

$$\sigma_E^2 \simeq \langle [\delta'\varepsilon(s)]^2 \rangle_{HCS} \quad (4.76)$$

Así, podemos identificar la amplitud A_E que aparece en la ecuación (3.5) con

$$A_E = \left(\frac{9(d-1)}{n_H^2 L_c^{2d}} \right)^{1/2} \quad (4.77)$$

En la Tabla 4.1 se dan los valores teóricos y de simulación de A_E . En la figura 4.2 se representan como función de N_c . La línea continua es la representación gráfica de la predicción teórica dada por (4.77) y los puntos son el resultado de la simulación. Nuevamente los símbolos iguales corresponden a los sistemas con la densidad y, para una densidad dada, el menor valor de N_c corresponde al menor valor de α . Las mayores discrepancias entre teoría y simulación vuelve a encontrarse para $n_H = 0.02\sigma^{-2}$ y $\alpha = 0.80$, como era de esperar, al ser este el menor valor de α considerado y ser nuestra teoría válida en el límite cuasielástico.

Hay que notar que los resultados que hemos obtenido con esta teoría nos dan el comportamiento de estas magnitudes en las proximidades de la

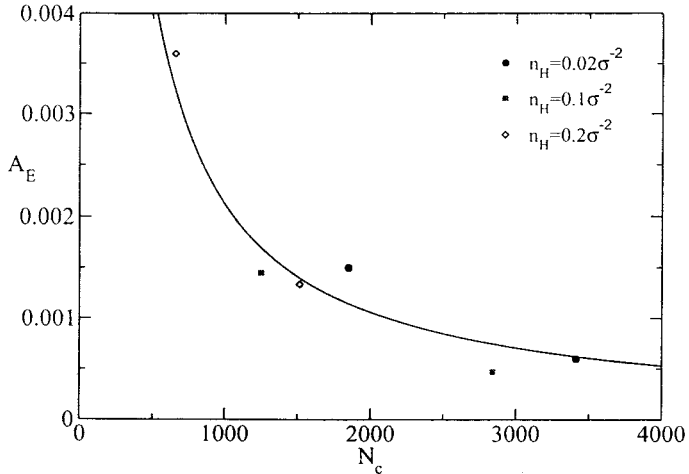


Figura 4.2: Amplitud, A_E , con la que crecen las fluctuaciones de energía al acercarnos a la inestabilidad transversal. La línea continua es la predicción teórica dada por (4.77) y los puntos los resultados de la simulación.

inestabilidad transversal y en ningún caso nos aportan información sobre su valor en regiones del espacio de parámetros alejadas de la inestabilidad, donde $L \ll L_c$.

4.6. Distribución de las fluctuaciones de la energía

Los resultados de simulación presentados en el capítulo anterior muestran que la función densidad de probabilidad de las fluctuaciones de la energía total, $P_L(\delta E)$, verificaba una ley de escala, de modo que los datos de las simulaciones para diferentes valores de α , n_H y L colapsaban en las proximidades de la inestabilidad. En esta sección trataremos de justificar la existencia de dicha ley de escala y de determinar la forma de la función densidad de probabilidad.

La ecuación (4.17) particularizada para los modos con el valor más pequeño

posible de k en el límite $\widetilde{\delta L} \ll 1$ viene dada por

$$\left(\frac{\partial}{\partial s} + \zeta_0 \widetilde{\delta L}\right) \widetilde{\omega}_{\mathbf{k}_\perp}(s) = \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}_\perp}(s), \quad (4.78)$$

donde consideramos que $|\mathbf{k}| = k_{min}$. Definimos ahora una nueva escala temporal como

$$d\tau = \zeta_0 \widetilde{\delta L} ds, \quad (4.79)$$

y un nuevo campo velocidad transversal como

$$\widetilde{\omega}_{\mathbf{k}_\perp}^* = \frac{\widetilde{\omega}_{\mathbf{k}_\perp}}{L_c^d \sigma_E^{1/2}}. \quad (4.80)$$

La ecuación (4.78) puede reescribirse como

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + 1\right) \widetilde{\omega}_{\mathbf{k}_\perp}^*(\tau) = \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}_\perp}^*(\tau). \quad (4.81)$$

Las función de correlación para dos tiempos del término de ruido $\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}_\perp}^*(\tau)$ es

$$\langle \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}_\perp}^*(\tau) \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}'_\perp}^*(\tau') \rangle = \frac{d^{1/2}}{6(d-1)^{1/2}} \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \delta(\tau - \tau') \mathbf{I}. \quad (4.82)$$

Las ecuaciones (4.81) y (4.82) implican que la distribución de probabilidades para $\widetilde{\omega}_{\mathbf{k}_\perp}^*$, con $|\mathbf{k}| = k_{min}$, cerca de la inestabilidad transversal pero por encima de ella ($k_{min} > k_\perp^c$) depende sólomente de la dimensión d del sistema. De hecho, como el término de ruido $\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}_\perp}^*(\tau)$ es gaussiano, es trivial escribir la forma para tiempos largos de la distribución usando la ecuación (4.21),

$$P_{st}(\widetilde{\omega}_{\mathbf{k}_\perp}^*) = (2\pi\sigma_\omega^2)^{-(d-1)/2} e^{-\omega_{\mathbf{k}_\perp}^{*2}/2\sigma_\omega^2}, \quad (4.83)$$

donde $\sigma_\omega^2 = d^{1/2}/12(d-1)^{1/2}$. En la escala temporal τ , y reteniendo únicamente los modos dominantes, la ecuación (4.64) puede escribirse como

$$\widetilde{\delta L} \frac{\partial}{\partial \tau} y = -\frac{1}{2} \left(y - \frac{6}{d} \sum_{|\mathbf{k}|=k_{min}} |\widetilde{\omega}_{\mathbf{k}_\perp}^*(\tau)|^2 \right), \quad (4.84)$$

donde $y = \varepsilon/\sigma_E$, y la suma se restringe a los vectores \mathbf{k} con $|\mathbf{k}| = k_{min}$. Comparando las ecuaciones (4.81) y (4.84) se observa que, en la escala τ y

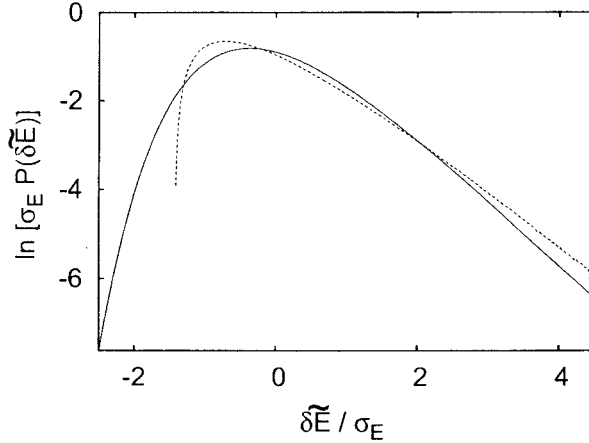


Figura 4.3: Función densidad de probabilidad de las fluctuaciones de la energía total relativa $\sigma_E P_L(\delta\tilde{E})$ para un sistema de discos duros inelásticos. La línea discontinua es la predicción teórica derivada en este trabajo y la línea continua es la ecuación (3.12).

en las proximidades de la inestabilidad, y decae mucho más rápido que las componentes dominantes de $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}^*$. Consecuentemente, para valores grandes de τ , la solución de la ecuación (4.84) es

$$y = \frac{6}{d} \sum_{|\mathbf{k}|=k_{min}} |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}^*(\tau)|^2, \quad (4.85)$$

donde la distribución de probabilidad para los modos $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}^*$ viene dada por (4.83). Como esta última no depende de ningún parámetro del sistema excepto de la dimensión d , la misma propiedad se obtiene para la distribución de y y de la variable,

$$\frac{\delta\tilde{E}}{\sigma_E} = -[d(d-1)]^{1/2} + \frac{6}{d} \sum_{|\mathbf{k}|=k_{min}} |\tilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}^*|^2. \quad (4.86)$$

donde $\delta\tilde{E} = [\tilde{E} - \langle\tilde{E}\rangle_{HCS}]/\langle\tilde{E}\rangle_{HCS}$. Esto es equivalente a decir que la dis-

tribución de probabilidades para $\widetilde{\delta E}$ verifica la relación de escala

$$P(\widetilde{\delta E}) = \frac{1}{\sigma_E} \widetilde{f} \left(\frac{\widetilde{\delta E}}{\sigma_E} \right), \quad (4.87)$$

donde \widetilde{f} es una función de escala. Esta es precisamente la propiedad que asumimos en el capítulo anterior y que fue confirmada por los resultados de simulación de Dinámica Molecular. Como la función de distribución de probabilidades de $\widetilde{\omega}_{\mathbf{k}\perp}^*$ es conocida, ecuación (4.83), es posible generar numéricamente la función de distribución de probabilidades de $P(\widetilde{\delta E})$. Podemos comparar esta distribución con la distribución $\Pi(y)$ dada en la ecuación (3.12). Esta comparación se representa en la figura 4.3. A diferencia de lo que se hizo en las figuras 3.16 y 3.17 donde se representaron los datos de la simulación para $P_L(-\widetilde{\delta E})$ y la función $\Pi(y)$ dada en (3.12), en la figura 4.3 se han representado la predicción teórica obtenida aquí para $P_L(\widetilde{\delta E})$ y la función $\Pi(-\widetilde{\delta E})$. Evidentemente ambas cosas son equivalentes a efectos de comparación. Aunque el acuerdo entre ambas curvas no es muy malo para los valores positivos de $\widetilde{\delta E}$, existen fuertes discrepancias para los valores negativos. La ecuación (4.86), para $d = 2$ implica que $\widetilde{\delta E}/\sigma_E \geq -\sqrt{2}$, mientras que en las simulaciones se encuentran valores más pequeños y el ajuste es más adecuado a (3.12). Al ser la ecuación (4.86) una consecuencia de (4.37), es posible que, a fin de elaborar una teoría más precisa, sea necesario tener en cuenta el ruido intrínseco asociado a la velocidad de enfriamiento.

A la hora de valorar adecuadamente la teoría desarrollada en este capítulo, hay que tener en cuenta que aunque está restringida al límite cuasielástico, no se ha realizado ninguna restricción en lo que se refiere a la densidad.

Capítulo 5

Conclusiones

En esta memoria hemos analizado el comportamiento de las fluctuaciones de un medio granular en las proximidades de un punto de inestabilidad. Concretamente, hemos considerado un sistema aislado en el estado de enfriamiento uniforme (homogeneous cooling state) en la vecindad de su punto crítico de inestabilidad transversal, en que el sistema desarrolla vórtices de velocidad y agregados de partículas.

En el estudio hemos combinado el análisis teórico con la técnica de simulación en ordenador mediante Dinámica Molecular. A fin de evitar las dificultades estadísticas que, en principio, surgirían debido a la disminución continua de la temperatura del sistema, las simulaciones se han llevado a cabo utilizando una dinámica transformada en que el estado de enfriamiento uniforme se transforma en estacionario. Las propiedades obtenidas en esta representación estacionaria se trasladan de forma unívoca y exacta en propiedades del sistema de partida.

A continuación resumimos algunos de los resultados más importantes obtenidos:

- Las simulaciones de Dinámica Molecular muestran claramente que cuando el tamaño del sistema se va aumentando de forma que se aproxima a su punto de inestabilidad, la denominada velocidad de enfriamiento tiende a cero de acuerdo con una ley potencial.
- En las mismas circunstancias anteriores, el segundo momento de las fluctuaciones de la energía total del sistema, escalada de forma que sea independiente del tiempo, muestra también un comportamiento potencial pero, en este caso, divergente.

- Consistentemente, el decaimiento de la función de correlación temporal de la energía total se vuelve más lento al aproximarse a la inestabilidad. El tiempo característico de relajación diverge también con una ley potencial.
- Las fluctuaciones de la energía total cerca de la inestabilidad verifican una ley de escala de manera que si se representa adecuadamente su función de distribución de probabilidades, se vuelve independiente de los parámetros del sistema tales como el coeficiente de restitución y el propio tamaño.
- Sorprendentemente, la forma de la función de escalamiento es la misma que se ha encontrado en diversos problemas de fluctuaciones críticas de sistemas en equilibrio y también alejados del mismo. Esta coincidencia requiere, sin duda alguna, ser investigada en detalle.
- A fin de analizar teóricamente los resultados anteriores hemos utilizado una extensión al caso inelástico de las ecuaciones hidrodinámicas fluctuantes. Por construcción, las ecuaciones consideradas es de esperar que sean válidas sólo en el límite cuasielástico.
- Los resultados teóricos obtenidos están en buen acuerdo cualitativo (exponentes críticos) y cuantitativos (amplitudes críticas) con los resultados de las simulaciones.
- A fin de situar los resultados anteriores en un contexto adecuado es importante señalar que todos ellos, tanto los de simulación como los teóricos, se refieren a una región próxima a la inestabilidad del sistema, pero no “excesivamente” próxima. Muy cerca de la inestabilidad es casi seguro que se pongan de manifiesto acoplos no lineales no considerados aquí. De hecho, así parecen indicarlo los resultados de las simulaciones más próximas al punto de inestabilidad.
- Otro punto a destacar es que los análisis realizados abarcan tanto sistemas diluidos como densos, aunque siempre en la región fluida.
- Los estudios presentados aquí creemos que ponen claramente de manifiesto la importancia de profundizar en el estudio de las fluctuaciones en medios granulares como un paso necesario para su comprensión desde una perspectiva física.

Apéndice A

Coeficientes de transporte

Las relaciones constitutivas para el tensor de presiones y el vector flujo de calor en primer orden en los gradientes se han obtenido por diversos procedimientos, entre ellos, la aplicación del método de Chapman-Enskog [38]. Del mismo modo se ha evaluado la velocidad de enfriamiento del sistema $\zeta(\mathbf{r}, t)$.

Como hemos visto en el texto principal, el tensor de presiones y el vector flujo de calor en primer orden en los gradientes pueden escribirse, en las variables reducidas, como

$$\Pi_{ij}(\mathbf{l}, s) = \frac{1}{2}[\theta(\mathbf{l}, s) + \rho(\mathbf{l}, s)]\delta_{ij} - \tilde{\eta} \left[\frac{\partial}{\partial l_i} \omega_j(\mathbf{l}, s) + \frac{\partial}{\partial l_j} \omega_i(\mathbf{l}, s) - \frac{2}{d} \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\omega}(\mathbf{l}, s) \delta_{ij} \right], \quad (\text{A.1})$$

$$\phi(\mathbf{l}, s) = -\tilde{\kappa} \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \theta(\mathbf{l}, s) - \tilde{\mu} \frac{\partial}{\partial \mathbf{l}} \rho(\mathbf{l}, s). \quad (\text{A.2})$$

Por otro lado, la velocidad de enfriamiento puede escribirse como suma de dos términos

$$\delta\zeta_0(\mathbf{l}, s) = \zeta^{(0)} + \zeta^{(2)}, \quad (\text{A.3})$$

siendo $\zeta^{(0)}$ de orden cero en los gradientes y $\zeta^{(2)}$ de orden dos, despreciable frente al primero.

Aquí presentaremos las expresiones para los coeficientes de transporte que aparecen en las relaciones constitutivas, esto es, $\tilde{\eta}$, $\tilde{\kappa}$ y $\tilde{\mu}$. Estos coeficientes han sido calculados en la primera aproximación de Sonine y pueden expresarse

sarse como [54]

$$\bar{\eta} = \frac{\eta^* \eta_0}{n_H m l v_0(t)} \quad (\text{A.4})$$

$$\bar{\kappa} = \frac{\kappa^* \kappa_0}{n_H l v_0(t)} \quad (\text{A.5})$$

$$\bar{\mu} = \frac{2T \kappa_0}{n_H m l v_0^3(t) \mu^*} \quad (\text{A.6})$$

donde

$$\eta^*(\alpha) = \left[\nu_1^*(\alpha) - \frac{\zeta^*(\alpha)}{2} \right]^{-1} \quad (\text{A.7})$$

$$\kappa^*(\alpha) = \left[\nu_2^*(\alpha) - \frac{2d}{d-1} \zeta^*(\alpha) \right]^{-1} [1 + c^*(\alpha)] \quad (\text{A.8})$$

$$\mu^*(\alpha) = 2\zeta^*(\alpha) \left[\kappa^*(\alpha) + \frac{(d-1)c^*(\alpha)}{2d\zeta^*(\alpha)} \right] \left[\frac{2(d-1)}{d} \nu_2^*(\alpha) - 3\zeta^*(\alpha) \right] \quad (\text{A.9})$$

Las funciones η_0 y κ_0 son los coeficientes de viscosidad y de conductividad de un fluido elástico, respectivamente, y vienen dados por

$$\eta_0 = \frac{2+d}{8} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \pi^{-\frac{d-1}{2}} (m k_B T)^{1/2} \sigma^{-(d-1)} \quad (\text{A.10})$$

$$\kappa_0 = \frac{d(d+2)^2}{16(d-1)} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \pi^{-\frac{d-1}{2}} k_B \left(\frac{k_B T}{m}\right)^{1/2} \sigma^{-(d-1)} \quad (\text{A.11})$$

Las funciones ζ^* , ν_1^* , ν_2^* y c^* que aparecen en (A.7)–(A.9) son función del coeficiente de restitución normal, α , y vienen dadas por

$$\zeta^*(\alpha) = \frac{2+d}{4d} (1-\alpha^2) \left[1 + \frac{3}{32} c^*(\alpha) \right] \quad (\text{A.12})$$

$$\nu_1^*(\alpha) = \frac{(3-3\alpha+2d)(1+\alpha)}{4d} \left[1 - \frac{1}{64} c^*(\alpha) \right] \quad (\text{A.13})$$

$$\nu_2^*(\alpha) = \frac{1+\alpha}{d-1} \left[\frac{d-1}{2} + \frac{3(d+8)(1-\alpha)}{16} + \frac{4+5d-3(4-d)\alpha}{1024} c^*(\alpha) \right] \quad (\text{A.14})$$

$$c^*(\alpha) = \frac{32(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{9+24d+(8d-41)\alpha+30\alpha^2(1-\alpha)} \quad (\text{A.15})$$

Para escribir la contribución de orden cero de la velocidad de enfriamiento sólo necesitamos conocer el valor de la velocidad de enfriamiento adimensionalizada, ζ_0 , en primer orden en Sonine, ya que

$$\delta\zeta_0(\mathbf{l}, s) \simeq \zeta_0 \left[2\rho(\mathbf{l}, s) + \frac{3}{2}\theta(\mathbf{l}, s) \right]. \quad (\text{A.16})$$

Con estas expresiones de $\tilde{\eta}$ y de ζ_0 es posible calcular el tamaño crítico del sistema, L_c , necesario para nuestro desarrollo.

Apéndice B

Algoritmo de simulación empleado

B.1. Introducción

Para las simulaciones hemos empleado la representación estacionaria del HCS, de modo que, en lugar de que las partículas, entre colisiones, se muevan libremente, hemos simulado el sistema acelerado dado por las ecuaciones (2.80). Nuestras simulaciones de Dinámica Molecular han sido realizadas utilizando un programa construido siguiendo el algoritmo conducido por sucesos de Allen y Tildesley [64]. En este Apéndice describiremos brevemente dicho algoritmo y las modificaciones necesarias para poner de manifiesto la aceleración entre colisiones.

El sistema que queremos simular es un sistema constituido por discos duros ($d = 2$), de masa m y diametro σ que colisionan inelásticamente. La colisión es instantánea, mientras que entre colisiones las partículas se aceleran. El momento total se conserva en la colisión, no así la energía. El método empleado para el caso de esferas duras es diferente a la Dinámica Molecular para el caso de potenciales continuos. Cuando la distancia entre dos partículas se hace cero, se produce una colisión, cambiando las velocidades de las partículas instantáneamente según la regla de colisión. La evolución del sistema se realiza de colisión en colisión. Debemos por tanto ir localizando las colisiones en orden cronológico. En la figura B.1 mostramos el diagrama de flujo del algoritmo utilizado.

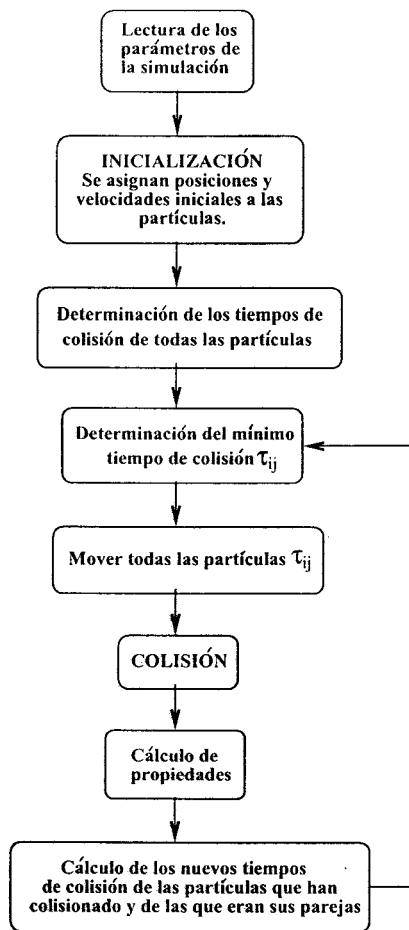


Figura B.1: Diagrama de flujo del algoritmo utilizado.

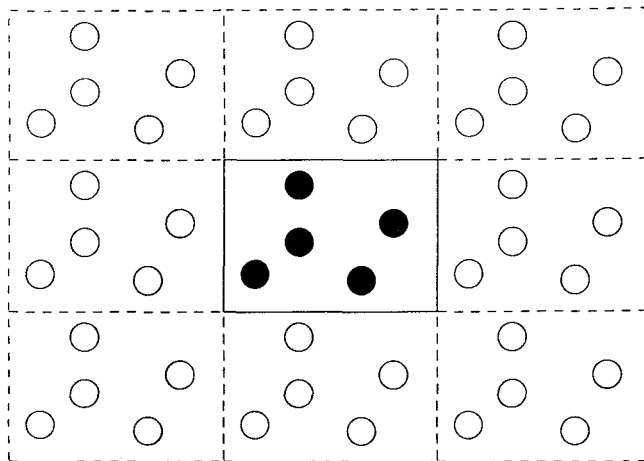


Figura B.2: Condiciones de contorno periódicas. Consideramos al sistema rodeado de réplicas de sí mismo.

El algoritmo se divide en los siguientes pasos:

1. Localizar la próxima colisión.
2. Mover todas las partículas hasta el momento en el que se produce la colisión.
3. Modificar las velocidades de las partículas que colisionan según la regla de colisión.
4. Calcular las propiedades de interés y volver al primer paso.

Vamos a detallar a continuación cada uno de estos pasos.

B.2. Cálculo de los tiempos de colisión

Es el cálculo en el que se emplea más tiempo de simulación. Tenemos que determinar la próxima colisión, esto es, debemos determinar, para todas las partículas, el tiempo que tardarán en colisionar y localizar el menor de estos valores. Debe tenerse en cuenta que las partículas, entre colisiones, son aceleradas según (2.80). Consideremos dos discos i y j de diámetro σ , con posiciones \mathbf{R}_i y \mathbf{R}_j y velocidades \mathbf{W}_i y \mathbf{W}_j en el instante τ . La condición que

nos da el intervalo tiempo τ_{ij} tras el cual se va a producir la colisión entre ellas es

$$|\mathbf{R}_{ij}(\tau + \tau_{ij})| = |\mathbf{R}_{ij} + \mathbf{W}_{ij}T_{ij}| = \sigma, \quad (\text{B.1})$$

donde $T_{ij} = \frac{1}{\omega_0} [e^{\tau_{ij}\omega_0} - 1]$. Si definimos $b_{ij} = \mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{W}_{ij}$ obtenemos una ecuación cuadrática para T_{ij}

$$W_{ij}^2 T_{ij}^2 + 2b_{ij}T_{ij} + R_{ij}^2 - \sigma^2 = 0 \quad (\text{B.2})$$

Existen tres posibilidades basadas en el valor de b_{ij} . Si $b_{ij} > 0$ las partículas se alejan una de la otra y no se produce la colisión. Si $b_{ij} < 0$ y $b_{ij}^2 - W_{ij}^2(R_{ij}^2 - \sigma^2) < 0$, las dos soluciones de nuestra ecuación cuadrática son imaginarias y las partículas no colisionan. Pero si $b_{ij}^2 - W_{ij}^2(R_{ij}^2 - \sigma^2) > 0$ las soluciones serán reales positivas y la menor de ellas corresponderá al tiempo de colisión buscado,

$$T_{ij} = \frac{-b_{ij} - (b_{ij}^2 - W_{ij}^2(R_{ij}^2 - \sigma^2))^{\frac{1}{2}}}{W_{ij}^2}. \quad (\text{B.3})$$

A partir de T_{ij} se obtiene inmediatamente τ_{ij} . En el programa se almacenan los tiempos de colisión de todas las partículas en una matriz y la partícula con la que se produce la colisión en otra. Al comienzo del programa se inicializan todos los tiempos de colisión a un valor muy grande.

Se imponen al sistema condiciones de contorno periódicas, esto es, cuando una partícula sale por un extremo de nuestro sistema vuelve a entrar por el extremo opuesto. Es como si nuestro sistema estuviese rodeado por réplicas de sí mismo, como podemos ver en la figura B.2, de modo que para calcular los tiempos de colisión consideramos la imagen más próxima de todas las partículas. No hacer esta simplificación complicaría el programa. Esto puede provocar problemas en el algoritmo en el caso de bajo número de partículas y sistemas pequeños. En este caso puede suceder que la que determinemos como próxima colisión no lo sea realmente. Como puede verse en la figura (B.3) la partícula C colisionaría con la B , pero, al considerar su imagen más próxima esto es, D , el programa no detectaría la colisión. En los sistemas considerados en este trabajo, a pesar de ser diluidos, no nos hemos encontrado con esta dificultad.

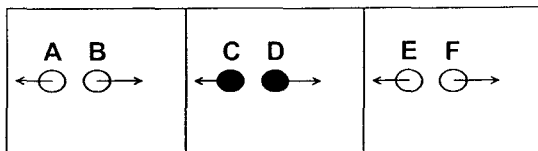


Figura B.3: Limitación del algoritmo para sistemas pequeños con un número bajo de partículas.

B.3. Evolución del sistema durante τ_{ij}

Una vez determinados todos los tiempos de colisión se escoge el menor entre ellos, y el par de partículas que colisionan. Dejamos evolucionar las partículas durante ese tiempo, de manera que las posiciones en $\tau + \tau_{ij}$ vendrán dadas por

$$\mathbf{R}_i(\tau + \tau_{ij}) = \mathbf{R}_i + \mathbf{W}_i \frac{[e^{\omega_0 \tau_{ij}} - 1]}{\omega_0}, \quad (\text{B.4})$$

y las velocidades serán

$$\mathbf{W}_i(\tau + \tau_{ij}) = \mathbf{W}_i e^{\omega_0 \tau_{ij}}. \quad (\text{B.5})$$

B.4. Aplicación de la regla de colisión

En esta parte del programa se calculan las nuevas velocidades de las partículas que colisionan teniendo en cuenta la regla de colisión. En el caso de esferas duras inelásticas sabemos que se produce la conservación del momento pero no de la energía, y que el impulso actúa a lo largo de la línea que une los centros de las partículas. Suponemos todas las partículas de igual masa y tamaño $\pm \sigma$.

Para el caso de discos duros inelásticos el cambio en las velocidades viene dado por la regla de colisión definida en (2.1) y (2.2). Como ya hemos visto, en la representación estacionaria del HCS, debido al carácter instantáneo de las colisiones, el cambio en las velocidades en la colisión es el mismo en la dinámica acelerada.

B.5. Cálculo de propiedades

Podemos ahora calcular las magnitudes en las que estemos interesados e ir almacenandolas en diferentes matrices. No medimos cada colisión, sino que dejamos que se produzcan un determinado número de colisiones (al menos una colisión por partícula) entre cada medida a fin de que los valores no estén muy correlacionados.

B.6. Cálculo de los nuevos tiempos de colisión

Una vez que se ha producido la colisión sólo es necesario evaluar los nuevos tiempos de colisión de las partículas implicadas en la misma y de aquellas de las que eran parejas. El resto de tiempos de colisión y de parejas de partículas no se ven afectados por la colisión que ha tenido lugar.

Una vez que tenemos los nuevos tiempos de colisión volvemos a determinar el mínimo entre ellos, se deja evolucionar el sistema este tiempo, acelerando las partículas, y se produce la nueva colisión.

Apéndice C

Función de correlación para $\delta'\varepsilon$

En este Apéndice vamos a calcular la función de correlación temporal de $\delta'\varepsilon(s)$. Para ello, en primer lugar, es necesario calcular la función de correlación de $\bar{\omega}(s)$, definido en el texto principal como

$$\bar{\omega}(s) = \frac{6}{dV^2} \sum_{\mathbf{k}} |\omega_{\mathbf{k}\perp}(s)|^2, \quad (\text{C.1})$$

siendo su desviación con respecto al valor renormalizado

$$\delta'\bar{\omega}(s) = \bar{\omega}(s) - \langle \bar{\omega} \rangle_{st}, \quad (\text{C.2})$$

donde $\langle \bar{\omega} \rangle_{st} = \langle \varepsilon \rangle_{st}$. Vamos a calcular para $s \gg 1$ y $s' \gg 1$, con $s \geq s'$ la función de correlación

$$\langle \delta'\bar{\omega}(s)\delta'\bar{\omega}(s') \rangle_H = \langle \bar{\omega}(s)\bar{\omega}(s') \rangle_H - \langle \bar{\omega} \rangle_{st}^2 \quad (\text{C.3})$$

Tenemos que

$$\begin{aligned} \langle \bar{\omega}(s)\bar{\omega}(s') \rangle_H &= \frac{36}{d^2V^4} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \langle \omega_{\mathbf{k}\perp}(s) \cdot \omega_{-\mathbf{k}\perp}(s) \omega_{\mathbf{k}'\perp}(s') \cdot \omega_{-\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H \\ &= \frac{36}{d^2V^4} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} [\langle \omega_{\mathbf{k}\perp}(s) \cdot \omega_{-\mathbf{k}\perp}(s) \rangle_H \langle \omega_{\mathbf{k}'\perp}(s') \cdot \omega_{-\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H \\ &\quad + \langle \omega_{\mathbf{k}\perp}(s) \omega_{\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H : \langle \omega_{-\mathbf{k}\perp}(s) \omega_{-\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H \\ &\quad + \langle \omega_{\mathbf{k}\perp}(s) \omega_{-\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H : \langle \omega_{-\mathbf{k}\perp}(s) \omega_{\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H] \\ &= \langle \bar{\omega} \rangle_{st}^2 + \frac{72}{d^2V^4} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \langle \omega_{\mathbf{k}\perp}(s) \omega_{\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H : \langle \omega_{-\mathbf{k}\perp}(s) \omega_{-\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H \\ &= \langle \bar{\omega} \rangle_{st}^2 + \frac{72}{d^2V^4} 2 \sum_{\mathbf{k}} \langle \omega_{\mathbf{k}\perp}(s) \omega_{-\mathbf{k}\perp}(s') \rangle_H : \langle \omega_{-\mathbf{k}\perp}(s) \omega_{\mathbf{k}\perp}(s') \rangle_H \quad (\text{C.4}) \end{aligned}$$

En la primera transformación, hemos tenido en cuenta la ecuación (4.20) y que el término de ruido $\xi_{\mathbf{k}\perp}(s)$ es gaussiano, de modo que los cumulantes de $\bar{\omega}(s)$ de orden superior a dos se anulan. En la última transformación hemos usado que $\langle \omega_{\mathbf{k}\perp}(s)\omega_{\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H \propto \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}$ como se muestra en el siguiente cálculo

$$\begin{aligned}
 \langle \omega_{\mathbf{k}\perp}(s)\omega_{\mathbf{k}'\perp}(s') \rangle_H &= \int_{-\infty}^s ds_1 \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 e^{(s-s_1)\lambda_{\perp}(k)} e^{(s'-s'_1)\lambda_{\perp}(k')} \langle \xi_{\mathbf{k}\perp}(s_1)\xi_{\mathbf{k}'\perp}(s'_1) \rangle_H \\
 &= \frac{V^2}{N} \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} \tilde{\eta} k^2 \mathbf{I} \int_{-\infty}^s ds_1 \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 e^{(s-s_1+s'-s'_1)\lambda_{\perp}(k)} \delta(s_1 - s'_1) \\
 &= \frac{V^2}{N} \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} \tilde{\eta} k^2 \mathbf{I} \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 e^{(s+s'-2s'_1)\lambda_{\perp}(k)} \\
 &= \frac{V^2}{N} \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} \tilde{\eta} k^2 \mathbf{I} e^{(s+s')\lambda_{\perp}(k)} \left[-e^{-2s'\lambda_{\perp}(k)} \frac{1}{2\lambda_{\perp}(k)} \right] \\
 &= -\frac{V^2}{2N} \frac{\tilde{\eta} k^2}{\lambda_{\perp}(k)} e^{(s-s')\lambda_{\perp}(k)} \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} \mathbf{I} \tag{C.5}
 \end{aligned}$$

Las ecuaciones (C.3)–(C.5) nos llevan a

$$\begin{aligned}
 \langle \delta'\bar{\omega}(s)\delta'\bar{\omega}(s') \rangle_H &= \frac{72}{d^2 4N^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{\eta}^2 k^4}{\lambda_{\perp}^2(k)} e^{2(s-s')\lambda_{\perp}(k)} \\
 &= \frac{18(d-1)}{d^2} \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{\eta}^2 k^4}{\lambda_{\perp}^2(k)} e^{2(s-s')\lambda_{\perp}(k)} \tag{C.6}
 \end{aligned}$$

Para $\tilde{\delta L} \ll 1$ el sumatorio que aparece en la expresión anterior puede aproximarse por

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{\eta}^2 k^4}{\lambda_{\perp}^2(k)} e^{2(s-s')\lambda_{\perp}(k)} &\simeq 2d \frac{\tilde{\eta}^2 k_{\min}^4}{\zeta_0^2 \tilde{\delta L}^2} e^{-2(s-s')\zeta_0 \tilde{\delta L}} \\
 &= 2d \frac{\tilde{\eta}^2}{\zeta_0^2} \left(\frac{2\pi}{L_c} \right) e^{-2(s-s')\zeta_0 \tilde{\delta L}} \tilde{\delta L}^{-2} \\
 &= \frac{d}{2} e^{-2(s-s')\zeta_0 \tilde{\delta L}} \tilde{\delta L}^{-2} \tag{C.7}
 \end{aligned}$$

Si sustituimos este resultado en la ecuación (C.6) obtenemos para la función

de correlación de $\delta'\bar{\omega}(s)$

$$\begin{aligned}\langle\delta'\bar{\omega}(s)\delta'\bar{\omega}(s')\rangle_H &= \frac{9(d-1)}{d} \frac{1}{N^2} e^{-2(s-s')\zeta_0\widetilde{\delta L}} \widetilde{\delta L}^{-2} \\ &= \widetilde{\delta L}^{-2} \frac{9(d-1)}{N^2 d} e^{-(s-s')/s_c},\end{aligned}\quad (\text{C.8})$$

donde hemos introducido el tiempo de relajación “crítico” s_c como

$$s_c = \frac{1}{2\zeta_0\widetilde{\delta L}}. \quad (\text{C.9})$$

A partir de la ecuación (C.8) podemos calcular la función de correlación de $\delta'\varepsilon(s)$, ya que en el límite de tiempos largos, y una vez que se ha olvidado la condición inicial, la expresión para $\delta'\varepsilon(s)$ puede escribirse como

$$\delta'\varepsilon(s) = \frac{\zeta_0}{2} \int_{-\infty}^s ds' e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s-s')} \delta'\bar{\omega}(s'). \quad (\text{C.10})$$

Por tanto, para $s \geq s'$

$$\begin{aligned}\langle\delta'\varepsilon(s)\delta'\varepsilon(s')\rangle_H &= \frac{\zeta_0^2}{4} \int_{-\infty}^s ds_1 \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s'-s_1-s'_1)} \langle\delta'\bar{\omega}(s_1)\delta'\bar{\omega}(s'_1)\rangle_H \\ &= \frac{\zeta_0^2}{4} \frac{9(d-1)}{N^2 d} (\widetilde{\delta L})^{-2} \int_{-\infty}^s ds_1 \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s'-s_1-s'_1)} e^{-|s_1-s'_1|/s_c}\end{aligned}\quad (\text{C.11})$$

Evaluemos la integral respecto de s_1 y s'_1 que aparece en la expresión anterior,

$$\begin{aligned}I &= \int_{-\infty}^s ds_1 \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s'-s_1-s'_1)} e^{-|s_1-s'_1|/s_c} \\ &= \int_{-\infty}^s ds_1 \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s'-s_1-s'_1)} \left[\theta(s_1 - s'_1) e^{-(s_1-s'_1)/s_c} \right. \\ &\quad \left. + \theta(s'_1 - s_1) e^{-(s'_1-s_1)/s_c} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 \int_{s'_1}^s ds_1 e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s'-s_1-s'_1)} e^{-(s_1-s'_1)/s_c} \\ &\quad + \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 \int_{-\infty}^{s'_1} ds_1 e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s'-s_1-s'_1)} e^{-(s'_1-s_1)/s_c}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s'-s'_1)+\frac{s'_1}{s_c}} \int_{s'_1}^s ds_1 e^{\frac{\zeta_0}{2}s_1-\frac{s_1}{s_c}} \\
 &\quad + \int_{-\infty}^{s'} ds'_1 e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s'-s'_1)-\frac{s'_1}{s_c}} \int_{-\infty}^{s'_1} ds_1 e^{\frac{\zeta_0}{2}s_1+\frac{s_1}{s_c}} \\
 &= \frac{1}{\frac{\zeta_0}{2}-\frac{1}{s_c}} \left[e^{-\frac{\zeta_0}{2}s'-\frac{s}{s_c}} e^{\frac{\zeta_0}{2}s'+\frac{s'}{s_c}} - e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s')} \frac{e^{\zeta_0 s'}}{\zeta_0} \right] + \frac{1}{\frac{\zeta_0}{2}+\frac{1}{s_c}} e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s+s')} \frac{e^{\zeta_0 s'}}{\zeta_0} \\
 &= \frac{e^{-\frac{s-s'}{s_c}}}{\left(\frac{\zeta_0}{2}\right)^2 - \left(\frac{1}{s_c}\right)^2} - \frac{1}{\zeta_0 \left(\frac{\zeta_0}{2} - \frac{1}{s_c}\right)} e^{\frac{\zeta_0}{2}(s-s')} + \frac{1}{\zeta_0 \left(\frac{\zeta_0}{2} + \frac{1}{s_c}\right)} e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s-s')} \\
 &\simeq \frac{4}{\zeta_0^2} e^{-\frac{s-s'}{s_c}} - \frac{2}{\zeta_0^2} e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s-s')} + \frac{2}{\zeta_0^2} e^{-\frac{\zeta_0}{2}(s-s')} = \frac{4}{\zeta_0^2} e^{-(s-s')/s_c} \tag{C.12}
 \end{aligned}$$

Para llegar a este resultado hemos considerado que, en el límite que estamos considerando, $\widetilde{\delta L} \ll 1$, para así poder despreciar $1/s_c$ frente a ζ_0 . Si sustituimos la ecuación (C.12) en la ecuación (C.11) obtenemos

$$\langle \delta'\varepsilon(s)\delta'\varepsilon(s') \rangle = \frac{9(d-1)}{N^2 d} (\widetilde{\delta L})^{-2} e^{-(s-s')/s_c} \tag{C.13}$$

válida para $s \geq s'$. Por tanto, las fluctuaciones de la energía total decaen con el mismo tiempo característico que las fluctuaciones de la energía cinética total asociada con los modos transversales de la velocidad. Para $s = s'$ la ecuación (C.13) se reduce a

$$\langle \delta'\varepsilon(s)\delta'\varepsilon(s') \rangle = \frac{9(d-1)}{N^2 d} (\widetilde{\delta L})^{-2} \tag{C.14}$$

Esta última expresión muestra cómo las fluctuaciones de energía crecen a medida que el tamaño del sistema se aproxima a L_c .

Apéndice D

Temperatura efectiva en la representación estacionaria

En las simulaciones de Dinámica Molecular lo que hemos medido como temperatura ha sido la energía cinética media por partícula del sistema acelerado, \widetilde{T}_{ef} . Veamos cómo está relacionada la magnitud medida con la temperatura T_{ef} definida en el texto principal en (4.54). Revisemos lo que se hace en el método de la representación estacionaria del HCS. Se introduce una nueva escala temporal como

$$\omega_0\tau = \ln \frac{t}{t_0} \rightarrow t = t_0 e^{\omega_0\tau}, \quad (\text{D.1})$$

donde t_0 y ω_0 son constantes arbitrarias. La velocidad en esta nueva escala, $\omega(\tau)$, viene dada por

$$\omega_i(\tau) = \omega_0 t_0 e^{\omega_0\tau} \mathbf{v}_i(t) = \omega_0 t \mathbf{v}_i(t). \quad (\text{D.2})$$

La función de distribución escalada para las N partículas será

$$\tilde{\rho}(\{\mathbf{r}_i\}, \{\omega_i\}, \tau) = \rho(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{v}_i\}, t) (\omega_0 t)^{-dN}. \quad (\text{D.3})$$

Definamos la temperatura efectiva en ambas representaciones como

$$\frac{d}{2} N T_{ef}(t) = \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N d\mathbf{v}_1 \dots d\mathbf{v}_N \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m v_i^2 \right) \rho(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{v}_i\}, t), \quad (\text{D.4})$$

y

$$\frac{d}{2} N \widetilde{T}_{ef}(\tau) = \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N d\omega_1 \dots d\omega_N \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \omega_i^2 \right) \tilde{\rho}(\{\mathbf{r}_i\}, \{\omega_i\}, \tau). \quad (\text{D.5})$$

La comparación de ambas expresiones implica

$$\tilde{T}_{ef}(\tau) = (\omega_0 t_0)^2 e^{2\omega_0 \tau} T_{ef}(t). \quad (D.6)$$

Escribamos la ecuación que verifica $\tilde{T}_{ef}(\tau)$ empleando para ello la ecuación para $T_{ef}(t)$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{T}_{ef}(\tau)}{\partial \tau} &= 2\omega_0 \tilde{T}_{ef}(\tau) + (\omega_0 t_0)^2 e^{2\omega_0 \tau} \frac{\partial t}{\partial \tau} \frac{\partial T_{ef}(t)}{\partial t} \\ &= 2\omega_0 \tilde{T}_{ef}(\tau) + (\omega_0 t_0)^3 e^{3\omega_0 \tau} [-\zeta_{ef}(T_{ef}) T_{ef}(\tau)] \\ &= 2\omega_0 \tilde{T}_{ef}(\tau) - \frac{\zeta_{ef}(T_{ef})}{T_{ef}^{1/2}} \tilde{T}_{ef}^{3/2}(\tau) \\ &= 2\omega_0 \tilde{T}_{ef}(\tau) - \bar{\zeta}_{ef} \tilde{T}_{ef}^{3/2}(\tau), \end{aligned} \quad (D.7)$$

donde

$$\bar{\zeta}_{ef} = \frac{\zeta_{ef}(T_{ef})}{T_{ef}^{1/2}}. \quad (D.8)$$

La solución estacionaria de la ecuación (D.7) es

$$\tilde{T}_{ef}^{st} = \left(\frac{2\omega_0}{\bar{\zeta}_{ef}} \right)^2. \quad (D.9)$$

Así, tenemos que

$$\bar{\zeta}_{ef} = \frac{2\omega_0}{\sqrt{\tilde{T}_{ef}^{st}}}. \quad (D.10)$$

La temperatura efectiva en las variables originales verificaba

$$\frac{\partial T_{ef}(t)}{\partial t} = -\zeta_{ef}(T_{ef}) T_{ef}(t). \quad (D.11)$$

La velocidad de enfriamiento efectiva adimensionalizada en el sistema original viene dada como

$$\begin{aligned} \zeta_{0ef} &\equiv \frac{\zeta_{ef}(t)l}{v_{ef}(t)} = \frac{\zeta_{ef}(t)l}{\left[\frac{2T_{ef}(t)}{m} \right]^{1/2}} = \frac{\bar{\zeta}_{ef}l}{\left(\frac{2}{m} \right)^{1/2}} \\ &= 2\omega_0 l \left(\frac{m}{2\tilde{T}_{ef}^{st}} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (D.12)$$

En esta última expresión vemos que la temperatura efectiva en el sistema acelerado está relacionada con el ζ_{0ef} que rige el decaimiento de la temperatura efectiva del sistema original.

Bibliografía

- [1] H. M. Jaeger, S. R. Nagel y R. P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259 (1996).
- [2] P. G. de Gennes, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S374 (1999).
- [3] H. M. Jaeger y S. R. Nagel, *Science* **255**, 1523 (1992).
- [4] C. A. Coulomb, en *Memoires de Mathématique et de Physique*, Academie Royale des Sciences, Paris 343 (1773).
- [5] P. B. Umbanhoward, F. Melo y H. L. Swinney, *Nature* **382**, 793 (1996).
- [6] F. Melo, P. B. Umbanhoward y H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3838 (1996).
- [7] O. Reynolds, *O. Phil. Mag.* **20**, 467 (1885).
- [8] H. A. Janssen, *Zeitschr. d. Vereines deutscher Ingenieure* **39**, 1045 (1895).
- [9] A. D. Rosato, T. Vreeland y F. B. Prinz, *Int. Mater. Rev.* **36**, 45 (1991).
- [10] J. Duran, J. Rajchenbach y E. Clément, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2431 (1993).
- [11] A. P. J. Breu, H. M. Ensner, C. A. Kruelle y I. Rehberg, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 014302 (2003).
- [12] I. Goldhirsch y G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1619 (1993).
- [13] I. Goldhirsch, M. L. Tan y G. Zanetti, *J. Sci. Comput.* **8**, 1 (1993).
- [14] A. Kudrolli, M. Wolpert y J. P. Gollup, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1383 (1997).

BIBLIOGRAFÍA

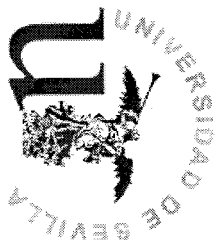
- [15] H. J. Schlichting y V. Nordmeier, *Math. Naturwiss. Unterr* **49**, 323 (1996).
- [16] J. Eggers, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5322 (1999).
- [17] J. J. Brey, F. Moreno, R. Garcia-Rojo y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **65**, 011305 (2002).
- [18] Eli Livne, Baruch Meerson y Pavel V. Sasorov, *Phys. Rev. E* **65**, 021302 (2002).
- [19] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, F. Moreno y R. Garcia-Rojo, *Phys. Rev. E* **65**, 061302 (2002).
- [20] M. Argentina, M. G. Clerc y R. Soto, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 044301 (2002).
- [21] P. Bak, C. Tang y K. Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987).
- [22] P. Bak, *How Nature Works* (Oxford University Press, New York, 1997).
- [23] H. M. Jaeger, C. H. Liu y S. R. Nagel, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 40 (1989).
- [24] C. S. Campbell, *Ann. Rev. Fluid Mech.* **22**, 57 (1990).
- [25] P. K. Haff, *J. Fluid Mech.* **134**, 401 (1983).
- [26] J. T. Jenkins y S. B. Savage, *J. Fluid Mech.* **130**, 187 (1983).
- [27] D. Jeffrey C. Lun, S. B. Savage y N. Chepurdiy, *J. Fluid Mech.* **140**, 223 (1984).
- [28] J. T. Jenkins y M. W. Richman, *Arch. Rat. Mech.* **87**, 355 (1985).
- [29] A. Goldshtein y M. Shapiro, *J. Fluid. Mech.* **282**, 75 (1995).
- [30] J. J. Brey, J. W. Dufty y A. Santos, *J. Stat. Phys.* **87**, 1051 (1997).
- [31] J. W. Dufty, J. J. Brey y A. Santos, *Physica A* **240**, 212 (1997).
- [32] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Phys. Rev. E* **54**, 3664 (1996).
- [33] T. P. C. van Noije y M. H. Ernst, *Granular Matter* **1**, 57 (1998).

-
- [34] T. P. C. van Noije, M. H. Ernst, y R. Brito, *Physica A* **251**, 266 (1998).
- [35] J. J. Brey y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **69**, 011305 (2004).
- [36] J. W. Dufty, *Advances in Complex Systems* **4**, 397 (2001).
- [37] J. J. Brey, M. I. García de Soria, P. Maynar y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **70**, 011302 (2004).
- [38] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim y A. Santos, *Phys. Rev. E* **58**, 4638 (1998).
- [39] J. W. Dufty y J. J. Brey, *J. Stat. Phys.* **109**, 433 (2002).
- [40] J. J. Brey, J. W. Dufty y M. J. Ruiz-Montero, en *Granular Gas Dynamics*, editado por T. Pöschel y N. Brilliantov (Springer-Verlag, New York, 2003).
- [41] J. W. Dufty y J. J. Brey, *Phys. Rev. E* **68**, 030302(R) (2003).
- [42] J. W. Dufty y J. J. Brey, en *Modelling and Numerics of Kinetic Dissipative Systems*, editado por G. Russo L. Pareschi y G. Toscani (Nova Science, New York, 2006).
- [43] G. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Clarendon Press, Oxford, 1994).
- [44] J. J. Brey y D. Cubero, *Phys. Rev. E* **57**, 2019 (1998).
- [45] D. C. Rapaport, *J. Comp. Phys.* **34**, 184 (1999).
- [46] H. J. Herrmann y S. Luding, *Contin. Mech. Thermodyn.* **10**, 189 (1998).
- [47] J. F. Lutsko, *Phys. Rev. E* **63**, 061211 (2001).
- [48] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, P. Maynar y M. I. García de Soria, *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, S2489 (2005).
- [49] F. G. Bridges, A. Hatzes y D. Lin, *Nature* **309**, 333 (1984).
- [50] S. F. Foerster, M. Y. Louge, H. Chang y K. Allia, *Phys. Fluids* **6**, 1108 (1994).

BIBLIOGRAFÍA

- [51] P. Résibois y M. de Leener, *Classical Kinetic Theory of Fluids* (John Wiley, New York, 1977).
- [52] S. Chapman y T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge University Press, New York, 1970).
- [53] A. Goldshtein y M. Shapiro, *J. Fluid Mech.* **282**, 75 (1995).
- [54] J.J. Brey y D. Cubero, en *Granular gases*, editado por S. Luding y T.Pöschel (Springer, Berlin, 2001).
- [55] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y F. Moreno, *Phys. Fluids* **10**, 2976 (1998).
- [56] J. F. Lutsko, *Phys. Rev. E* **72**, 021306 (2005).
- [57] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Phys. Rev. E* **60**, 3150 (1999).
- [58] J. W. Dufty y J. J. Brey, *Phys. Rev. E* **68**, 030302 (2003).
- [59] P. Maynar Blanco, Ph.D. thesis, 2006.
- [60] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Rev. E* **50**, R28 (1994).
- [61] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Rev. E* **53**, 5089 (1996).
- [62] J. J. Brey, A. Domínguez, M. I. García de Soria y P. Maynar, To appear in *Phys. Rev. Lett.* (2006).
- [63] I. Goldhirsch, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **35**, 267 (2003).
- [64] M. P. Allen y D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford Science Publications, Bristol, 1987).
- [65] R. Soto y M. Mareschal, *Phys. Rev. E* **63**, 041303 (2001).
- [66] S. T. Bramwell, P. C. W. Holdsworth y J. F. Pinton, *Nature (London)* **396**, 552 (1998).
- [67] S. T. Bramwell, K. Christensen, J. Y. Fortin, P. C. W. Holdsworth, H. J. Jensen, S. Lise, J. M. López, M. Nicodemi, J. F. Pinton y M. Sellitto, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3744 (2000).

- [68] J. F. Pinton, P. C. W. Holdsworth y R. Labbé, *Phys. Rev. E* **60**, R2452 (1999).
- [69] J. J. Brey, M. I. García de Soria, P. Maynar y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 098001 (2005).
- [70] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica de fluidos* (Editorial Reverté, Barcelona, 1986).
- [71] T. P. C. van Noije, M. H. Ernst, R. Brito y J. A. G. Orza, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 411 (1997).
- [72] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, New York, 1980).
- [73] M. Bixon y R. Zwanzig, *Phys. Rev.* **187**, 267 (1969).
- [74] R. Brito y M. H. Ernst, *Europhys. Lett.* **43**, 497 (1998).



UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Reunido el tribunal en el día de la fecha, integrado por los abajo firmantes, para evaluar la tesis doctoral de D. **MARÍA ISABEL GARCÍA DE SERRA URGENTA** titulada **PURPURELIVORES CÉSTICAS EN HOMÍDES GRANIVOROS** acordó otorgarle la calificación de **SOBRESALIENTE CON LAUDES POR UNANIMIDAD**
Sevilla, a **28** de **junio** de 200 **6**

Vocal,

Vocal,

Vocal,

Presidente,

Secretario,

Doctorando,