

1 182 06 479

# HIDRODINÁMICA DE LOS MEDIOS GRANULARES DILUIDOS

TESIS DOCTORAL

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

por



UNIVERSIDAD DE SEVILLA



600023843

DAVID CUBERO GÓMEZ

Dirigida por

DR. JOSÉ JAVIER BREY ABALO,  
Catedrático de Física Teórica de la  
Universidad de Sevilla



T.S-184

HIDRODINÁMICA DE LOS MEDIOS  
GRANULARES DILUIDOS

UNIVERSIDAD DE SEVILLA  
NEGOCIADO DE TESIS

Queda registrado este Título de Doctor al  
folio 31 número 392 del libro  
correspondiente. 30.067.2306  
Sevilla, .....

El Jefe del Negociado  
Alonso Vázquez

FAC.

FISICA

Impreso en Sevilla en octubre de 2000.

Este trabajo ha sido posible gracias a una beca del Ministerio de Educación y Cultura, a través del programa de formación de personal investigador en la convocatoria de 1996, además de las contribuciones económicas de los proyectos de la DGYCIT PB95-0534 y PB98-1124.

*para ti, Sol, por tu luz*

# ÍNDICE GENERAL

|       |   |    |
|-------|---|----|
| 1     | Introducción  | 1  |
| 2     | La física de los materiales granulares                      | 5  |
| 2.1   | El medio granular poco fluidizado                           | 6  |
| 2.2   | El régimen de flujos rápidos                                | 10 |
| 3     | Ecuaciones cinéticas para medios inelásticos                | 17 |
| 3.1   | Introducción  | 17 |
| 3.2   | El desarrollo en colisiones binarias                        | 19 |
| 3.3   | Jerarquía de ecuaciones BBGKY                               | 21 |
| 3.4   | La ecuación de Boltzmann                                    | 23 |
| 3.5   | Modelos cinéticos   | 25 |
| 4     | Simulación de la ecuación de Boltzmann                      | 29 |
| 4.1   | Introducción  | 29 |
| 4.2   | Probabilidad de colisión                                    | 29 |
| 4.3   | Descripción del método de simulación directa de Monte Carlo | 31 |
| 4.4   | Unidades de simulación                                      | 33 |
| 5     | Gases granulares que evolucionan libremente                 | 35 |
| 5.1   | Introducción  | 35 |
| 5.2   | La función de distribución en el HCS                        | 36 |
| 5.2.1 | Rango de velocidades térmicas                               | 39 |
| 5.2.2 | Colas de la función de distribución de velocidades          | 46 |
| 5.3   | Coefficientes de transporte                                 | 50 |
| 5.3.1 | Coefficientes de transporte en el orden de Navier-Stokes    | 51 |
| 5.3.2 | Análisis de estabilidad                                     | 54 |
| 5.3.3 | Validez de la hidrodinámica lineal                          | 58 |
| 5.4   | Origen de la formación de agregados                         | 63 |

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 5.4.1 | Respuesta a una perturbación del campo de velocidades . . . . .            | 66  |
| 5.4.2 | Contribuciones de los modos hidrodinámicos no lineales . . . . .           | 68  |
| 5.4.3 | Evolución de una fluctuación espontánea . . . . .                          | 71  |
| 6     | Autodifusión en el estado de enfriamiento homogéneo . . . . .              | 77  |
| 6.1   | Introducción . . . . .   | 77  |
| 6.2   | Solución de Chapman-Enskog . . . . .                                       | 79  |
| 6.3   | Simulación directa de Monte Carlo . . . . .                                | 85  |
| 6.4   | Resultados de Dinámica Molecular . . . . .                                 | 88  |
| 6.5   | La función de autocorrelación de velocidades . . . . .                     | 91  |
| 7     | Solución normal en un estado estacionario sin flujos convectivos . . . . . | 99  |
| 7.1   | Introducción . . . . .   | 99  |
| 7.2   | Descripción del sistema . . . . .  | 100 |
| 7.3   | La aproximación de Navier-Stokes . . . . .                                 | 102 |
| 7.3.1 | Ecuaciones hidrodinámicas . . . . .  | 102 |
| 7.3.2 | Condiciones de contorno . . . . .  | 104 |
| 7.3.3 | Simulación directa de Monte Carlo . . . . .                                | 106 |
| 7.4   | Más allá de Navier-Stokes . . . . .  | 110 |
| 7.4.1 | Dependencia de la temperatura de la pared . . . . .                        | 110 |
| 7.4.2 | Dependencia del tamaño del sistema . . . . .                               | 110 |
| 7.4.3 | Identificación de la región normal . . . . .                               | 112 |
| 7.4.4 | Ecuaciones hidrodinámicas . . . . .  | 115 |
| 7.4.5 | Sobre la curvatura de la presión . . . . .                                 | 119 |
| 7.5   | Estado de Fourier . . . . .  | 120 |
| 7.5.1 | Solución normal de la ecuación de Boltzmann . . . . .                      | 120 |
| 7.5.2 | Ley de Fourier para un gradiente arbitrario . . . . .                      | 121 |
| 7.5.3 | La función de distribución marginal . . . . .                              | 122 |
| 8     | Conclusiones . . . . .   | 127 |
| A.    | Cálculo de los operadores de evolución y de colisión binaria . . . . .     | 131 |
| B     | Cálculo de integrales multi-dimensionales . . . . .                        | 139 |
| B.1   | Integrales del ángulo sólido . . . . .                                     | 140 |
| B.2   | Integrales gaussianas . . . . .  | 140 |
| B.3   | Integrales dobles gaussianas . . . . .                                     | 141 |
| C     | Cálculo de los coeficientes de transporte . . . . .                        | 143 |
| C.1   | Solución de Chapman-Enskog . . . . .                                       | 143 |
| C.2   | Cálculo de $\zeta^{(0)}$ , $\nu_\eta$ , $\nu_\kappa$ y $\nu_\mu$ . . . . . | 149 |

---

|     |  |     |
|-----|--|-----|
| C.3 | La función de distribución $f^{(1)}$ . . . . .             | 152 |
| C.4 | Expresiones para $\zeta^{(2)}$ . . . . .                   | 153 |
| D   | Cálculo de $\nu_D$ y $f_s^{(1)}$ . . . . .                 | 155 |
| E   | Cálculo de las condiciones de contorno cinéticas . . . . . | 157 |
|     | Bibliografía . . . . .                                     | 159 |
|     | Lista de publicaciones . . . . .                           | 167 |
|     | Índice analítico . . . . .                                 | 169 |

## CAPÍTULO 1

# INTRODUCCIÓN

Existen varios motivos para estudiar los materiales granulares. En primer lugar, éstos se encuentran en abundancia en la naturaleza y en la industria. Algunos ejemplos donde juegan un papel muy importante son las catálisis en la ingeniería química, el almacenamiento de cereales en silos en agricultura, el transporte de carbón en la industria mineral y el de pastillas en la farmacológica. También están directamente involucrados en fenómenos naturales como el corrimiento de tierras o la formación de dunas en geología, e incluso son importantes en astrofísica, por ejemplo, para comprender la formación de los anillos planetarios. Desde un punto de vista académico, los medios granulares son realizaciones macroscópicas de sistemas de muchas partículas con interacciones disipativas, mostrando un comportamiento intrínsecamente de no equilibrio.

En el llamado «régimen de flujo rápido», las partículas o granos que constituyen el material granular se mueven libremente excepto cuando colisionan entre sí, es decir, se comportan de manera parecida a las partículas de un fluido ordinario. Por ello, un sistema en estas condiciones se dice que es un fluido granular. Parece entonces natural preguntarse en qué condiciones las ecuaciones, conceptos y teorías que funcionan para los fluidos moleculares u ordinarios son también aplicables, con las modificaciones necesarias, a los fluidos granulares.

Para describir la dinámica de los fluidos moleculares, normalmente se suele hacer uso de ecuaciones macroscópicas que involucran variables hidrodinámicas tales como la densidad, la temperatura y la velocidad media en cada punto. Estas ecuaciones se denominan ecuaciones de Navier-Stokes, y aunque actualmente no se saben resolver analíticamente<sup>1</sup>, son capaces de describir gran parte de los fenómenos asociados a los fluidos ordinarios en situaciones no demasiado

---

<sup>1</sup>De hecho, este problema está considerado como uno de los siete grandes retos matemáticos pendientes. El Instituto de Matemáticas Clay de Cambridge (Massachusetts, EE.UU.) ofrece un millón de dolares por la resolución de esta problema (consúltese la dirección de internet [claymat.org](http://claymat.org)).



alejadas del equilibrio. La aplicabilidad de esta descripción descansa en el hecho de que las escalas espaciales y temporales macroscópicas sobre las que varían las variables hidrodinámicas son mucho más grandes que las microscópicas, asociadas al tamaño de las partículas, a la distancia media que recorre cada una sin colisionar y al tiempo medio entre colisiones. El puente entre esta descripción macroscópica y otra microscópica lo establece la teoría cinética, desarrollada inicialmente entre otros por Clausius, Maxwell y Boltzmann en el siglo XIX. La teoría cinética intenta explicar las propiedades de los fluidos fundándose únicamente en el movimiento de las partículas que lo forman.

Una de las características más importantes de las interacciones entre las partículas de un medio granular es su carácter disipativo, al contrario de lo que sucede en los fluidos ordinarios, donde las colisiones son por definición elásticas. Por ello, las ecuaciones hidrodinámicas deben ser modificadas para que tengan en cuenta la disipación de la energía. Sin embargo, existen serias dudas sobre la validez de una descripción hidrodinámica en los medios granulares. En primer lugar, no existe una separación de escalas (macroscópicas y microscópicas) tan evidente como en los fluidos ordinarios, pues las partículas que constituyen el material granular de por sí ya son macroscópicas. Por otro lado, como veremos más adelante, la disipación en las colisiones introduce una serie de escalas intermedias que pueden llevar al desarrollo de inhomogeneidades en el sistema. Allí donde los fluidos moleculares se mantienen en una situación uniforme de equilibrio, los fluidos granulares presentan gradientes internos. Estos gradientes pueden ser suficientemente grandes como para que se necesiten correcciones locales (de Burnett o de super-Burnett) en las ecuaciones hidrodinámicas, o peor aún, que se necesite añadir términos integrales que den cuenta de la no localidad o la dependencia del sistema con su propia historia (efectos reológicos). Estas situaciones pueden ser matemáticamente tan complejas como cualquiera en teoría cuántica de campos.

El objetivo de esta memoria es el estudio de los flujos granulares, centrándonos en la viabilidad de una descripción hidrodinámica. El punto de partida será la teoría cinética, que sigue siendo una herramienta válida para describir las interacciones en los fluidos granulares. De esta manera, utilizaremos ecuaciones cinéticas que nos permitirán obtener información acerca de propiedades del fluido tales como los coeficientes de transporte y la función de distribución de posiciones y velocidades de las partículas. Nuestro trabajo se concentrará esencialmente en el análisis de la ecuación de Boltzmann —formulada por L. E. Boltzmann en 1872 para fluidos moleculares— para un gas diluido de esferas duras inelásticas. La compleja estructura de esta ecuación integro-diferencial, aún en el caso elástico, ha provocado que no existan soluciones analíticas más que para las denominadas moléculas de Maxwell, que corresponden a un teórico po-

tencial de interacción que decae como la quinta potencia de su separación (como  $1/r^5$ ). Ante esta situación, se tiene que recurrir a aproximaciones. De hecho, a partir de una solución aproximada de esta ecuación, calculada mediante el denominado método de Chapman-Enskog, se puede obtener una descripción del sistema en términos hidrodinámicos. El método de simulación directa de Monte Carlo, introducido por Bird en 1963, proporciona un procedimiento numérico muy apropiado para verificar la validez de estas aproximaciones, pues nos permite resolver numéricamente la propia ecuación de Boltzmann. El siguiente paso consiste en contrastar estos resultados con los que se obtienen con simulaciones de Dinámica Molecular —en la que se reproduce la dinámica exacta del gas— con objeto de comprobar la validez de la propia descripción cinética para gases diluidos. Esta metodología nos ha permitido analizar la aplicabilidad de la descripción hidrodinámica en diversas situaciones.

La estructura de esta memoria es la siguiente. A modo de introducción, en el capítulo 2 presentamos una revisión somera sobre la fenomenología y las peculiaridades de los medios granulares que han despertado el interés de la comunidad científica en los últimos años, hasta el punto de considerarlo un nuevo estado de la materia. Ello nos permite esclarecer el contexto sobre el cual se desarrolla el trabajo presentado en esta memoria, así como el significado de conceptos tales como el de temperatura granular.

En el capítulo 3 se sientan las bases de la teoría cinética que se usa en el resto de la memoria. Utilizando el formalismo de los operadores de colisión binaria para esferas o discos duros se obtiene la ecuación de Boltzmann y la ecuación de Enskog. Ambas ecuaciones cinéticas están basadas en la hipótesis de caos molecular, aunque es la primera la que hemos estudiado con más intensidad. Al final del capítulo discutimos también otros modelos de ecuación cinética que han sido utilizados para el estudio de los fluidos granulares en el límite de baja densidad.

El primer problema concreto que hemos analizado se refiere a la dinámica de un gas granular diluido que evoluciona libremente (sin perturbaciones externas). Esta situación se describe con detalle en el capítulo 5. En principio, el estado más sencillo será aquel que se mantiene homogéneo en el tiempo, aunque debido a las colisiones inelásticas la energía cinética total debe disminuir progresivamente. Por este motivo se le suele denominar estado de enfriamiento homogéneo (que designaremos como HCS, del inglés *homogeneous cooling state*). En primer lugar, analizaremos la función de distribución de velocidades en este estado. Seguidamente, obtendremos los coeficientes de transporte en el orden de Navier-Stokes para situaciones próximas al HCS y los contrastaremos con resultados de simulación. También veremos que este estado es inestable, formándose espontáneamente inhomogeneidades en el sistema.

En el capítulo 6 se profundiza aún más en este estado analizando la autodifusión de una partícula marcada en el seno de un gas que se encuentra en el HOS. Se analizará con detalle la correspondiente ecuación hidrodinámica junto con el coeficiente de transporte asociado (el coeficiente de autodifusión), así como la función de autocorrelación de velocidades.

En el capítulo 7 estudiaremos el estado estacionario que alcanza un medio granular cuando se le suministra energía a través de dos paredes simétricas. Este estado es particularmente interesante para analizar la viabilidad de la descripción hidrodinámica, ya que los gradientes que se forman en el sistema no dependen de las condiciones iniciales del gas, sino que están directamente relacionados con el grado de inelasticidad de las partículas, llegando a desaparecer en el límite elástico. Los gradientes son más grandes cuanto mayor es la disipación, de forma que las ecuaciones hidrodinámicas en el orden de Navier-Stokes dejan de ser aplicables si la disipación es suficientemente grande. No obstante, todavía se puede observar una región del espacio independiente de la forma en que se suministra energía al sistema en los contornos.

En el último capítulo resumimos las principales conclusiones de nuestro trabajo. Finalmente, los apéndices recogen distintos aspectos que consideramos de interés, pero que no han sido detallados en el texto.

## CAPÍTULO 2

# LA FÍSICA DE LOS MATERIALES GRANULARES

Un material granular es un conjunto de un gran número de partículas macroscópicas, es decir, con una dimensión lineal característica mayor que  $1 \mu\text{m}$ . En general, estas partículas se encuentran inmersas en un fluido, por ejemplo, aire o agua. En los denominados «medios granulares secos», las interacciones entre los granos dominan sobre las interacciones entre éstos y el fluido que los rodea, y por ello, este último puede despreciarse para determinar muchas de las propiedades de estos sistemas. Si además el medio granular es «no cohesivo», las interacciones entre las partículas pueden considerarse puramente repulsivas. En la práctica uno tiene que tratar con un número total de granos mucho menor que el número de Avogadro. Sin embargo, este número es suficientemente grande como para justificar una descripción estadística.

A pesar de la aparente simplicidad de los materiales granulares —sus interacciones se pueden describir con las leyes de la mecánica clásica—, estos muestran una gran diversidad de comportamientos. Si se introduce arena dentro de un vaso, el material se parece a un sólido. Sin embargo, al inclinarlo la superficie del material empieza a fluir de forma parecida a un líquido. Si se agita hielo picado dentro de una coctelera, el movimiento es parecido al de un gas. Los medios granulares pueden ser considerados, por derecho propio, un nuevo estado de la materia [1].

Aún dentro de los materiales granulares secos no cohesivos existen fundamentalmente tres campos de estudio: la estática, en el que se considera al medio básicamente en reposo; los flujos lentos, donde se manifiesta un comportamiento parecido al de un líquido; y los flujos rápidos, más parecidos a los gases. En todos los casos, la temperatura termodinámica del medio o de los granos no juega ningún papel en la evolución del sistema.

## 2.1 EL MEDIO GRANULAR POCO FLUIDIZADO

Incluso en un estado de reposo, los materiales granulares exhiben un comportamiento inusual. Por ejemplo, considérese un recipiente lleno de líquido y otro lleno de granos. En el primer caso la presión en el fondo del recipiente depende de la altura del líquido. En los medios granulares, por contra, la presión llega a ser independiente de la altura del material si el recipiente es lo bastante estrecho. Así, la fricción de las partículas con las paredes es suficiente para compensar el peso de la materia que se encuentra arriba [2].

Otro fenómeno interesante tiene que ver con la compacidad, esto es, con la fracción de volumen ocupado por los granos en reposo. Dependiendo de cómo se llene el recipiente, en un apilamiento desordenado de esferas la compacidad oscila entre 0.56 y un valor máximo de 0.64. Recuérdese que el valor del máximo empaquetamiento para esferas duras es 0.74 con un apilamiento de estructura "hexagonal compacta" (que es el típico apilamiento de naranjas en las fruterías), aunque esto es una conjetura que se remonta a Kepler y que todavía no ha sido probada con rigor. Perturbaciones externas del medio proporcionan un mecanismo al apilamiento para reorganizarse y modificar su densidad. Así, partiendo de una situación de baja compacidad, si agitamos verticalmente el recipiente y lo dejamos relajar, al final se alcanza una configuración estática más compacta. Podemos llamar a lo que acabamos de realizar una "agitación" (traducción libre del término inglés *tap*). Si realizamos varias agitaciones, cada vez obtenemos una compacidad mayor, hasta que se alcanza un valor máximo que depende de la fuerza de la vibración  $\Gamma$  (convenientemente escalada con la fuerza de la gravedad). Sin embargo, la relajación hasta este valor final es extremadamente lento, aproximadamente logarítmico en el número de agitaciones [3]. Si ahora aumentamos ligeramente la aceleración de la vibración, al final obtendremos un valor estacionario de compacidad, en general, menor. Podemos repetir este proceso y representar la compacidad frente a la aceleración. No obstante, hay que tener en cuenta que en la práctica es muy difícil llegar a un valor verdaderamente estacionario de la compacidad en cada paso, pues la relajación del sistema es muy lenta. En el experimento descrito en la referencia [4] se llevó a cabo este proceso aplicando  $10^5$  agitaciones para cada valor de la aceleración. Los resultados se muestran en la figura 2.1. En la curva se observa un fenómeno claro de histéresis (cuando se intenta reproducir los primeros puntos de la curva disminuyendo ahora la aceleración se encuentran valores distintos de la densidad), aunque también se observa una región (para aceleraciones mayores que un cierto valor crítico  $\Gamma^*$ ) en la que la compacidad depende aproximadamente sólo de la aceleración y no de su propia historia [4]. Por supuesto, la curva de histéresis es distinta si se escoge un número diferente de agitaciones. Estos fenómenos son

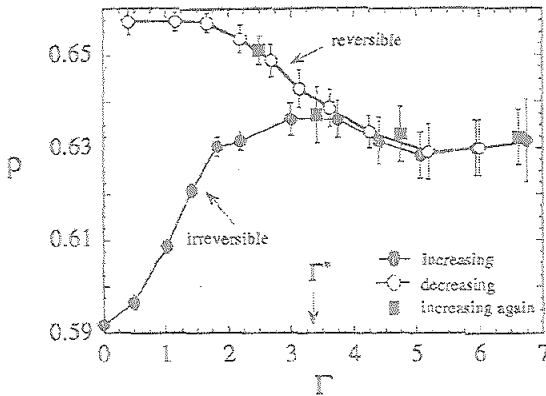


FIGURA 2.1: Dependencia de la compacidad (indicada por  $\rho$ ) con la historia de la vibración. Se consideró un apilamiento de esferas de vidrio (de 2 mm de diámetro) en una configuración inicial de baja densidad. En primer lugar se fue aumentando lentamente la aceleración de la vibración  $\Gamma$  (círculos sólidos), para luego disminuirla (símbolos huecos). Cuando se aumentaba de nuevo la vibración (cuadrados), el sistema seguía el mismo camino. Figura tomada de la referencia [4].

muy similares a los que se obtienen en los vidrios, tanto estructurales [5,6] como de spin [7,8]. En la bibliografía pueden encontrarse distintos modelos sencillos que reproducen esta fenomenología [9–11].

Otro ejemplo que demuestra el papel fundamental que juega la geometría en los materiales granulares es la segregación que se produce cuando se hace vibrar una mezcla de granos de tamaños diferentes. Mientras que en un líquido la agitación conduce a una mezcla más homogénea, en un medio granular las partículas más grandes suben hacia lo alto del recipiente. Este fenómeno tiene importancia práctica: por ejemplo, después de haber transportado cereales, se observa que los más grandes se encuentran en la superficie. Y esto incluso cuando la diferencia de tamaño es muy pequeña o cuando los granos grandes son mucho más densos.

Como estos fenómenos no dependen de la naturaleza o el detalle de los granos, parece plausible intentar formular una teoría, al estilo de la mecánica estadística del equilibrio, que sea capaz de explicar por sí misma cada uno de estos experimentos. Basándose en que la energía no se conserva en medios granulares, Edwards y sus colaboradores [12,13] propusieron al volumen total ocupado por el material como sustituto de la energía interna en el formalismo termodinámico ordinario. Así, el colectivo microcanónico estaría formado por todas las posibles configuraciones estables que ocupan un volumen total dado. La entropía se puede definir como el logaritmo del número total de estas configuraciones.

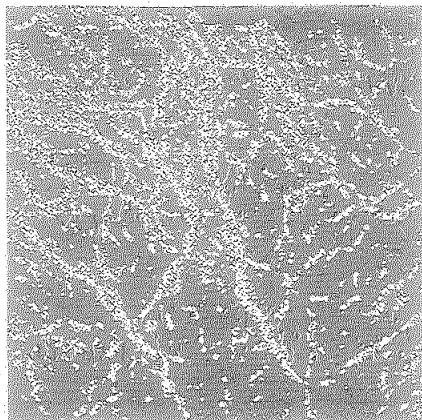


FIGURA 2.2: Visualización de las fuerzas en un medio granular. Esta imagen ha sido obtenida a partir del cambio en la polarización de la luz transmitida a través de un apilamiento de esferas de pírex sometido a una fuerza vertical. El pírex tiene la propiedad de ser birrefringente cuando está sometido a un esfuerzo mecánico. Antes de aplicar presión en la parte de arriba, se colocaron dos polarizadores cruzados de manera que no hubiera luz transmitida. Al aplicar la presión externa aparecen las redes de tensiones en forma de líneas brillantes. Para evitar la dispersión y reflexión de la luz, las esferas estaban inmersas en un fluido con el mismo índice de refracción que el pírex. Imagen tomada de la referencia [17].

De esta manera, se puede también introducir un colectivo canónico, llamando «compactividad» al análogo de la temperatura. En los fenómenos de compactación se puede utilizar este formalismo para describir el estado estacionario que se alcanza tras muchas vibraciones, obteniéndose que la compactividad depende exclusivamente de la amplitud de la aceleración. Esta teoría, formulada fenomenológicamente, ha sido recientemente corroborada en un modelo sencillo de compactación [11, 14]. A partir de esta teoría también se ha conseguido explicar el fenómeno de la segregación [15], aunque el modelo propuesto deja de lado los fenómenos convectivos que pueden activar la segregación [16]. En general, es difícil de generalizar el formalismo al caso en el que existan flujos en el sistema.

Incluso un medio granular en reposo constituido por un sólo material es intrínsecamente heterogéneo. Las fuerzas encargadas de su estabilidad no están uniformemente distribuidas [17, 18], sino a lo largo de ciertos caminos llamados «arcos» (ver figura 2.2), en analogía con los arcos y bóvedas que se utilizan en la construcción de una catedral, donde la cuidadosa ubicación de la clave de arco permite crear un amplio espacio vacío. Estas «redes de tensiones» juegan un papel importante en las propiedades mecánicas de los materiales granulares y, sobre todo, en la manera en que tales medios transmiten las vibraciones. De

hecho, la respuesta a una tensión externa puede verse afectada por la posición de un simple grano.

En las avalanchas que se producen en un montón de arena se observa una sensibilidad parecida. Supongamos que sobre una bandeja horizontal dejamos caer granos de arena (de la misma manera que en un reloj de arena). A medida que se van añadiendo partículas se va formando un montón cuya pendiente aumenta progresivamente. Esto prosigue hasta que la pendiente forma un ángulo máximo, el «ángulo de estabilidad marginal», con la horizontal. A partir de entonces el montón de arena se vuelve inestable. Añadiendo un simple grano la estructura se desmorona formándose una avalancha hasta que la superficie forma un ángulo más pequeño, el «ángulo de reposo». La razón de que existan estos dos ángulos tiene que ver con la diferencias entre las fuerzas de fricción estática y dinámicas (que ya fueron estudiadas por Coulomb [19] y se enseñan en los cursos más elementales de Física General). En la situación estable, la fuerzas de fricción estáticas son capaces de compensar la fuerza de la gravedad para ángulos por debajo del ángulo de estabilidad marginal. Una vez que ha comenzado la avalancha la fricción se reduce al valor dinámico (menor que el estático), de forma que la avalancha sólo se detiene cuando se alcanza el ángulo de reposo [20]. Reflexionando sobre estas avalanchas en los montones de arena, en 1987 se trató [21] de establecer un paralelismo entre este comportamiento crítico y lo que sucede en los sistemas en el equilibrio cerca de una transición de fase de segundo orden. Se habla de «criticalidad autoorganizada» a propósito de la capacidad que tiene el sistema de reorganizarse para alcanzar el ángulo de reposo. Además, se sugirió que el concepto de criticalidad autoorganizada podría intervenir en otros muchos fenómenos, como los seísmos, los incendios forestales, las cotizaciones de Bolsa, etc. [22]. Partiendo de este modelo, se predijo un comportamiento de tipo leyes de escala para magnitudes tales como el tamaño de las avalanchas y la frecuencia de su ocurrencia. Sin embargo, estas leyes se han verificado para granos de arroz, pero no para pilas de arena. De esta manera, la aparición de la criticalidad autoorganizada en los montones de granos parece depender de los detalles del sistema [23, 24].

En 1885 Reynolds [25] mostró que un medio granular ha de dilatarse (esto es, los granos han de espaciarse unos de otros) para poder moverse o deformarse. Se puede observar el hecho paseando por una playa, donde la arena mojada aumenta de volumen cuando se la pisa. La presión del pie deforma la arena, que se dilata para que el agua escape. El mismo efecto en la corteza terrestre juega un papel crucial para la predicción de los terremotos [26]. La transición del régimen estático al fluidizado viene dado por esta dilatación del material granular, ya que proporciona el espacio que permite a los granos moverse unos respecto de otros. Si el material se deforma lentamente, los granos se mantienen



en contacto durante mucho tiempo a lo largo de su movimiento relativo. Así, la dinámica depende dramáticamente de la forma de los granos. Muchas de las características de los empaquetamientos estáticos, como los arcos, la dependencia de la historia, etc., son también importantes en este régimen cuasiestático o de flujo lento.

## 2.2 EL RÉGIMEN DE FLUJOS RÁPIDOS

Cuando se agita suficientemente un material granular los granos empiezan a moverse de forma parecida a los átomos o moléculas que constituyen un fluido ordinario. Este régimen, en el cual los granos se mueven balísticamente mientras colisionan entre sí, se denomina régimen de flujos rápidos y es el objeto de estudio de esta memoria.

La principal diferencia entre los fluidos ordinarios y los granulares en el régimen de flujos rápidos es el carácter de las interacciones. En estos últimos son disipativas, de manera que no puede aplicarse la noción de equilibrio de Gibbs. Al contrario que en los fluidos ordinarios, para mantener a un material granular en el régimen de flujos rápidos hay que suministrar energía externamente de modo continuo, de forma que se compense la energía perdida en las colisiones. Los medios granulares son ejemplos de sistemas no aislados que muestran un comportamiento intrínsecamente irreversible. Así, los métodos de la mecánica estadística de equilibrio y la termodinámica no son directamente aplicables. No obstante, la teoría cinética todavía es válida, ya que su formulación tradicional puede extenderse fácilmente al caso de interacciones disipativas.

En un material granular, cuando se produce una colisión parte de la energía cinética se disipa transformándose en energía térmica. Sin embargo, los efectos térmicos en los medios granulares son completamente irrelevantes: al tratarse de cuerpos macroscópicos, la energía térmica de cada grano, del orden de  $k_B T$  (donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura), es completamente despreciable frente a la energía cinética (ordenada) del mismo. Por ejemplo, en la superficie de la Tierra la escala de energía relevante viene dada por la variación de la energía potencial gravitatoria, la cual a la temperatura ambiente es  $10^{12}$  veces más grande que  $k_B T$  [17]. No obstante, el movimiento errático de las partículas que constituyen un material granular fluidizado es muy parecido al movimiento térmico de las moléculas en un fluido normal. Teniendo en cuenta esta analogía es posible introducir el concepto de temperatura granular a partir de las fluctuaciones en velocidad de las partículas con respecto al movimiento global,

$$\frac{d}{dt} k_B T_{gr}(r, t) \equiv \frac{m}{2} (\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2), \quad (2.1)$$

donde  $d$  es la dimensionalidad del sistema,  $\langle \dots \rangle$  es un valor medio espacial local (por ejemplo, un promedio sobre un pequeño volumen alrededor de  $r$  que contenga suficientes partículas) y  $m$  la masa de cada grano (suponiendo que todos tienen la misma). En esta expresión  $k_B$  es la constante de Boltzmann, aunque en muchos casos se omite, de forma que la temperatura granular tiene dimensiones de energía. Para que esta definición de temperatura granular tenga sentido el sistema tiene que ser suficientemente homogéneo, de manera que exista una escala espacial «macroscópica» sobre la cual se pueda definir localmente la velocidad media  $u(r, t) \equiv \langle v \rangle$ . En los fluidos ordinarios en el equilibrio, el teorema de equipartición establece que esta definición mecánica de la temperatura (2.1) coincide con la temperatura termodinámica ordinaria. En situaciones en las que se conduce al fluido molecular o atómico lejos del equilibrio no se puede definir una temperatura termodinámica. Por el contrario, esta definición cinética de la temperatura todavía es aplicable. En lo sucesivo, cuando hablemos de la temperatura del gas inelástico nos estaremos refiriendo a la temperatura granular definida por la ecuación (2.1).

En el régimen fluidizado las interacciones entre las partículas dependen de la forma, la rugosidad de la superficie y las propiedades de los granos, y son bastante distintas para arena, arroz, azúcar o bolas de metal [27, 28].

Las posibles fuentes de disipación pueden ser la fricción entre las superficies en contacto, la deformación plástica de los granos o un mecanismo viscoso interno. Si el medio está suficientemente fluidizado, las interacciones son prácticamente instantáneas, de forma que se pueden describir a través de colisiones binarias inelásticas. Nosotros consideraremos unas leyes de colisión simplificadas, suponiendo que el conocimiento detallado de las interacciones es de menor importancia. De hecho, leyes más complicadas incrementan el número de parámetros sin dar respuestas cualitativas diferentes. En cada colisión la cantidad de movimiento total de las dos partículas se conserva, mientras que la energía cinética disminuye. El cociente entre las componentes del vector velocidad relativa normal antes y después de la colisión se denomina «coeficiente de restitución normal», y lo denotaremos por la letra  $\alpha$ . Este número puede variar entre  $\alpha = 0$  (el caso completamente inelástico) y  $\alpha = 1$  (el caso elástico). El cociente de las componentes tangenciales de la velocidad relativa es el «coeficiente de restitución tangencial» y da cuenta de la fricción entre las superficies en contacto. En esta memoria nos centraremos en el modelo más sencillo de un medio granular fluidizado, que es un gas de esferas duras inelásticas lisas (sin rugosidad). De esta manera, los grados de libertad rotacionales están desacoplados de los de translación y no hay que tenerlos en cuenta.

En general, el coeficiente de restitución normal depende de la velocidad relativa antes del impacto. Esta dependencia varía considerablemente en función

del material considerado. Bridges *et al.* [29] midieron el coeficiente de restitución normal en bloques de hielo de un tamaño que oscilaba entre centímetros y metros a una temperatura ambiente en el rango 100–150 K. El objeto de este experimento era reproducir en el laboratorio las colisiones que tienen lugar en los anillos de Saturno. Los datos experimentales muestran que el coeficiente de restitución normal disminuye rápidamente desde  $\alpha = 1$  para velocidades normales de impacto nulas hasta  $\alpha = 0.4$  para una velocidad de 0.25 cm/s. Para valores mayores de la velocidad de impacto  $\alpha$  es prácticamente constante. Recientemente se ha calculado analíticamente la dependencia con la velocidad de los coeficientes de restitución mediante un modelo de esferas viscoelásticas para velocidades de impacto no muy grandes [30,31].

Aquí, más que en las características específicas de cierto coeficiente de restitución dependiente de la velocidad, estamos interesados en las consecuencias genéricas de las colisiones inelásticas. De esta manera, consideraremos un coeficiente de restitución efectivo, independiente de la velocidad, entre esferas duras sin rugosidad, que por su simplicidad es el modelo utilizado en la mayoría de los trabajos sobre el tema. Sin embargo, una de las consecuencias de considerar un coeficiente de restitución constante es un curioso fenómeno singular denominado «colapso inelástico». Se ha mostrado que, debido a la inelasticidad, se pueden alcanzar configuraciones en el sistema en la que se producen infinitas colisiones durante un intervalo de tiempo finito [32,33]. El mecanismo es cualitativamente análogo al de una pelota rebotando en el suelo. Sea  $\alpha$  el coeficiente de restitución entre una pelota de tenis y el suelo. Supongamos que lanzamos la pelota hacia arriba con una velocidad  $v_0$ . Entonces la pelota rebotará en el suelo, disminuyendo progresivamente su velocidad hasta que se para. Un cálculo sencillo muestra que el tiempo que transcurre entre cada dos botes es  $2v_n/g$ , donde  $g$  es la aceleración de la gravedad y  $v_n$  la velocidad de la pelota en el rebote  $n$ . Al ser la colisión inelástica  $v_n = \alpha v_{n-1}$ . De esta manera, el intervalo de tiempo total  $\Delta t$  que transcurre hasta que la pelota se para será la suma de todos estos tiempos:  $\Delta t = (2v_0/g) \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n = 2v_0/[g(1-\alpha)]$ . Como  $0 < \alpha < 1$ , entonces  $\Delta t$  se mantiene finito. Sin embargo, en ese tiempo la pelota ha colisionado con el suelo infinitas veces. El mismo fenómeno sucede en un gas de esferas duras inelásticas (en ausencia de gravedad), involucrándose en el colapso tres o más partículas. Es decir, se realizan infinitas colisiones en un tiempo finito, acercándose las partículas implicadas progresivamente hasta quedarse prácticamente unidas. En una dimensión [33] se ha encontrado que para un sistema de  $N$  partículas siempre existe un  $\alpha$  crítico por encima del cual no existe el colapso inelástico. En simulaciones de dinámica molecular de dimensión superior [34] se ha observado el mismo resultado. Generalmente, las partículas involucradas en el colapso forman una línea casi recta en el espacio, lo que in-

dica que el fenómeno es básicamente unidimensional. Estrictamente, el colapso inelástico es una patología del modelo que resulta de considerar un coeficiente de restitución constante. Como ya se ha mencionado, en realidad el coeficiente de restitución depende de la velocidad relativa en el impacto, de forma que cuando ésta tiende a cero la colisión tiende a volverse elástica ( $\alpha \rightarrow 1$ ), superando  $\alpha$ , tras algunas colisiones, el valor crítico requerido para el colapso. Sin embargo, se sabe que a velocidades relativas extremadamente pequeñas, fuerzas de tipo adhesivo comienzan a gobernar la interacción entre las partículas [35]. Está por ver si un modelo más realista de la colisión produce un efecto de agrupamiento parecido al colapso inelástico, aunque no se realicen infinitas colisiones. Al ser el colapso inelástico un fenómeno local no está claro si el propio desorden del sistema, con un coeficiente de restitución dependiente de la velocidad, es capaz de aniquilar este agrupamiento de partículas. No obstante, este efecto es de suma importancia en las simulaciones de Dinámica Molecular, donde se reproduce la dinámica de un gas de esferas duras inelásticas, ya que el ordenador no es capaz de calcular las infinitas colisiones que implican el colapso. Para evitarlo se puede utilizar un coeficiente de restitución que se vuelva uno para velocidades suficientemente pequeñas [36].

En los últimos años se han realizado varios estudios experimentales sobre el comportamiento colectivo de partículas esféricas relativamente lisas [37–40]. El modelo de esferas duras inelásticas ofrece un punto de partida excelente para comprender lo que sucede en estos experimentos. Por ejemplo, se ha observado que cuando se hace vibrar verticalmente un material granular se crean espontáneamente ondas en la superficie del mismo. Éstas pueden formar excitaciones localizadas estables, llamadas «oscilones» [41], o extenderse sobre todo el sistema, formándose estructuras regulares como hexágonos, cuadrados o rayas [42, 43] (véase la figura 2.3). Estas estructuras son muy parecidas a las que se obtienen vibrando verticalmente un fluido normal, observadas por vez primera por Faraday [44, 45]. Sin embargo, a diferencia con el experimento de Faraday, en los fluidos granulares se observa un fenómeno de histéresis en la transición de una estructura a otra. Con todo, las simulaciones de Dinámica Molecular de esferas duras lisas con un coeficiente de restitución constante (excepto para velocidades tendiendo a cero, para evitar el colapso inelástico) son capaces de reproducir con fidelidad las estructuras regulares que se observan en estos experimentos [46].

Los medios granulares también han despertado gran interés en el campo de la astrofísica. Henri Poincaré fue el primero que se dio cuenta de la importancia de las colisiones inelásticas en los cuerpos celestiales. En los últimos años se han encontrado aplicaciones en los discos galácticos, la nebulosa del sistema solar y los anillos planetarios [47, 48]. Por ejemplo, en la referencia [29] se analiza la

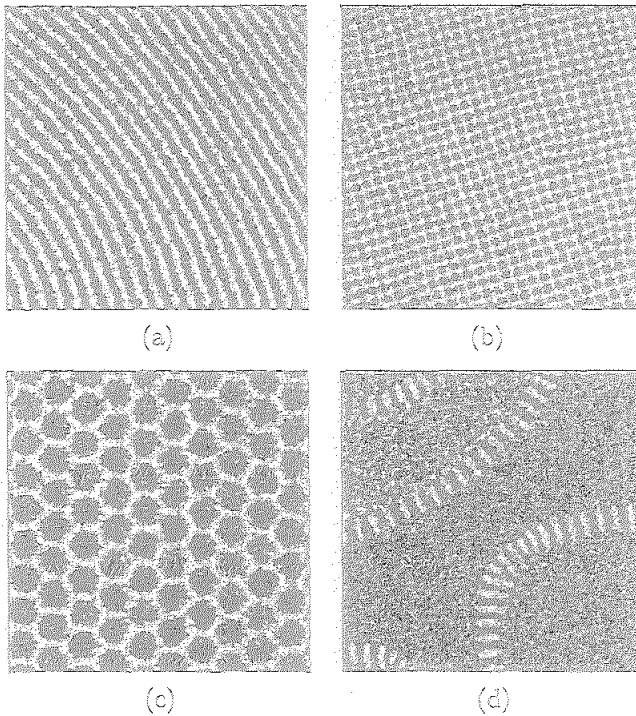


FIGURA 2.3: Estructuras subarmónicas en una capa delgada de un medio granular vibrado verticalmente. Las fotografías muestran vistas de pájaro de una vasija cilíndrica grande rellena con esferas de latón (de 0.165 mm de diámetro) con una profundidad de 8 esferas. Variando la amplitud y la frecuencia de la vibración (sinusoidal) se obtienen diferentes estructuras: rayas (a), cuadrados (b) y hexágonos (c), estos últimos cuando se conduce al sistema a dos frecuencias. En (d) coexisten interfases altamente curvadas entre regiones planas con un desfase de 180 grados entre diferentes partes de la superficie. Imágenes tomadas de la referencia [4].

estructura y la estabilidad de los anillos de Saturno a partir de las colisiones inelásticas entre las partículas de hielo que los constituyen. Estos anillos son muy delgados, quizás sólo unas pocas decenas de metros [49]. Cuando Galileo observó Saturno (dos años después de sus primeras observaciones) se sorprendió al descubrir que los anillos que había visto anteriormente habían desaparecido. Ahora sabemos que en ese momento Galileo estaba viendo los anillos de lado, lo cual los hace indetectables desde la tierra. Se puede comprender por qué los anillos son tan delgados considerando lo que sucede en una colisión inelástica, como se muestra en la figura 2.4. Imagínese dos partículas orbitando alrededor de Saturno en la misma dirección (del eje  $x$ ), pero con órbitas que estén

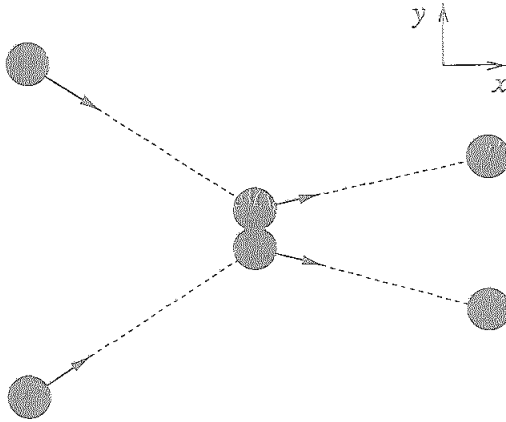


FIGURA 2.4: Las colisiones inelásticas entre las partículas tienden a mantener los anillos de Saturno muy delgados.

ligeramente inclinadas la una de la otra. Como resultado de la colisión las componentes  $y$  de sus velocidades disminuyen, mientras que las componentes  $x$  se mantienen prácticamente inalteradas. Este proceso tiende a disminuir el grosor del disco hasta que otros efectos son importantes [49].

Los anillos planetarios se parecen a etapas anteriores de nuestro sistema solar, en la que una vasta nube de gas y polvo orbitaba alrededor del Sol. En la referencia [50] se propone un mecanismo de formación de agregados (que se analizará con detalle en la sección 5.4) característico de los medios granulares para explicar los primeros pasos de la formación de los planetas, en concreto, la condensación de la nebulosa en planetesimales, que se definen como partículas suficientemente masivas (tamaños del orden de kilómetros) como para que sea importante la interacción gravitatoria entre ellas.

En resumen, la física de los materiales granulares muestra una gran variedad de fenómenos con muchas aplicaciones posibles, abarcando desde lo más mundano a lo celestial.

## CAPÍTULO 3

# ECUACIONES CINÉTICAS PARA MEDIOS INELÁSTICOS

### 3.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se formulan, a partir de primeros principios, distintos modelos cinéticos para un gas de «esferas» duras inelásticas de diámetro  $\sigma$  y dimensión  $d$  ( $d = 2$  discos y  $d = 3$  esferas). En primer lugar se resuelve la dinámica del sistema al nivel de la mecánica estadística, obteniéndose así una generalización de la ecuación de Liouville para esferas duras inelásticas. A partir de ella, por integración resulta la jerarquía de ecuaciones BBGKY para las funciones de distribución reducidas. El formalismo está basado en los operadores de colisión binaria, introducidos para la dinámica de esferas duras elásticas hace 31 años [51] y recientemente extendidas para el caso elástico [52]. A partir de la jerarquía BBGKY introducimos la ecuación de Boltzmann y sus ecuaciones hidrodinámicas asociadas. También se incluye una breve referencia a la ecuación de Enskog para gases densos. Finalmente, al final del capítulo se plantea una generalización del modelo cinético BGK para el caso de partículas inelásticas.

En el resto de esta sección introduciremos las leyes de interacción que rigen la dinámica de esferas duras inelásticas. Por definición las colisiones son instantáneas, de manera que se conserva la cantidad de movimiento total, aunque no necesariamente la energía. Sea  $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$  el vector de velocidad relativa de dos partículas que van a colisionar. Definimos la colisión inelástica de las partículas de igual masa  $m$  de acuerdo con la ley (ver figura 3.1):

$$\mathbf{v}_{12}^* = \mathbf{v}_{12} - (1 + \alpha)(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma})\hat{\sigma}. \quad (3.1)$$

En esta expresión  $\mathbf{v}_{12}^*$  es el vector de velocidad relativa después de la colisión, mientras que  $\hat{\sigma} = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\sigma$  es el vector unitario que une los centros de masas

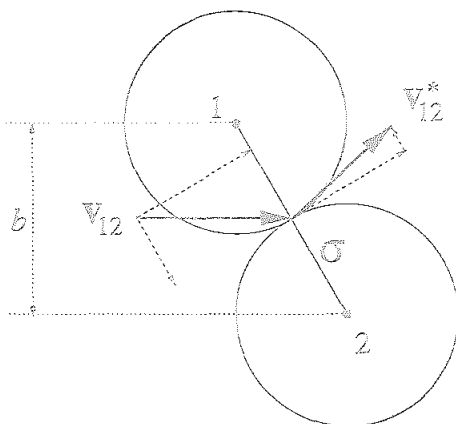


FIGURA 3.1: Colisión inelástica con la ley de reflexión  $\mathbf{v}_{12}^* \cdot \hat{\sigma} = -\alpha \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}$ .

de las dos partículas desde la partícula blanco 2. El parámetro adimensional  $\alpha$  se denomina coeficiente de restitución normal y puede tomar cualquier valor dentro del intervalo  $0 < \alpha \leq 1$ . El límite  $\alpha = 1$  equivale a esferas duras elásticas. En esta memoria consideraremos un coeficiente de restitución constante, esto es, independiente de la velocidad de impacto.

Como la velocidad del centro de masas no se modifica en la colisión, las partículas cambian su velocidad de acuerdo con

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

La ley de colisión (3.1) puede invertirse siempre que  $\alpha$  sea distinto de cero,

$$\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_{12}^* - \alpha^{-1}(1 + \alpha)(\mathbf{v}_{12}^* \cdot \hat{\sigma})\hat{\sigma}. \quad (3.3)$$

De esta manera, excepto para  $\alpha = 0$ , podemos reconstruir las velocidades iniciales de las partículas a partir de las que tienen después de la colisión. Esto implica que si definimos un punto del espacio fásico como el conjunto de todas las posiciones y velocidades de las partículas (que denotaremos por  $\Gamma$ ), las distintas trayectorias en ese espacio no se cruzan y están unívocamente determinadas por el valor de  $\Gamma$  en cualquier instante.

El cambio de energía cinética en cada colisión es

$$\Delta E = -\frac{m_0}{4}(1 - \alpha^2)(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma})^2. \quad (3.4)$$



Se define el parámetro de inelasticidad como  $\epsilon = \sqrt{1 - \alpha^2}$ . Este parámetro tiende a cero en el límite elástico,  $\alpha \rightarrow 1$ . Se suele denominar «límite cuasielástico» a la región definida por  $\epsilon \ll 1$ .

## 3.2 EL DESARROLLO EN COLISIONES BINARIAS

El objetivo de esta sección es describir la formulación de Liouville para la dinámica de esferas duras disipativas, la cual es esencial para obtener la jerarquía BBGKY de las funciones de distribución reducidas, como veremos en la sección siguiente.

Sea un colectivo de Gibbs con una cierta densidad de probabilidad inicial  $\rho(\Gamma, 0)$ ; donde  $\Gamma = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ , con  $x_i = \{r_i, v_i\}$ , es un punto en el espacio fásico del sistema constituido por  $N$  partículas. Si  $\alpha$  es distinto de cero las trayectorias no se cruzan, lo que permite formular una ley de conservación de la probabilidad. En una región arbitraria  $R_0$  del espacio fásico, deberá cumplirse

$$\int_{R_0} d\Gamma \rho(\Gamma, 0) = \int_{R_t} d\Gamma \rho(\Gamma, t), \quad (3.5)$$

donde  $R_t$  es la región del espacio fásico en que se ha convertido  $R_0$  en el instante  $t$  de acuerdo con la dinámica de esferas duras. De esta manera, el valor esperado de una cantidad dinámica  $A(\Gamma)$  se podrá escribir como:

$$\langle A \rangle(t) \equiv \int d\Gamma A(\Gamma) \rho(\Gamma, t) = \int d\Gamma \rho(\Gamma, 0) A(\Gamma_t(\Gamma)), \quad (3.6)$$

siendo  $\Gamma_t(\Gamma)$  la posición fásica del sistema tras un intervalo de tiempo  $t$  partiendo de  $\Gamma$ .

Definamos ahora el operador de evolución temporal  $S_t$ , para  $t > 0$ , de la siguiente manera:

$$S_t A(\Gamma) = A(\Gamma_t(\Gamma)). \quad (3.7)$$

Como la relación (3.6) se verifica para una función  $A(\Gamma)$  arbitraria, podremos escribir la ley de evolución de la densidad de probabilidad del sistema completo como

$$\rho(\Gamma, t) = S_t^\dagger \rho(\Gamma, 0), \quad (3.8)$$

donde  $S_t^\dagger$  es el adjunto de  $S_t$ , esto es, para dos funciones arbitrarias  $A(\Gamma)$  y  $B(\Gamma)$  debe cumplirse

$$\int d\Gamma A(\Gamma) S_t B(\Gamma) = \int d\Gamma B(\Gamma) S_t^\dagger A(\Gamma). \quad (3.9)$$

En sistemas hamiltonianos se cumple  $S_t^\dagger = S_{-t}$ .

Sin embargo, el operador  $S_t$  no está todavía unívocamente definido. La razón es que no está definida la dinámica de las configuraciones  $\Gamma$  en las que se produzca el solapamiento de algunas de las esferas, pues dichas configuraciones carecen de sentido físico. No obstante, podemos evitar este problema fácilmente, ya que en la ecuación (3.6) sólo aparece la combinación  $\rho(\Gamma, 0)S_t$ , y la densidad de probabilidad inicial  $\rho(\Gamma, 0)$  debe asignar un peso nulo a las configuraciones donde se produzca solapamiento. Basta entonces considerar  $W_N(\Gamma)S_t$ , con  $W_N(\Gamma) = \prod_{i < j} W(r_{ij})$ , donde  $W(r)$  es la función solapamiento:

$$W(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r < \sigma \text{ (solapamiento)} \\ 1 & \text{si } r > \sigma \text{ (sin solapamiento)} \end{cases} \quad (3.10)$$

De esta manera, podemos trabajar con un operador de evolución  $S_t$  definido para todas las configuraciones del espacio físico sin importarnos cómo actúa en las configuraciones con solapamiento. Aquí utilizaremos un operador de evolución basado en los operadores de colisión binaria  $T(ij)$  [31, 52]. Los detalles matemáticos se describen en el apéndice A.

Podemos construir el operador de evolución  $S_t$  (para  $t \geq 0$ ) a partir del operador de evolución de dos cuerpos  $S_t(12)$ , éste y su adjunto vienen dados por (apéndice A):

$$S_t(12) = \exp[\imath t L^0(12) + t T(12)], \quad (3.11)$$

$$S_t^\dagger(12) = \exp[-\imath t L^0(12) + t \bar{T}(12)], \quad (3.12)$$

donde  $L^0(12) = L_1^0 + L_2^0$  y  $L_i^0 = \mathbf{v}_i \cdot \partial / \partial \mathbf{r}_i$  es el operador de evolución libre. El operador de colisión binaria  $T(12)$  se puede escribir como (apéndice A)

$$T(12) = \sigma^{d-1} \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} < 0} d\hat{\sigma} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}| \delta(r_{12} - \sigma) [b(12) - 1], \quad (3.13)$$

donde  $\sigma = \sigma \hat{\sigma}$  y  $b(12)$  es un operador que reemplaza todas las velocidades  $\mathbf{v}_i$  ( $i = 1, 2$ ) que aparezcan a su derecha por las postcolisionales  $\mathbf{v}_i^*$  según (3.2), es decir,

$$b(12)A(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2) = A(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1^*, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2^*), \quad (3.14)$$

con el vector unitario de la colisión (3.2) definido como  $\hat{\sigma} = \mathbf{r}_{12} / r_{12}$ . El operador adjunto de  $T(12)$  viene dado por

$$\bar{T}(12) = \sigma^{d-1} \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \left[ \frac{1}{\sigma^2} \delta(r_{12} - \sigma) b^{-1}(12) - \delta(r_{12} + \sigma) \right], \quad (3.15)$$

donde  $b^{-1}$  es el operador inverso de  $b$ , esto es,  $bb^{-1} = b^{-1}b = I$ . Una propiedad interesante del operador  $T$  es que

$$T(12)A(12) = 0 \quad (3.16)$$

cuando  $A(12)$  es una función arbitraria de  $(v_1 + v_2)$ . Esta propiedad se deduce directamente de la conservación de la cantidad de movimiento en la colisión. Entonces, la propiedad equivalente para  $\bar{T}(12)$  es

$$\int dx_1 dx_2 A(12)\bar{T}(12)B(12) = 0, \quad (3.17)$$

siendo  $A(12)$  el mismo tipo de función que antes y  $B(12)$  una función cualquiera.

En el apéndice A se encuentran, para el operador de evolución del sistema completo y su adjunto, las expresiones

$$W_N S_t = W_N \exp[tL^0 + t \sum_{i < j} T(ij)], \quad (3.18)$$

$$S_t^\dagger W_N = \exp[-tL^0 + t \sum_{i < j} \bar{T}(ij)]W_N, \quad (3.19)$$

donde  $L^0 = \sum_i L_i^0$ . Se ha incluido explícitamente la función de solapamiento  $W_N$ , pues es el operador conjunto el que tiene sentido físico.

### 3.3 JERARQUÍA DE ECUACIONES BBGKY

La evolución temporal de la densidad de probabilidad del sistema completo  $\rho(\Gamma, t)$  viene dada por la ecuación de pseudo-Liouville. El término «pseudo» proviene de que las fuerzas de interacción entre las esferas duras son impulsivas. En sistemas hamiltonianos esta ecuación se denomina ecuación de Liouville y es una expresión de la incompresibilidad del flujo en el espacio fásico. En el caso de los sistemas disipativos, los cuales por definición son irreversibles en el tiempo, las colisiones inelásticas entre las partículas tienden a contraer el espacio fásico. A partir de las ecuaciones (3.8) y (3.19) se obtiene fácilmente una ecuación diferencial para la densidad de probabilidad del sistema completo, esto es, la ecuación de pseudo-Liouville:

$$(\partial_t + L^0)\rho(\Gamma, t) = \sum_{i < j} \bar{T}(ij)\rho(\Gamma, t). \quad (3.20)$$

Se puede dar una representación equivalente de la evolución del sistema en términos de las funciones de distribución reducidas  $f_r$  ( $r=1, 2, \dots$ ), definidas como

$$f_r(x_1, \dots, x_r, t) \equiv \frac{N!}{(N-r)!} \int dx_{r+1} \dots dx_N \rho(x_1, \dots, x_N, t). \quad (3.21)$$

Integrando la ecuación (3.20) y utilizando la propiedad (3.17) se obtiene la jerarquía de ecuaciones BBGKY:

$$\begin{aligned} & \left[ \partial_t + L^0 - \sum_{1 \leq i < j \leq r} \bar{T}(ij) \right] f_r(x_1, \dots, x_r, t) \\ & = \sum_{l=1}^r \int dx_{r+1} \bar{T}(l, r+1) f_{r+1}(x_1, \dots, x_{r+1}, t). \end{aligned} \quad (3.22)$$

La primera ecuación de la jerarquía puede escribirse explícitamente como

$$\begin{aligned} (\partial_t + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla_1) f(x_1, \mathbf{v}_1, t) & = \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_2 \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \\ & \times \left[ \frac{1}{\sigma^2} f_2(x_1, \mathbf{v}_1^{**}, x_1 - \sigma, \mathbf{v}_2^{**}, t) \right. \\ & \left. - f_2(x_1, \mathbf{v}_1, x_1 + \sigma, \mathbf{v}_2, t) \right], \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde  $f \equiv f_1$  y  $\mathbf{v}_i^{**}$  son las velocidades que llevan por efecto de una colisión de vector  $\hat{\sigma}$  a  $\mathbf{v}_i$ , es decir,  $b^{-1}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\} = \{\mathbf{v}_1^{**}, \mathbf{v}_2^{**}\}$ .

A partir de la función de distribución de una partícula podemos definir los campos hidrodinámicos de la manera convencional en teoría cinética,

$$n(x, t) = \int d\mathbf{v} f(x, \mathbf{v}, t), \quad (3.24)$$

$$n(x, t) \mathbf{u}(x, t) = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(x, \mathbf{v}, t), \quad (3.25)$$

$$\frac{d}{2} n(x, t) k_B T(x, t) = \int d\mathbf{v} \frac{m}{2} [\mathbf{v} - \mathbf{u}(x, t)]^2 f(x, \mathbf{v}, t). \quad (3.26)$$

Hemos representado por  $n$  la densidad numérica de partículas,  $\mathbf{u}$  la velocidad media y  $T$  la temperatura granular, siendo  $k_B$  la constante de Boltzmann. El punto de partida para obtener ecuaciones que involucren estas magnitudes hidrodinámicas consiste en multiplicar la primera ecuación de la jerarquía (3.23) por una función arbitraria  $\psi(\mathbf{v}_1)$  y posteriormente integrar para todas las posibles velocidades  $\mathbf{v}_1$ , obteniéndose así

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{v}_1 \psi(\mathbf{v}_1) f(x_1, \mathbf{v}_1, t) + \frac{\partial}{\partial x_1} \cdot \int d\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1 \psi(\mathbf{v}_1) f(x_1, \mathbf{v}_1, t) \\ & = \int d\mathbf{v}_1 dx_2 f_2(x_1, x_2, t) T(12) \psi(\mathbf{v}_1) \\ & = \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) f_2(x_1, \mathbf{v}_1, x_1 + \sigma, \mathbf{v}_2, t) [\psi(\mathbf{v}_1^*) - \psi(\mathbf{v}_1)], \end{aligned} \quad (3.27)$$

donde se ha utilizado que el operador  $T(12)$  es el adjunto de  $\bar{T}(12)$ . Haremos uso de esta expresión en la sección siguiente.

### 3.4 LA ECUACIÓN DE BOLTZMANN

La ecuación de Boltzmann se obtiene reteniendo sólo los términos dominantes en el límite de baja densidad. Esto nos lleva a la denominada hipótesis de «caos molecular», que consiste en despreciar las correlaciones dinámicas en las velocidades de dos partículas que van a colisionar, de manera que la función de distribución de dos partículas factoriza en funciones de distribución monoparticulares. Ello equivale a sustituir, en el segundo miembro de la ecuación (3.23),  $f_2$  por

$$f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t) = f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t), \quad (3.28)$$

cuando  $|\mathbf{r}_{12}| = \sigma$  y  $\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{v}_{12} < 0$ . Además, en el límite de densidades pequeñas parece razonable despreciar las correlaciones espaciales asociadas al tamaño finito de las partículas. De esta manera, considerando una escala espacial mucho mayor que el diámetro de las partículas, podemos despreciar  $\sigma$  frente a  $\mathbf{r}_1$  en el argumento de  $f_2$  en la ecuación (3.23). Insertando estas aproximaciones en (3.23) se obtiene una ecuación cerrada para la función de distribución monoparticular  $f$ , que es la ecuación de Boltzmann para esferas duras inelásticas

$$(\partial_t + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) = J_B[\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1 | f(t)], \quad (3.29)$$

donde  $J_B$  es el operador de colisión de Boltzmann inelástico,

$$J_B[\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1 | f(t)] = \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_2 \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \times \left[ \frac{1}{\alpha^2} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1^{**}, t) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2^{**}, t) - f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2, t) \right]. \quad (3.30)$$

En esta expresión  $\mathbf{v}_1^{**}$  y  $\mathbf{v}_2^{**}$  son las velocidades precolisionales:

$$\mathbf{v}_1^{**} = \mathbf{v}_1 - \frac{1}{2} \alpha^{-1} (1 + \alpha) (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}, \quad (3.31)$$

$$\mathbf{v}_2^{**} = \mathbf{v}_2 + \frac{1}{2} \alpha^{-1} (1 + \alpha) (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}. \quad (3.32)$$

La ecuación de Boltzmann también puede introducirse de forma heurística, análogamente a como se hace comúnmente en el caso elástico [53].

Existe una extensión semi-fenomenológica de la ecuación de Boltzmann para densidades más altas, la ecuación de Enskog-Boltzmann o simplemente de Enskog [52, 53]. Esta se obtiene reemplazando  $f_2$  en el segundo miembro de la ecuación (3.23) por  $\chi[r_1, r_2 | n] f(r_1, v_1, t) f(r_2, v_2, t)$ . La funcional  $\chi$  es la función de correlación de pares en el equilibrio, que puede ser determinada en términos de la funcional de energía libre para un estado inhomogéneo [54]. Esta versión del caos molecular también desprecia las correlaciones en velocidad, pero tiene en cuenta las correlaciones introducidas por los efectos de volumen excluido.

A partir de la ecuación de Boltzmann se pueden obtener fácilmente unas ecuaciones de balance macroscópicas que rigen la dinámica de las variables hidrodinámicas. Teniendo en cuenta la simetría en  $v_1$  y  $v_2$  que nos proporciona la hipótesis de caos molecular, podemos escribir la ecuación de evolución del valor esperado de cualquier función  $\psi(v)$ , ecuación (3.27), como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int dv_1 \psi(v_1) f(r_1, v_1, t) + \frac{\partial}{\partial r_1} \cdot \int dv_1 v_1 \psi(v_1) f(r_1, v_1, t) \\ = \frac{1}{2} \sigma^{d-1} \int dv_1 dv_2 \int_{v_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (v_{12} \cdot \hat{\sigma}) f(r_1, v_1, t) f(r_1, v_2, t) \Delta\psi, \end{aligned} \quad (3.33)$$

donde  $\Delta\psi = \psi(v_1^*) + \psi(v_2^*) - \psi(v_1) - \psi(v_2)$  es el cambio de  $\psi$  debido a una colisión. Si  $\psi(v)$  es un invariante de colisión, entonces  $\Delta\psi = 0$ , anulándose, por tanto, el término de colisión. Haciendo uso de la ecuación (3.33) con  $\psi(v) = 1, mv, mv^2/2$  se obtienen las siguientes ecuaciones de evolución para los campos hidrodinámicos<sup>1</sup>

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (nu), \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u = -(nm)^{-1} \nabla \cdot P, \quad (3.35)$$

$$\frac{d}{2} nk_B \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{d}{2} nk_B u \cdot \nabla T = -(\nabla u) : P - \nabla \cdot q - (1 - \alpha^2)w, \quad (3.36)$$

donde

$$P(x, t) = \int dv m [v - u(x, t)] [v - u(x, t)] f(x, v, t) \quad (3.37)$$

es el tensor de presiones,

$$q(x, t) = \int dv \frac{m}{2} [v - u(x, t)]^2 [v - u(x, t)] f(x, v, t) \quad (3.38)$$

<sup>1</sup>El símbolo «:» denota contracción diádica. En este contexto, para dos tensores de segundo orden A y B lo podemos definir como  $A : B = \text{Tr}(AB^+)$ , donde «+» denota transposición.

es el flujo de calor, y

$$w(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{8} m \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma})^3 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t) \quad (3.39)$$

es un término fuente que describe la disipación de energía cinética debida a las colisiones. Este término puede verse también como una funcional bilineal de  $f$ . Según nos interese nos referiremos a él como  $w(\mathbf{r}, t)$  o  $w[f, f]$ . Además, podemos simplificarlo ligeramente realizando la integración respecto del ángulo sólido  $\hat{\sigma}$ , de forma que para dos funciones arbitrarias  $f$  y  $g$

$$w[f, g] = \frac{m \sigma^{d-1} \pi^{(d-1)/2}}{8 \Gamma(\frac{d+3}{2})} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|^3 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) g(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t). \quad (3.40)$$

En el apéndice B se describe un método para calcular todas las integrales en un espacio de dimensión genérica  $d$  que aparecen en la memoria.

### 3.5 MODELOS CINÉTICOS

Debido a la dificultad que entraña resolver la ecuación de Boltzmann aún en el caso de gases elásticos, con frecuencia se han utilizado diversos modelos que conservan las propiedades físicas más relevantes ecuación de Boltzmann, en concreto los invariantes colisionales y el teorema H, pero que son más tratables desde un punto de vista matemático. En numerosas ocasiones, estos modelos cinéticos han sido capaces de proporcionar descripciones cuantitativas de estados muy lejos del equilibrio [55], mientras que el número de soluciones analíticas conocidas de la ecuación de Boltzmann es muy limitado. En esta sección se discute brevemente una generalización de estos modelos al caso de colisiones inelásticas.

Consideremos la clase de modelos cinéticos denominados «del tiempo de relajación», que tienen la forma

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) f = -\nu(f - f_0). \quad (3.41)$$

La cantidad  $\nu$  es una frecuencia de colisión característica. En el caso de esferas duras, por análisis dimensional resulta que puede escribirse como

$$\nu = C n \sigma^{d-1} \left( \frac{\pi k_B T}{m} \right)^{1/2}, \quad (3.42)$$

donde  $C$  es una constante adimensional que debe ser ajustada a priori en cada problema concreto. Más adelante volveremos a ella. La función  $f_0 = f_0[f]$  es una funcional de  $f$  a especificar. Para el caso de colisiones elásticas, Bhatnagar,

Gross y Krook [56] (modelo BGK) propusieron  $f_0 = f_M$ , donde  $f_M$  es la función de distribución de equilibrio local

$$f_M = n \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{d/2} \exp \left[ -\frac{m(v-u)^2}{2k_B T} \right], \quad (3.43)$$

con  $n$ ,  $u$  y  $T$  dependientes de  $r$  y  $t$ . Básicamente, el modelo BGK presupone que las colisiones tienden a restaurar el equilibrio local con un tiempo medio de relajación proporcional al tiempo medio entre colisiones en dicho equilibrio.

En el contexto de los gases inelásticos se han propuesto varios modelos de ecuación cinética [57-59], los cuales han sido utilizados en diversas situaciones [60-63]. Todos ellos están formulados de forma que verifiquen las mismas ecuaciones de balance que la ecuación de Boltzmann, es decir, las ecuaciones (3.34)-(3.39), aunque quizás el más consistente es el que se expone en la referencia [59]. En este modelo se considera

$$f_0[f] = f_M + \frac{\zeta}{2\nu} \frac{\partial}{\partial v} \cdot [(v-u)f], \quad (3.44)$$

donde  $\zeta = 2[dnk_B T]^{-1}(1 - \alpha^2)w[f]f$  está relacionado con el término fuente de disipación de la energía cinética (3.39). La ecuación cinética que se obtiene con esta elección es pues

$$\partial_t f + v \cdot \nabla f - \frac{1}{2} \zeta \frac{\partial}{\partial v} \cdot [(v-u)f] = -\nu(f - f_M). \quad (3.45)$$

Desde un punto de vista físico, este modelo cinético es equivalente al modelo BGK salvo por la disipación, que se introduce como un término de fuerza dependiente de la velocidad. En otras palabras, este modelo describe la dinámica de un conjunto de partículas elásticas (tratando las colisiones entre ellas de la misma manera que el modelo BGK) bajo la acción de una fuerza viscosa dada por

$$F = -\frac{m}{2} \zeta (v-u). \quad (3.46)$$

Tal y como se construyen [58], es de esperar que estos modelos proporcionen una buena aproximación para los primeros momentos de la función de distribución de velocidades de un gas diluido. Es fácil comprobar que la función de distribución gaussiana (3.43) es solución de la ecuación cinética (3.45) para una situación homogénea en el espacio (con  $u = 0$ ). En el capítulo 5 comprobaremos que esta solución es una buena aproximación para describir el estado de enfriamiento homogéneo de un gas granular.

Utilizando el método de Chapman-Enskog se pueden obtener los coeficientes de transporte asociados a estos modelos cinéticos [59]. La dependencia



funcional de estos coeficientes respecto de los campos hidrodinámicos es la misma que la que se sigue de la ecuación de Boltzmann (sección 5.3), aunque la dependencia del coeficiente de restitución es distinta. Sin embargo, con objeto de obtener una buena descripción cuantitativa, se puede utilizar la constante indeterminada  $C$  para que un coeficiente de transporte dado (por ejemplo, la conductividad térmica si trabajamos en un problema donde la conducción del calor es el mecanismo dominante) coincida exactamente con el valor del coeficiente de transporte de Boltzmann en el límite elástico.

## CAPÍTULO 4

# SIMULACIÓN DE LA ECUACIÓN DE BOLTZMANN

### 4.1 INTRODUCCIÓN

En las últimas dos décadas se ha desarrollado un método de simulación de Monte Carlo preciso y eficiente que reproduce la dinámica de un gas diluido descrito por la ecuación de Boltzmann. Aquí utilizamos el término de Monte Carlo en el sentido de que no se intenta simular la dinámica exacta del fluido, tal como hace el método de simulación de Dinámica Molecular [64], sino las trayectorias típicas que se dan en el gas, utilizando números aleatorios. El método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC) fue desarrollado por Bird [65] en los años setenta y hasta la fecha ha probado ser de gran utilidad para el estudio de gases diluidos en problemas tanto formales como aplicados o de interés tecnológico [66]. Así, se han desarrollado numerosas adaptaciones a situaciones reales en campos tan diversos como la Aeronáutica o la Ingeniería Química. En el contexto de la teoría cinética, el método ha resultado ser eficaz no sólo para construir soluciones de la ecuación de Boltzmann, sino también para describir la dinámica de las correlaciones espaciales en gases diluidos lejos del equilibrio [67]. Además, extender el método al caso de colisiones inelásticas entre las partículas no representa ninguna dificultad.

### 4.2 PROBABILIDAD DE COLISIÓN

Para describir adecuadamente el método DSMC es conveniente conocer la densidad de probabilidad de que dos partículas con velocidades  $v_1$  y  $v_2$  colisionen. En principio, esta probabilidad debe ser proporcional a la densidad de probabilidad de que se encuentren una de la otra a una distancia  $\sigma$  (el diámetro de

las partículas) con esas velocidades, es decir, proporcional a  $\rho_2(r_1, v_1, r_2, v_2, t)$  con  $|r_1 - r_2| = \sigma$ . Sin embargo, éste no puede ser el único factor, ya que si las dos partículas tienen la misma velocidad no pueden colisionar entre ellas (a menos que alguna colisione primero con una tercera, pero entonces cambia su velocidad), y sin embargo  $\rho_2(r_1, v, r_2, v, t)$  no tiene por qué ser cero. Para calcular la probabilidad de una colisión es conveniente contar primero el número medio de colisiones por unidad de tiempo  $\Phi(t)$  que se producen en el sistema. Este número vendrá dado por

$$\Phi(t) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \langle \delta(t - t_{ij}^*) \rangle, \quad (4.1)$$

donde  $N$  es el número total de partículas y  $t_{ij}^*$  el instante de tiempo en el que se produce la colisión de la partícula  $i$  con la partícula  $j$ . En el apéndice A encontramos una expresión para estas deltas de Dirac, ecuación (A.16),

$$\delta(t - t_{12}^*) = \sigma^{d-1} \int d\hat{\sigma} \theta(-v_{12} \cdot \hat{\sigma}) |\hat{\sigma} \cdot v_{12}| \delta(r_{12} - \sigma \hat{\sigma}), \quad (4.2)$$

donde  $\theta(x)$  es la función escalón. Utilizando esta ecuación podemos escribir el número medio de colisiones por unidad de tiempo en un instante  $t$  como

$$\begin{aligned} \frac{N(N-1)}{2} \langle \delta(t - t_{12}^*) \rangle &= \frac{N(N-1)}{2} \int dr_1 dr_2 dv_1 dv_2 \rho(r_1, v_1, r_2, v_2, t) \\ &\quad \times \sigma^{d-1} \int d\hat{\sigma} \theta(-v_{12} \cdot \hat{\sigma}) |\hat{\sigma} \cdot v_{12}| \delta(r_{12} - \sigma \hat{\sigma}) \\ &= \frac{\sigma^{d-1}}{2} \int dr_2 dv_1 dv_2 d\hat{\sigma} \theta(-v_{12} \cdot \hat{\sigma}) |\hat{\sigma} \cdot v_{12}| \\ &\quad \times f_2(r_2 + \sigma, v_1, r_2, v_2, t). \end{aligned} \quad (4.3)$$

En el contexto de la ecuación de Boltzmann, es decir, utilizando la hipótesis del caos molecular (3.28), se obtiene

$$\Phi(t) = \frac{\sigma^{d-1}}{2} \int dr dv_1 dv_2 d\hat{\sigma} \theta(-v_{12} \cdot \hat{\sigma}) |\hat{\sigma} \cdot v_{12}| f(x, v_1, t) f(x, v_2, t). \quad (4.4)$$

De esta manera, hemos encontrado una expresión para la frecuencia total de colisión como una suma, sobre todo el espacio  $x$ , de pares de partículas que colisionan con todas las velocidades y vectores  $\hat{\sigma}$  posibles. El número medio de colisiones que se produce en cada dirección vendrá dado por el integrando de esta última expresión. De esta manera, la densidad de probabilidad de que en  $x$  una partícula con velocidad  $v_1$  colisione con otra con velocidad  $v_2$  con un ángulo sólido dado por  $\hat{\sigma}$  es proporcional a

$$\theta(-v_{12} \cdot \hat{\sigma}) |\hat{\sigma} \cdot v_{12}| f(x, v_1, t) f(x, v_2, t). \quad (4.5)$$

La constante de proporcionalidad se puede calcular fácilmente por normalización. En el método desarrollado por Bird las colisiones se llevan a cabo de acuerdo con esta distribución.

Una variable de colisión de interés es el parámetro de impacto, que se define como  $b = |\sigma \times \mathbf{v}_{12}|/v_{12}$ . En la figura 3.1 del capítulo 3 lo indicamos esquemáticamente. Este parámetro sólo puede tomar valores en el intervalo  $0 \leq b \leq \sigma$ . Utilizando (4.5), la densidad de probabilidad de que la colisión se realice con un parámetro de impacto  $b$  es  $\rho(b) = 1/\sigma$  en 2D, mientras que en 3D es  $\rho(b) = 2b/\sigma^2$ .

A partir de la expresión (4.4), el número medio de colisiones por unidad de tiempo que tienen lugar en el volumen infinitesimal  $dr$  es

$$\frac{1}{2}n\Sigma\langle v_{12} \rangle ndr, \quad (4.6)$$

donde  $\langle v_{12} \rangle$  es la velocidad relativa media y  $\Sigma$  la sección eficaz total,

$$\Sigma = \sigma^{d-1} \int_{\hat{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} < 0} d\hat{\sigma} |\hat{\sigma} \cdot \hat{v}_{12}| = \sigma^{d-1} \frac{\pi^{(d-1)/2}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})}, \quad (4.7)$$

siendo  $\hat{v}_{12}$  el vector unitario en la dirección de  $\mathbf{v}_{12}$ . Para el cálculo de la ecuación (4.7) hemos utilizado las fórmulas del apéndice B. La sección eficaz total es  $2\sigma$  para discos duros ( $d = 2$ ) y  $\pi\sigma^2$  para esferas duras ( $d = 3$ ). El inverso de la expresión (4.6) será el tiempo medio entre colisiones. Esta expresión junto con la densidad de probabilidad de colisión (4.5) son los dos ingredientes fundamentales del método DSMC.

### 4.3 DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO DE SIMULACIÓN DIRECTA DE MONTE CARLO

En primer lugar, el sistema completo se divide en un número finito de celdas, de tamaño pequeño comparado con el recorrido libre medio. En cada una de estas celdas se localizan las colisiones, de acuerdo con la estadística recogida en la ecuación de Boltzmann. Existen varias maneras de hacer esto [66,68]. Aquí discutiremos la primera que propuso Bird [65], que es la que hemos utilizado con mayor frecuencia en nuestros estudios.

La dinámica de la simulación es la siguiente:

1. Se mueven libremente todas las partículas de acuerdo con su velocidad durante cierto intervalo de tiempo fijo  $\Delta t_m$ , el paso de tiempo de evolución libre, el cual debe ser pequeño comparado con el tiempo medio entre colisiones por partícula. En caso de que alguna partícula se salga del sistema, ésta se reintroduce de acuerdo con las condiciones de contorno elegidas.

2. Se introduce el efecto de las colisiones en cada una de las celdas durante este intervalo de tiempo  $\Delta t_m$  de la siguiente manera:

- Se seleccionan dos partículas de la misma celda al azar y se calcula su velocidad relativa  $v_{12}$ . Se procede a realizar la colisión con una probabilidad proporcional a esta magnitud. Esto se puede hacer escogiendo una cota máxima de la velocidad relativa  $v_{\max}$  y calculando el cociente entre la velocidad relativa y la máxima. Entonces se sortea un número aleatorio con distribución uniforme en el intervalo entre 0 y 1. Si este número es menor que  $v_{12}/v_{\max}$  se acepta la colisión y se procede al paso siguiente. En caso contrario se rechaza y se escogen dos nuevas partículas al azar, repitiendo de nuevo todo el proceso.
- Se realiza la colisión aceptada. Se sortea el parámetro de impacto con la distribución arriba expuesta, así como los ángulos que hacen falta para obtener  $\hat{\sigma}$  (por ejemplo, el ángulo azimutal que define el plano de colisión en 3D), y se cambian las velocidades de las dos partículas de acuerdo a la regla (3.2).
- Se asigna un tiempo sin nuevas colisiones para la celda dado por

$$\frac{2}{n_c^2 \Sigma dr_c v_{12}}, \quad (4.8)$$

donde  $dr_c$  es el volumen de la celda y  $n_c$  la densidad de partículas de la celda. Es decir, no se realizan más colisiones en la celda hasta que transcurre el tiempo dado por (4.8).

3. Se repiten los pasos anteriores.

Con este procedimiento tenemos garantía de que en cada celda la probabilidad de colisión viene dada por la ecuación (4.5). Nótese que el tiempo asignado entre colisiones en cada celda (4.8) no es más que el tiempo dado por la expresión (4.6) particularizada para dos partículas que colisionan dentro de la celda. Podemos calcular el tiempo medio entre colisiones sin más que multiplicar el tiempo asignado entre colisiones (4.8) por la densidad de probabilidad de cada colisión, la expresión (4.5) convenientemente normalizada, e integrar sobre todos los ángulos y velocidades posibles. De esta manera obtenemos exactamente el inverso de la expresión (4.6) y, por lo tanto, el número medio de colisiones que se producen por unidad de tiempo en cada celda es el requerido por la teoría cinética.

En la literatura existen varias demostraciones que aseguran la fidelidad a la ecuación de Boltzmann del método DSMC [68], así como algunas comprobaciones con soluciones exactas [69, 70].

## 4.4 UNIDADES DE SIMULACIÓN

Una cuestión importante es cómo se definen las unidades reducidas en el método DSMC. En todas las simulaciones de la ecuación de Boltzmann que presentaremos en esta memoria hemos tomado como unidad de longitud el recorrido libre medio «efectivo»  $l_0$ , que se define como

$$l_0 = \frac{1}{\sqrt{2}\langle n \rangle \Sigma}, \quad (4.9)$$

donde

$$\langle n \rangle = \frac{\int dr n(\mathbf{r}, t)}{\int dr} = \frac{N}{V} \quad (4.10)$$

es la densidad numérica media, esto es, el número total de partículas  $N$  dividido por el volumen total del sistema  $V$ . De esta manera no hace falta especificar la densidad  $\langle n \rangle$  del sistema o el diámetro  $\sigma$  de las partículas, pues sistemas con densidades distintas, pero con el mismo  $l_0$ , son equivalentes. Matemáticamente, esta propiedad se basa en que si  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  es una solución de la ecuación de Boltzmann (3.29) correspondiente a un sistema de densidad  $\langle n \rangle$  y sección eficaz  $\Sigma$ , entonces

$$f'(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{\langle n' \rangle}{\langle n \rangle} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (4.11)$$

es la solución del mismo problema pero para un sistema con una densidad media  $\langle n' \rangle$  y sección eficaz

$$\Sigma' = \Sigma \frac{\langle n \rangle}{\langle n' \rangle}. \quad (4.12)$$

Esto sólo es válido para medios diluidos, en los que son despreciables los efectos de volumen excluido y es aplicable la ecuación de Boltzmann.

Definiremos las unidades de masa y de tiempo haciendo  $m = 1$  y  $k_B T_0 = 1/2$ , siendo  $T_0$  una cierta temperatura de referencia.

## CAPÍTULO 5

# GASES GRANULARES QUE EVOLUCIONAN LIBREMENTE

### 5.1 INTRODUCCIÓN

Consideremos un sistema que se encuentre aislado y en un estado translacionalmente invariante. Si las colisiones entre las partículas fueran elásticas el sistema tendería a un estado estacionario de equilibrio termodinámico. En nuestro caso, debido a la disipación de la energía cinética, este estado no puede permanecer invariante en el tiempo y la temperatura debe disminuir progresivamente. Podría esperarse, por tanto, una situación de enfriamiento monótono en la que el sistema se mantuviera homogéneo en el espacio: el estado de enfriamiento homogéneo (HCS).

En la sección 5.2 se obtiene la ley de variación de la temperatura y se analiza la función de distribución monoparticular en este estado, tanto en el rango de velocidades térmicas [71], como en el límite de velocidades muy grandes [72]. En ambos casos se comparan las predicciones teóricas con los resultados de simulaciones numéricas de la ecuación cinética.

Con objeto de describir situaciones en las que el gas evoluciona libremente distintas del HCS (o al menos estados próximos a él), en la sección 5.3 se calculan los coeficientes de transporte en el orden de Navier-Stokes. Los obtendremos mediante un desarrollo en gradientes de tipo Chapman-Enskog en torno al estado de enfriamiento homogéneo a partir de la ecuación de Boltzmann [59, 73]. También verificaremos la validez de esta descripción hidrodinámica en la región lineal alrededor del HCS mediante simulación [74].

No obstante, los resultados de simulación [71] muestran que en general el estado de enfriamiento homogéneo no es estable, evolucionando hacia una situación altamente inhomogénea. Aunque el estado inicial del sistema sea ho-

mogéneo, al final se acaban formando agregados de partículas. Este fenómeno se produce tanto en sistemas densos como diluidos, y es una de las características más importantes de los gases granulares cuando se comparan con los gases moleculares. El análisis de la estabilidad lineal del HCS llevado a cabo en la sección 5.3 muestra que, efectivamente, la densidad en este estado es linealmente inestable ante fluctuaciones. Sin embargo, el análisis de las componentes de Fourier de los campos hidrodinámicos indican que 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 [75]. En la sección 5.4 se propone un modelo hidrodinámico sencillo para explicar lo que se observa en las simulaciones.

## 5.2 LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN EN EL HCS

En principio, un gas de esferas duras debe relajarse al equilibrio local en una escala temporal del orden del tiempo medio entre colisiones,  $\tau_0 \sim l_0/v_0$ , donde  $l_0$  es el recorrido libre medio y  $v_0$  la velocidad térmica,  $\pi v_0^2/2 \equiv k_B T$ . Busquemos una solución en la que no exista flujo de velocidad,  $u(x, t) = 0$ , y la densidad sea constante en el tiempo y el espacio  $n(x, t) = n$ . De acuerdo con los conceptos fundamentales de la teoría de Chapman-Enskog [76], es de esperar que tras un transitorio del orden de varios tiempos medios entre colisiones  $\tau_0$ , la función de distribución monoparticular  $f(v, t)$  dependa del tiempo a través de sus primeros momentos, en este caso la temperatura  $T(t)$ . Por análisis dimensional,  $f$  tendrá entonces la forma

$$f(v, t) = \frac{n}{v_0(t)^d} \phi\left(\frac{v}{v_0(t)}\right), \quad (5.1)$$

siendo  $\phi$  una función a determinar a partir de la ecuación cinética. Goldshtein y Shapiro [77] fueron los primeros en «probar» la existencia de esta solución homogénea de la ecuación de Boltzmann-Enskog. Con los mismos razonamientos, la función de distribución de dos partículas tendrá la forma

$$f_2(x_1, x_2, t) = \frac{n^2}{v_0(t)^{2d}} \phi_2\left(\frac{v_1}{v_0(t)}, \frac{v_2}{v_0(t)}\right). \quad (5.2)$$

Podemos calcular la ecuación de balance de la energía para este estado en todos los órdenes en densidad ayudándonos de la relación (3.27) con  $\psi(v) = \pi v^2/2$ . De esta manera, se obtiene

$$\partial_t T(t) = -\frac{2}{dnk_B} (1 - \alpha^2) w[T(t)], \quad (5.3)$$



donde  $w[T(t)]$  es el término fuente que da cuenta de la disipación en este estado:

$$w[T(t)] = \frac{m\sigma^{d-1}\pi^{(d-1)/2}}{8\Gamma(\frac{d+3}{2})} n^2 v_0(t)^3 \int dc_1 dc_2 |c_1 - c_2|^3 \phi_2(c_1, c_2). \quad (5.4)$$

Como toda la dependencia respecto de la temperatura en (5.3) es conocida, podemos integrarla fácilmente, resultando

$$T(t) = \frac{T(0)}{\left(1 + \frac{t}{t_0}\right)^2}, \quad (5.5)$$

donde el tiempo característico  $t_0$  viene dado por

$$t_0^{-1} = \frac{2}{d} (1 - \alpha^2) w[T(0)] [m n v_0(0)^2]^{-1}. \quad (5.6)$$

La ecuación (5.5) describe el decrecimiento de la temperatura en el transcurso del tiempo debido a las colisiones inelásticas y se suele denominar ley de Haff [78]. El valor de  $t_0$  en términos de los parámetros del gas varía según la ecuación cinética que se utilice. Sin embargo, la ley de variación de la temperatura (5.5) es exacta en todos los órdenes en densidad. En lo que sigue nos centraremos en el límite de baja densidad, es decir, utilizaremos la hipótesis de caos molecular, que implica que en la ecuación (5.4) podemos aproximar  $\phi_2$  por  $\phi_2(c_1, c_2) = \phi(c_1)\phi(c_2)$ . No obstante, cabe mencionar que como la ecuación de Enskog tampoco considera correlaciones dinámicas, la única diferencia entre sus resultados y los de la ecuación de Boltzmann en el HCS es una constante que viene dada por la función de correlación de pares de dos esferas en contacto. Así, adecuadamente escaladas, las soluciones de las ecuaciones de Enskog y de Boltzmann inelásticas coinciden en el HCS.

Para verificar la ley de Haff llevamos a cabo simulaciones numéricas de la ecuación de Boltzmann utilizando el método de simulación directa de Monte Carlo (capítulo 4). En primer lugar, hay que dejar constancia que para obtener todos los resultados de simulación que se presentan en esta sección se ha simulado directamente la ecuación de Boltzmann homogénea, es decir, una solución correspondiente a un estado traslacionalmente invariante en todo momento. En el lenguaje técnico del método DSMC, consideramos un sistema en una única celda abarcando todo el sistema, ya que las posiciones de las partículas no aparecen en la ecuación y, por lo tanto, no hay necesidad de guardarlas ni calcularlas. Por el mismo motivo, no se necesita explicitar ningún tipo de condición de contorno. Desde luego, ello tiene como consecuencia que no se pueden formar inhomogeneidades espaciales en el sistema. Pero esto es precisamente lo que queremos, pues en esta sección estamos interesados en la descripción de la

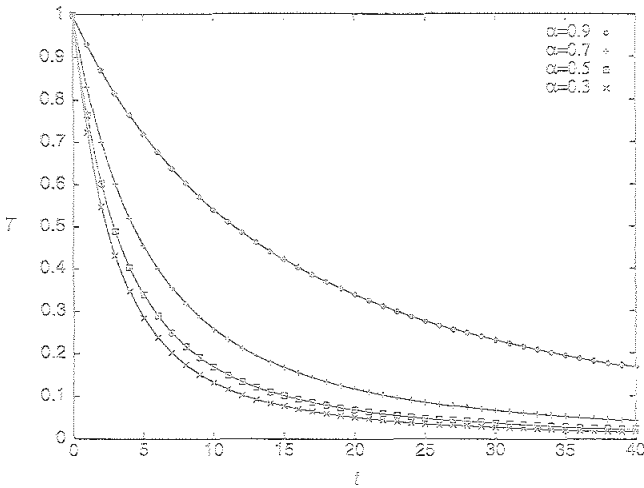


FIGURA 5.1: Evolución temporal de la temperatura granular para varios valores del coeficiente de restitución. En todos los casos, las velocidades iniciales correspondían a una distribución de Maxwell-Boltzmann a la temperatura  $T(0) = 1$ . Los símbolos son el resultado de la simulación de un gas de esferas duras ( $d = 3$ ) y la línea continua el mejor ajuste a la ecuación (5.5).

función de distribución en el HCS y no en la estabilidad de dicho estado (que se discutirá en las secciones siguientes).

En todas las simulaciones que se presentan en este capítulo utilizamos unidades reducidas definidas por  $m = 1$ ,  $k_B T(0) = 1/2$  y  $l_0 = 1$ , donde  $m$  es la masa de las partículas,  $T(0)$  la temperatura inicial del gas y  $l_0$  el recorrido libre medio inicial (véase el capítulo 4). De esta manera, el espacio se mide en unidades de  $l_0$  y el tiempo en unidades de  $l_0/v_0(0)$ , donde  $v_0(0) = \sqrt{2k_B T(0)/m}$ .

En la figura 5.1 se representa la evolución temporal de la temperatura para distintos valores del coeficiente de restitución,  $\alpha = 0.3, 0.5, 0.7$  y  $0.9$ . Los puntos son el resultado de la simulación de un gas tridimensional de 1000 partículas inelásticas, realizando promedios sobre 150 trayectorias. Las líneas continuas representan la predicción teórica (5.5), donde el parámetro  $t_0$  ha sido calculado en cada caso a partir de la simulación mediante un ajuste de regresión lineal. Puede observarse claramente que la ley de Haff se verifica muy bien en la simulación, y por lo tanto en la ecuación de Boltzmann.

La hipótesis de partida (5.1) no sólo nos proporciona la ley de variación de la temperatura, sino que además nos determina la forma de la función de distribución en este estado normal independiente de las condiciones iniciales. Introduciendo el escalamiento (5.1) en la ecuación de Boltzmann (3.30) y teniendo en cuenta la isotropía del sistema, es decir,  $\phi(\mathbf{v}/v_0) = \phi(v/v_0)$ , se llega a

la siguiente ecuación que debe verificar la función de distribución de velocidades escalada

$$\frac{(1-\alpha^2)}{d} W[\phi] \left( d + c \frac{d}{dc} \right) \phi(c) = I[c|\phi], \quad (5.7)$$

donde  $W$  e  $I$  son dos funcionales de  $\phi$  proporcionales a  $w$  y al término de colisión, respectivamente,

$$W[\phi] = \frac{\pi^{(d-1)/2}}{4 \Gamma(\frac{d+3}{2})} \int dc_1 dc_2 |c_{12}|^3 \phi(c_1) \phi(c_2), \quad (5.8)$$

$$I[c_1|\phi] = \int dc_2 \int_{c_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (c_{12} \cdot \hat{\sigma}) \left( \frac{1}{\alpha^2} b^{-1} - 1 \right) \phi(c_1) \phi(c_2). \quad (5.9)$$

Aunque la ecuación (5.7) es una ecuación integro-diferencial cerrada para  $\phi(c)$ , resolverla no es una tarea sencilla, y sólo soluciones aproximadas se han encontrado por el momento. En el apartado siguiente analizaremos su forma en el rango de velocidades térmicas, esto es, velocidades del orden de  $v_0(t)$ , así como los primeros momentos de la distribución utilizando un desarrollo en los polinomios de Sonine. En el apartado 5.2.2 encontraremos una expresión asintótica para la función de distribución en el límite  $c \rightarrow \infty$ .

### 5.2.1 RANGO DE VELOCIDADES TÉRMICAS

En la figura 5.2 hemos representado la función de distribución marginal escalada  $\phi_x$

$$\dot{\phi}_x(v_x/v_0(t)) = n^{-1} v_0^3(t) \int dv_y dv_z f(\mathbf{v}, t), \quad (5.10)$$

como función de su argumento  $c_x \equiv v_x/v_0(t)$ , para distintos valores del coeficiente de restitución,  $\alpha = 0.3, 0.5, 0.7$  y  $0.9$ , en el mismo instante  $t = 26$  (recordemos en unidades de  $l_0/v_0(0)$ ). Estos resultados de simulación han sido obtenidos promediando sobre 150 trayectorias. Por supuesto, el segundo miembro de la ecuación (5.10) ha sido evaluado discretizando el intervalo de velocidades y contando el número de partículas dentro de cada subintervalo. Todas las figuras que se muestran en esta sección corresponden nuevamente a simulaciones con una distribución inicial de velocidades gaussiana. No obstante, a lo largo del desarrollo de nuestro trabajo también consideramos distribuciones de velocidades iniciales distintas, observándose resultados similares.

Puede observarse que, sobre la escala de la figura 5.2, las distintas distribuciones se ajustan muy bien a la gaussiana  $\phi_x^{(0)}(c_x) = \pi^{-1/2} \exp(-c_x^2)$  (representada en la figura por la línea continua). Para poder observar discrepancias

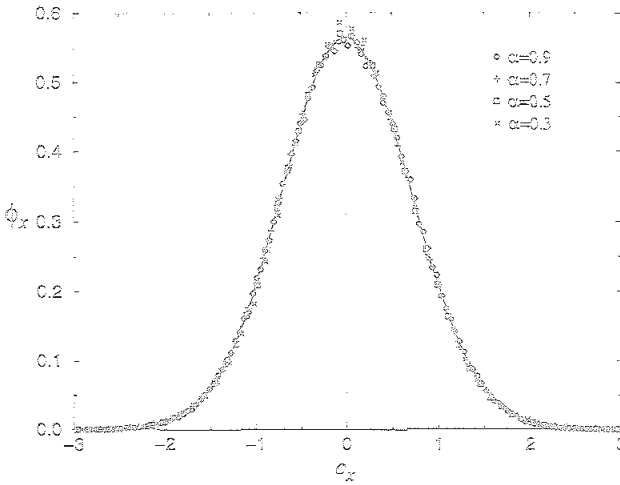


FIGURA 5.2: Función de distribución marginal escalada para distintos valores del coeficiente de restitución. La línea continua es la gaussiana  $\phi_x^{(0)}$ .

hay que utilizar una escala más fina. Parece entonces razonable desarrollar la función  $\phi$  en serie de los polinomios de Sonine  $S^{(j)}$

$$\phi(c) = \phi^{(0)}(c) \sum_{j \geq 0} a_j S^{(j)}(c^2), \quad (5.11)$$

donde  $\phi^{(0)}(c) = \pi^{-d/2} e^{-c^2}$  corresponde a la función de distribución de Maxwell-Boltzmann con una temperatura dependiente del tiempo y los polinomios de Sonine están definidos como

$$S^{(j)}(x) = \sum_{\tau=0}^j \frac{\Gamma(j+d/2)}{(j-\tau)! \tau! \Gamma(\tau+d/2)} (-x)^\tau. \quad (5.12)$$

La ventaja de estos polinomios es que satisfacen la relación de ortonormalización<sup>1</sup>

$$\int dc \phi^0(c) S^{(j)}(c^2) S^{(j')}(c^2) = \frac{\Gamma(j+d/2)}{\Gamma(d/2) j!} \delta_{j,j'}. \quad (5.13)$$

La condición de normalización de  $\phi$  y la definición de la temperatura (3.26) implican  $a_0 = 1$  y  $a_1 = 0$ . Además, se puede probar fácilmente que el coeficiente  $a_2$  es proporcional al cuarto momento cumulante de la distribución escalada,

$$a_2 = \frac{4}{d(d+2)} \left[ \langle c^4 \rangle - \frac{d(d+2)}{4} \right] = \frac{4}{3} [\langle c_x^4 \rangle - 3 \langle c_x^2 \rangle^2]. \quad (5.14)$$

<sup>1</sup>Estos están relacionados con los polinomios generalizados de Laguerre mediante la relación  $S^{(j)}(x) = L_j^{d/2-1}(x)$ , aunque en teoría cinética se suelen denominar polinomios de Sonine [53].

En esta expresión hemos utilizado la relación  $\langle c_x^4 \rangle = 3\langle c^4 \rangle / [d(d+2)]$ , válida para cualquier distribución isotrópica, donde

$$\langle c^d \rangle \equiv \int dc c^d \phi(c) \quad (5.15)$$

son los distintos momentos adimensionales de la distribución. En general, a partir de la relación (5.13) podemos relacionar los coeficientes  $a_i$  con los momentos  $\langle c^d \rangle$  de la distribución. Por otro lado, podemos construir una jerarquía de ecuaciones para los momentos multiplicando (5.7) por  $c_1^d$  e integrando sobre  $c_1$ . Para calcular  $a_2$  podemos aproximar la función escalada por  $\phi(c) = \phi^{(0)}(c)\{1 + a_2 S^{(2)}(c^2)\}$  y utilizar la ecuación que hemos obtenido para  $\langle c^4 \rangle$ . Entonces nos aparecen términos lineales y cuadráticos en  $a_2$ . Podemos despreciar estos últimos frente a los primeros, pues ya sabemos que la distribución se parece mucho a una gaussiana y, por tanto, el coeficiente  $a_2$  debe ser pequeño. Por supuesto, también podemos verificar esta aproximación a posteriori. Cuando todo esto se lleva a cabo se obtiene, [77]<sup>2</sup> y [79],

$$a_2 = \frac{16(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{9 + 24d + (8d-41)\alpha + 30\alpha^2 - 30\alpha^3}. \quad (5.16)$$

El valor absoluto de  $a_2$  está acotado por 0.2 para  $0 < \alpha \leq 1$  y  $d = 2, 3$ , lo que indica no sólo que la aproximación realizada para su cálculo es correcta, sino que, efectivamente, la solución del HCS es aproximadamente la de Maxwell-Boltzmann, en lo que a los primeros momentos se refiere.

Por otro lado, truncando de nuevo el desarrollo en polinomios de Sonine (5.11) en los tres primeros términos y utilizando (5.6) se encuentra que el tiempo característico  $t_0$  viene dado por

$$t_0^{-1} = (1-\alpha^2) \frac{\pi^{(d-1)/2} \sigma^{d-1} n}{d\Gamma(d/2)} \sqrt{\frac{k_B T(0)}{m}} \left(1 + \frac{3}{16} a_2\right). \quad (5.17)$$

En la figura 5.3 hemos representado los valores teóricos predichos por (5.17) y los obtenidos a partir de la simulación de un gas de esferas duras ( $d = 3$ ) ajustando la ley de Haff (véase la figura 5.1). No es posible distinguir la contribución de  $a_2$  en escala de la figura. Si se representan los valores dados por (5.17) pero con  $a_2 = 0$ , se obtiene prácticamente la misma figura, indicando que la aproximación de Maxwell-Boltzmann proporciona una aproximación muy buena para describir la evolución temporal de la temperatura.

Para poder apreciar desviaciones de la aproximación gaussiana en la simulación estudiamos los momentos cuarto y sexto de la velocidad. En este sentido

<sup>2</sup>El coeficiente  $a_2$  fue calculado primero por Goldshtein y Shapiro utilizando la misma aproximación que en la referencia [79], pero hay un error en sus cálculos.

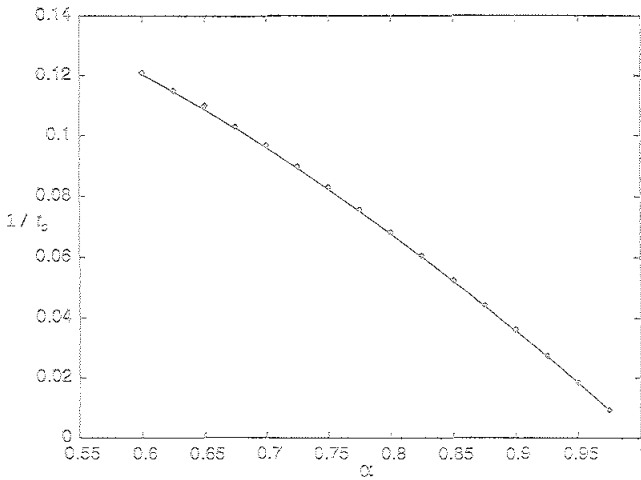


FIGURA 5.3: Valores del parámetro  $t_0$ , definido en la ecuación (5.5) en función del coeficiente de restitución. Los puntos son el resultado del ajuste de la figura 5.1 y la línea continua la predicción teórica (5.17).

aumentamos el número de trayectorias con objeto de mejorar la precisión estadística. Los resultados de simulación que se presentan a continuación han sido promediados sobre  $10^5$  trayectorias. En la figura 5.4 hemos representado los momentos cuarto y sexto en función del tiempo correspondientes a una simulación

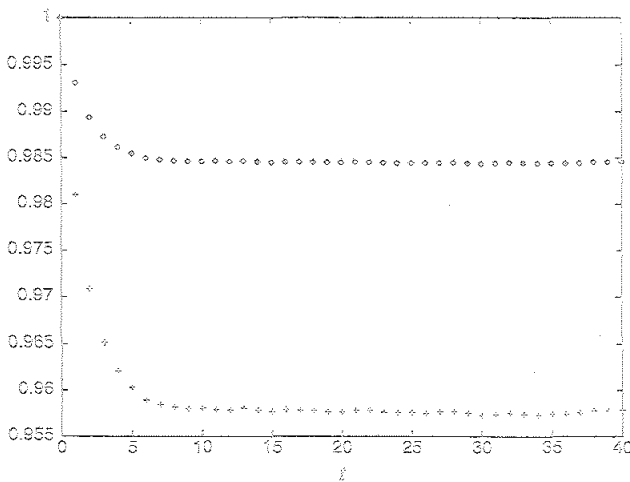


FIGURA 5.4: Evolución temporal de los momentos cuarto y sexto de la velocidad escalada para  $\alpha = 0.9$ . Los rombos corresponden a  $4\langle c^4 \rangle / 15$  y las cruces con  $8\langle c^6 \rangle / 105$ . El estado inicial es una distribución maxwelliana de velocidades.

con un coeficiente de restitución  $\alpha = 0.9$ . En particular hemos dividido cada uno de los momentos por  $15/4$  y  $105/8$  respectivamente, pues éstos serían los valores que se obtendrían si la distribución fuera de Maxwell-Boltzmann ( $d = 3$ ). Como la distribución de velocidades inicial es una gaussiana, inicialmente ambos valores son uno. Tras un periodo de tiempo transitorio del orden de varias veces el tiempo medio entre colisiones los momentos se vuelven estacionarios, indicando que el sistema alcanza el estado natural del HCS. Utilizando otras distribuciones de velocidades iniciales obtuvimos los mismos valores estacionarios de los momentos, en concordancia con el hecho de que la función de distribución dada por (5.1) y (5.7) es una solución normal independiente de las condiciones iniciales.

Como consecuencia de la ecuación (5.14), medir el cuarto momento de la distribución es equivalente a calcular numéricamente el coeficiente  $a_2$ . En la figura 5.5 hemos representado el cuarto momento de la distribución escalada en función del coeficiente de restitución. En un sistema tridimensional la ecuación (5.14) se escribe como  $4\langle c^4 \rangle / 15 = a_2 + 1$ , luego esencialmente, en la figura 5.5 hemos representado el coeficiente  $a_2$ . Los puntos son el resultado de la simulación y las línea continua la predicción teórica proporcionada por la ecuación (5.14). El acuerdo es muy bueno. En particular, a partir de la ecuación (5.14) el cuarto momento de la distribución en el HCS debe coincidir con el valor maxwelliano para  $\alpha = 1/\sqrt{2}$ , lo cual se encuentra muy próximo al valor estimado por la simulación.

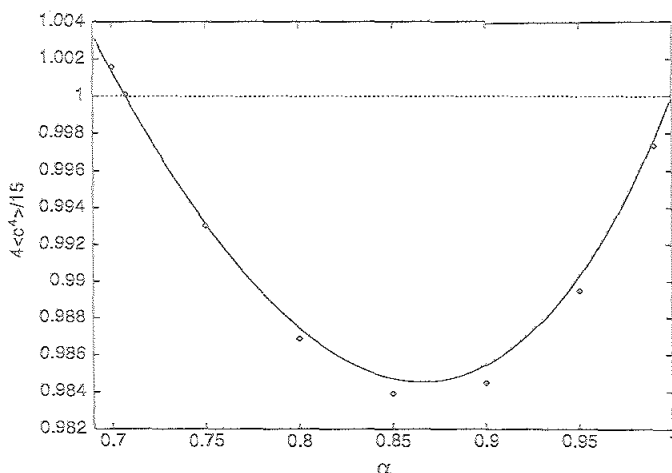


FIGURA 5.5: Comparación de los valores del cuarto momento de la distribución de velocidades en el HCS obtenidos de la simulación (rombos) con la predicción teórica de la ecuación (5.14) con  $d = 3$  (línea continua).

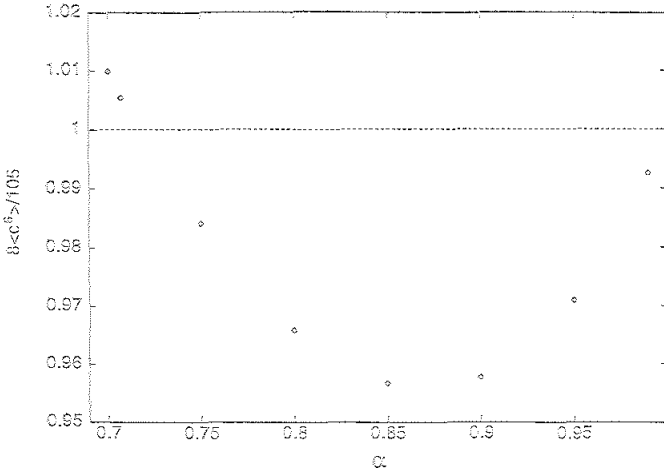


FIGURA 5.6: Valores del sexto momento de la velocidad en el HCS en función del coeficiente de restitución.

En la figura 5.6 hemos representado los resultados para el sexto momento, de nuevo dividido por los valores gaussianos. Como era de esperar, las discrepancias respecto a la gaussiana son ahora mayores. Por el momento, no existe ningún cálculo teórico que conozcamos con que contrastar.

Dado que la ecuación (5.16) proporciona una buena estimación para el coeficiente  $a_2$ , y, por tanto, para los primeros momentos de la distribución, podemos preguntarnos cómo de buena es la aproximación de considerar el desarrollo (5.11) sólo hasta el segundo polinomio de Sonine, con el segundo coeficiente  $a_2$  dado por (5.16), para la función de distribución.

En las figuras 5.7 y 5.8 se representa  $\phi_x(c_x)/\phi_x^{(0)}(c_x)$  para dos sistemas con un coeficiente de restitución  $\alpha = 0.8$  y  $0.99$ , respectivamente. Los símbolos corresponden a los resultados de la simulación para cuatro instantes distintos. La línea continua es la ecuación (5.11) con  $d = 3$  integrada con respecto a  $c_y$  y  $c_z$  (truncando la serie en  $j = 2$ ), es decir,

$$\frac{\phi_x(c_x)}{\phi_x^{(0)}(c_x)} = 1 + a_2 S_{d=1}^{(2)}(c_x^2) = 1 + \frac{a_2}{2} \left( c_x^4 - 3c_x^2 + \frac{3}{4} \right). \quad (5.18)$$

El acuerdo es excelente, especialmente teniendo en cuenta la pequeñas discrepancias que se están midiendo (nótese la definición de escalas en el eje de abscisas en las figuras 5.7 y 5.8).

Recientemente se ha medido el coeficiente  $a_2$  para un gas de discos duros ( $d = 2$ ) en el HCS a partir de simulaciones de Dinámica Molecular, obteniéndose resultados similares a los presentados aquí [80].



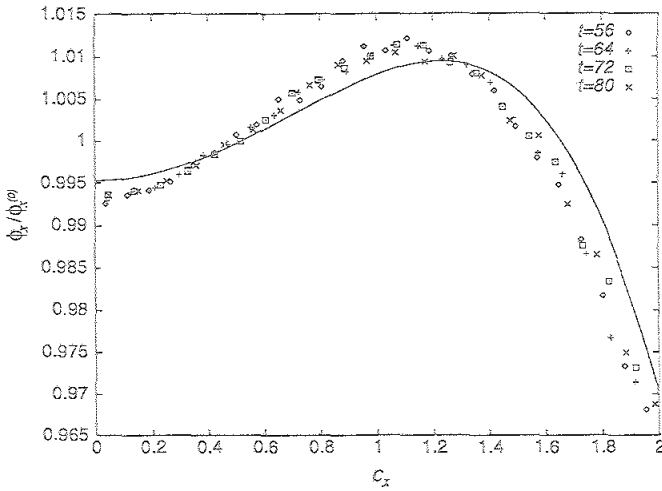


FIGURA 5.7: Función de distribución marginal de velocidades escalada para el HCS con  $\alpha = 0.8$ . La línea continua corresponde a la ecuación (5.18).

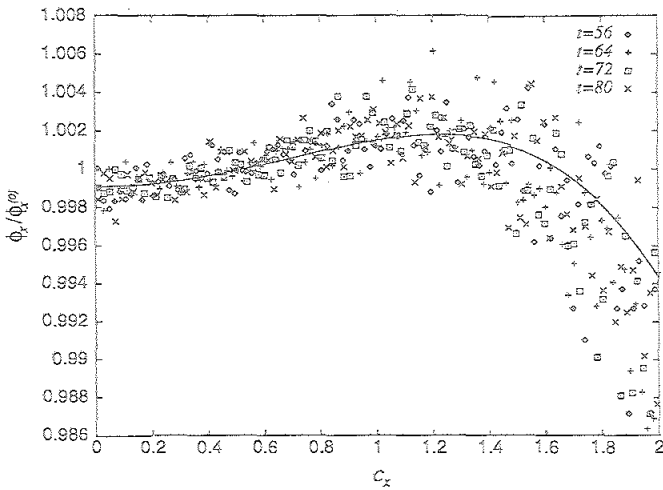


FIGURA 5.8: Lo mismo que la figura 5.7 pero para  $\alpha = 0.99$ .

### 5.2.2 COLAS DE LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE VELOCIDADES

En el apartado anterior hemos estudiado la función de distribución en el rango de velocidades del orden de  $v_0(t)$ . En particular, encontramos pequeñas desviaciones de la gaussiana analizando el cuarto momento de la distribución. En este apartado veremos que la función de distribución decae para velocidades grandes mucho más lentamente que una gaussiana. Más concretamente veremos que el comportamiento asintótico de la solución de la ecuación de Boltzmann para el HGS cuando  $c \rightarrow \infty$  no viene dado por una función gaussiana, sino por una exponencial.

Consideremos la ecuación integro-diferencial (5.7), que nos determina la función de distribución escalada  $\phi(c)$ . En ella aparece el término de colisiones  $I[c|\phi]$ , dado por la ecuación (5.9). Al igual que el operador de colisiones de Boltzmann (3.30), consiste en dos sumandos: el término positivo se denomina término de ganancia y da cuenta del número de partículas por unidad de tiempo que adquieren una velocidad  $c$  tras colisionar; el otro sumando es el término de pérdida y proporciona el número de partículas que pierden la velocidad  $c$  debido a una colisión. Esipov y Pöschel [81] se dieron cuenta que en el HGS, para velocidades muy grandes, el término de ganancia debe ser mucho más pequeño que el término de pérdida. De esta manera, en el límite  $c_i \rightarrow \infty$ , podemos escribir

$$I[c_1|\phi] \sim -\phi(c_1) \int dc_2 \int_{\hat{e}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\hat{c}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \phi(c_2). \quad (5.19)$$

Por otro lado, en la integral de colisión que nos queda podemos aproximar  $c_{12}$  por  $c_1 \hat{e}_{12}$ , donde  $\hat{e}_{12}$  denota el vector unitario en la dirección de  $c_{12}$ , ya que las contribuciones dominantes provendrán de colisiones donde típicamente la partícula 2 se encuentra en el rango térmico. Así, para velocidades asintóticamente grandes podemos aproximar

$$I[c_1|\phi] \sim -\beta c_1 \phi(c_1), \quad (5.20)$$

siendo (ver apéndice B)

$$\beta = \int dc_2 \int_{\hat{e}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\hat{e}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \phi(c_2) = \frac{\pi^{(d-1)/2}}{\Gamma\left(\frac{d+1}{2}\right)}. \quad (5.21)$$

De esta manera, (5.7) se simplifica a

$$\frac{(1-\alpha^2)}{d} \mathcal{W}[\phi] \left( d + c \frac{d}{dc} \right) \phi(c) \sim -\beta c \phi(c). \quad (5.22)$$

En esta ecuación podemos despreciar el primer término del primer miembro en comparación con el segundo miembro cuando  $c \rightarrow \infty$ , tomando la solución la forma

$$\phi(c) \sim \mathcal{A} \exp(-Ac). \quad (5.23)$$

En esta expresión  $\mathcal{A}$  es una constante de integración, mientras que  $A = d\beta/[(1 - \alpha^2)W]$ . Esta solución corresponde a una cola que está superpoblada cuando se compara con el comportamiento gaussiano  $\exp(-c^2)$ . Para llegar a la ecuación (5.23) nos hemos basado en que el término de pérdida es dominante frente al término de ganancia, lo cual a su vez se apoya en un razonamiento intuitivo. Debido a que la ecuación de Boltzmann es una ecuación integro-diferencial altamente no lineal, no existe una demostración matemáticamente rigurosa de este comportamiento asintótico. Sin embargo, como veremos más adelante, la simulación de la ecuación de Boltzmann lo confirma para velocidades suficientemente grandes.

En realidad, todavía no tenemos una expresión explícita para  $A$  en términos del coeficiente de restitución, aún tenemos que calcular la funcional  $W[\phi]$ . Sin embargo, ésta se puede evaluar en la segunda aproximación de Sonine, como hicimos en el apartado anterior, introduciendo el desarrollo (5.11) en (5.8) y despreciando los términos superiores o no lineales en  $a_2$ . De esta manera, se encuentra

$$A(\alpha)^{-1} = \frac{\Gamma(\frac{d+1}{2}) (1 - \alpha^2) (1 + \frac{3}{16}a_2)}{\sqrt{2} \Gamma(\frac{d}{2}) d}, \quad (5.24)$$

donde el coeficiente  $a_2$  viene dado por la ecuación (5.16). Esta expresión ha sido obtenida por van Noije y Ernst [79,82], aunque Esipov y Pöschel [81] fueron los primeros en predecir la ley exponencial (5.23). En ambos casos se utilizan razonamientos similares a los desarrollados por Krook y Wu [83] para estudiar las colas de las distribuciones que relajan al equilibrio en fluidos moleculares.

Para verificar este decaimiento exponencial de la función de distribución realizamos simulaciones de Monte Carlo de un sistema bidimensional de  $10^6$  partículas. Además, con motivo de aumentar la estadística, los resultados han sido promediados sobre distintas trayectorias, realizándose 700 para  $\alpha = 0.1$  y 2500 para  $\alpha = 0.7$  y  $0.9$ . Como ya se ha comentado anteriormente, al considerar una única celda hemos simulado un sistema en todo momento obligado a permanecer en el HCS. De hecho, es precisamente esta capacidad del método de simulación el que hace posible la identificación y medida de las colas en la función de distribución. Con simulaciones de Dinámica Molecular es más difícil observar el comportamiento exponencial en el HCS, debido a que este estado es altamente inestable ante fluctuaciones espaciales, como analizaremos más adelante.

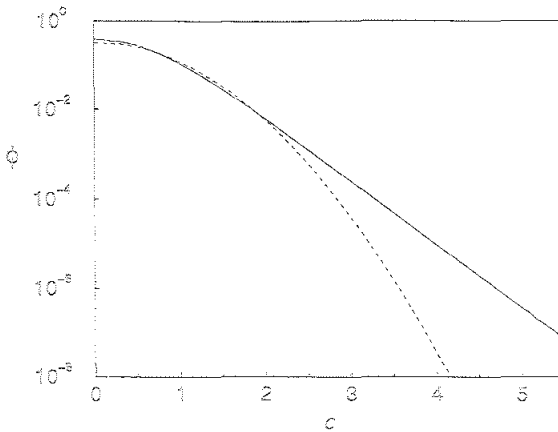


FIGURA 5.9: Distribución de velocidades escalada  $\phi$  en función de la velocidad adimensional  $c = v/v_0(t)$ . El coeficiente de restitución es  $\alpha = 0.1$ . La línea continua es el resultado de la simulación de Monte Carlo de un sistema de discos duros ( $d = 2$ ) y la discontinua es la gaussiana  $\phi^{(0)}(c) = \pi^{-1} \exp(-c^2)$

Consideremos primero el caso  $\alpha = 0.1$ . En la figura 5.9 hemos presentado los resultados de simulación para la función de distribución escalada  $\phi$  en función de la velocidad adimensional  $c = v/v_0(t)$ . En este caso, así como en los siguientes, la velocidad  $c$  ha sido discretizada en intervalos de  $\Delta c = 0.05$ . Se observa claramente que  $\ln \phi(c)$  muestra un perfil lineal para  $c \gtrsim 2$ , indicando la cola exponencial tal y como predice la ecuación (5.23). A efectos de comparación, también se ha representado la gaussiana  $\phi^{(0)}(c) = \pi^{-1} \exp(-c^2)$  ( $d = 2$ ). En la región exponencial de  $\phi$  es evidente la discrepancia entre ambas funciones. Se han observado comportamientos similares para  $\alpha = 0.2, 0.4$ , y  $0.6$ . La principal diferencia estriba en que a medida que aumentamos el coeficiente de restitución, la cola exponencial se desplaza hacia regiones de mayor velocidad  $c$ . De esta manera disminuye la población relativa de partículas con velocidades en la zona asintótica de la cola de la distribución, aumentando, por tanto, los errores estadísticos de la simulación. En consecuencia, cada vez se hace más difícil detectar la ley de decaimiento exponencial.

El valor más alto del coeficiente de restitución en el que hemos sido capaces de obtener una indicación relevante y clara del comportamiento exponencial es  $\alpha = 0.7$ . Los resultados se muestran en la figura 5.10. Las desviaciones cuantitativas de  $\phi$  con respecto a la gaussiana son ahora mucho más pequeñas que en la figura 5.9, de hecho es muy difícil identificar una región lineal en la gráfica de  $\ln \phi(c)$ . Con objeto de obtener alguna información adicional hemos representado en la gráfica insertada de la figura 5.10 los valores de la pendiente

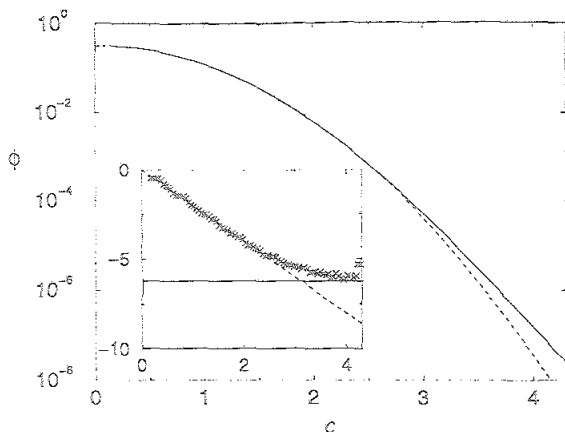


FIGURA 5.10: Lo mismo que la figura 5.9 pero para  $\alpha = 0.7$ . En la gráfica insertada se muestra la derivada numérica  $d \ln \phi / dc$  (cruces) y  $d \ln \phi^{(0)} / dc$  (línea discontinua), donde  $\phi^{(0)}$  es la gaussiana. La línea horizontal corresponde a la predicción teórica de la ecuación (5.24).

de  $\ln \phi$  y de la gaussiana  $\ln \phi^{(0)}$  (línea recta discontinua). Se puede observar la tendencia hacia un valor constante de la pendiente, aunque los errores se vuelven muy grandes para  $c \gtrsim 4$ , debido a la poca población de partículas, pues allí  $\phi$  es del orden de  $10^{-8}$ . Además, el valor al que tiende la pendiente de  $\ln \phi(c)$  está muy cerca del valor teórico dado por la ecuación (5.24), representado en la gráfica por la línea continua horizontal.

El hecho de que el comienzo de la región exponencial se desplace hacia valores cada vez más grandes de  $c$  a medida que el sistema se vuelve más elástico es fácil de comprender dado que sabemos que en el límite elástico la función de distribución de equilibrio es exactamente gaussiana en todo el rango de velocidades. Más cuantitativamente, podemos estimar cuándo debe aparecer la región exponencial teniendo en cuenta que para velocidades pequeñas la función de distribución es muy parecida a la gaussiana y para velocidades grandes debe seguir la ecuación (5.23). En este sentido, podemos estimar la localización de la región intermedia igualando las derivadas de los logaritmos de las distribuciones gaussianas y exponencial. Un cálculo sencillo muestra que debe aparecer para velocidades del orden de  $c^* \sim A(\alpha)/2$ . De esta forma, el decaimiento exponencial debe hacerse evidente para valores mucho mayores que  $c^*$ , es decir,  $c \gg (1 - \alpha^2)^{-1}$ . En las simulaciones no hemos sido capaces de alcanzar esta región para  $\alpha > 0.7$ , aunque en todos los casos los resultados son compatibles con una cola exponencial.

En la figura 5.11 comparamos los valores de simulación del exponente

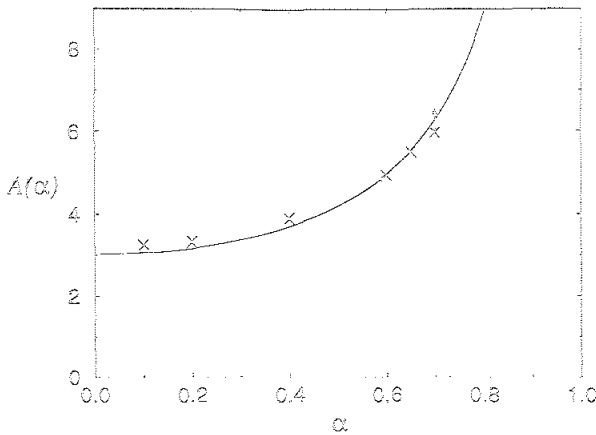


FIGURA 5.11: Pendiente del logaritmo de la cola de la distribución de velocidades en el estado de enfriamiento homogéneo. Las cruces son el resultado de la simulación de la ecuación de Boltzmann y la línea continua la predicción teórica dada por (5.24) con  $d = 2$ .

$A(\alpha)$  introducido en la ecuación (5.23) con los resultados teóricos dados por la ecuación (5.24). Los primeros se han calculado ajustando a una recta los valores numéricos de  $\ln \phi$  en la región donde se observa un decaimiento lineal. Con objeto de mejorar la estadística, además de los promedios sobre trayectorias, en cada una de ellas se consideraron promedios sobre diez instantes distintos. La flecha en el valor correspondiente a  $\alpha = 0.7$  en la figura 5.11 indica que es solamente una cota inferior, tal como se ha discutido anteriormente. El acuerdo entre teoría y simulación es muy bueno.

Recientemente se ha conseguido observar experimentalmente el decaimiento exponencial de la función de distribución en un sistema formado por pequeñas esferas de vidrio (de 4 mm de diámetro) que evolucionan libremente a partir de una situación homogénea [40].

### 5.3 COEFICIENTES DE TRANSPORTE

Con frecuencia se describen los medios granulares en el llamado régimen de flujos rápidos (*rapid flow regime*) por medio de ecuaciones hidrodinámicas [84] que involucran exclusivamente a los campos macroscópicos  $n(x, t)$ ,  $u(x, t)$  y  $T(x, t)$  (definidos en las ecuaciones (3.24)–(3.26)). La posibilidad de tal descripción macroscópica para sistemas con colisiones inelásticas viene sugerida por analogía con los fluidos moleculares. En este sentido, se suele trabajar con unas ecuaciones deducidas a partir de razonamientos heurísticos y análogos a las

de Navier-Stokes de los fluidos moleculares. La disipación de la energía cinética debida a las colisiones se tiene en cuenta introduciendo un término fuente sumidero en la ecuación de evolución de la temperatura. En consecuencia, no existe un estado de equilibrio homogéneo, sino que la solución más sencilla de estas ecuaciones viene dada por el HCS.

No obstante, la justificación de la validez de la descripción hidrodinámica, la forma de las correspondientes ecuaciones de transporte, las expresiones explícitas de los coeficientes que transporte que aparecen en ellas y el rango de validez de la teoría requieren un análisis más profundo a partir de una base microscópica más fundamental.

Al igual que en el caso de los fluidos moleculares, la teoría cinética proporciona un punto de partida apropiado para resolver estas cuestiones. A lo largo de estos años se han calculado expresiones para los coeficientes de transporte en el orden de Navier-Stokes, aplicando el conocido método de Chapman-Enskog, a partir tanto de la ecuación de Boltzmann como de la de Enskog. Sin embargo, la mayoría de las expresiones obtenidas sólo son válidas en el límite de baja disipación [77, 85-87].

En el apartado 5.3.1 se obtienen expresiones para los flujos hidrodinámicos y los coeficientes de transporte a partir de la ecuación Boltzmann en el orden de Navier-Stokes. Los coeficientes son funciones del coeficiente de restitución, y no están limitados al límite cuasielástico [59, 73]. Los detalles del método de Chapman-Enskog y los cálculos se dan en el apéndice C. En la sección 5.3.2 se utilizan estos coeficientes de transporte para analizar la estabilidad del estado de enfriamiento homogéneo, mientras que en la sección 5.3.3 se verifica la validez de esta descripción hidrodinámica en la región lineal alrededor del HCS, utilizando el método de simulación directa de Monte Carlo.

### 5.3.1 COEFICIENTES DE TRANSPORTE EN EL ORDEN DE NAVIER-STOKES

En el capítulo anterior encontramos las ecuaciones de balance (3.34)-(3.36) para un gas granular descrito por la ecuación de Boltzmann,

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (n\mathbf{u}), \quad (5.25)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -(nm)^{-1} \nabla \cdot \mathbf{P}, \quad (5.26)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = -2(dnk_B)^{-1} (\nabla \mathbf{u} : \mathbf{P} + \nabla \cdot \mathbf{q}) - T\zeta, \quad (5.27)$$

donde hemos introducido, por conveniencia, la velocidad de enfriamiento  $\zeta = 2(1 - \alpha^2)w(dnk_B T)^{-1}$ . Estas ecuaciones de balance constituyen un conjunto ce-

rado de ecuaciones hidrodinámicas para los campos  $n(\mathbf{r}, t)$ ,  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  y  $T(\mathbf{r}, t)$  una vez que el tensor de presiones  $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ , el flujo de calor  $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$  y el término de enfriamiento  $\zeta(\mathbf{r}, t)$  se expresan como funcionales de estos campos macroscópicos.

Por otro lado, sabemos que todos ellos son funcionales explícitas de  $f$  dados por las ecuaciones (3.37)–(3.39), de manera que podemos obtener una descripción cerrada a partir de una solución de la ecuación cinética que exprese enteramente la dependencia espacial y temporal de  $f$  en términos de los campos hidrodinámicos. Tal solución se suele denominar «solución normal». Una manera de obtenerla para gradientes espaciales pequeños es el método de Chapman-Enskog [88]. Las ecuaciones hidrodinámicas dependen de los gradientes del tensor de presiones y el flujo de calor, y del tensor de presiones multiplicado por un gradiente. Por consiguiente, el cálculo de  $f$  de primer orden en los gradientes (orden de Navier-Stokes) nos proporciona contribuciones a las ecuaciones hidrodinámicas hasta el segundo orden en los gradientes. Sin embargo,  $\zeta$  aparece en las ecuaciones sin gradientes adicionales, luego es necesario calcularlas hasta el segundo orden en los gradientes (orden de Burnett) por consistencia.

De esta forma, las ecuaciones de balance se convierten en un conjunto de ecuaciones hidrodinámicas aproximadas, válidas en principio para fenómenos de gran longitud de onda (escalas de longitud grandes comparados con el recorrido libre medio).

En el primer orden en los gradientes se encuentra (apéndice C)

$$P_{ij} = nk_B T \delta_{ij} - \eta \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{d} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u} \right), \quad (5.28)$$

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n, \quad (5.29)$$

donde  $\eta$  es la viscosidad tangencial,  $\kappa$  la conductividad térmica y  $\mu$  un nuevo coeficiente de transporte que acopla el gradiente de densidad con el flujo de calor y que no tiene análogo en los gases elásticos. Estos coeficientes de transporte vienen dados, en un sistema genérico  $d$ -dimensional [73], por

$$\eta^*(\alpha) \equiv \frac{\eta(\alpha)}{\eta_0} = \left[ \nu_1^*(\alpha) - \frac{\zeta^*(\alpha)}{2} \right]^{-1}, \quad (5.30)$$

$$\kappa^*(\alpha) \equiv \frac{\kappa(\alpha)}{\kappa_0} = \left[ \nu_2^*(\alpha) - \frac{2d}{d-1} \zeta^*(\alpha) \right]^{-1} [1 + 2a_2(\alpha)], \quad (5.31)$$

$$\begin{aligned} \mu^*(\alpha) &\equiv \frac{n}{T \kappa_0} \mu(\alpha) \\ &= 2\zeta^*(\alpha) \left[ \kappa^*(\alpha) + \frac{(d-1)a_2(\alpha)}{d\zeta^*(\alpha)} \right] \left[ \frac{2(d-1)}{d} \nu_2^*(\alpha) - 3\zeta^*(\alpha) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (5.32)$$



En estas expresiones

$$\eta_0 = \frac{2+d}{8} \Gamma(d/2) \pi^{-\frac{d-1}{2}} (mk_B T)^{1/2} \sigma^{-(d-1)} \quad (5.33)$$

y

$$\kappa_0 = \frac{d(d+2)^2}{16(d-1)} \Gamma(d/2) \pi^{-\frac{d-1}{2}} k_B \left( \frac{k_B T}{m} \right)^{1/2} \sigma^{-(d-1)} \quad (5.34)$$

son la viscosidad tangencial y la conductividad térmica de un gas molecular descrito por la ecuación de Boltzmann. Las funciones adimensionales introducidas en las ecuaciones (5.30)–(5.32) son

$$\zeta^*(\alpha) = \frac{2+d}{4d} (1-\alpha^2) \left( 1 + \frac{3}{16} a_2(\alpha) \right), \quad (5.35)$$

$$\nu_1^*(\alpha) = \frac{(3-3\alpha+2d)(1+\alpha)}{4d} \left[ 1 - \frac{1}{32} a_2(\alpha) \right], \quad (5.36)$$

$$\nu_2^*(\alpha) = \frac{1+\alpha}{d-1} \left[ \frac{d-1}{2} + \frac{3(d+8)(1-\alpha)}{16} + \frac{4+5d-3(4-d)\alpha}{512} a_2(\alpha) \right]. \quad (5.37)$$

El término fuente en la ecuación de la temperatura tiene la forma  $\zeta = \zeta^{(0)} + \zeta^{(2)}$ , donde  $\zeta^{(0)}$  denota la contribución de orden cero en los gradientes,

$$\zeta^{(0)} = \zeta^* \frac{n k_B T}{\eta_0}, \quad (5.38)$$

mientras que  $\zeta^{(2)}$  es de segundo orden en los gradientes y tiene una estructura de la forma

$$\begin{aligned} \zeta^{(2)} = & \zeta_1 \nabla^2 T + \zeta_2 \nabla^2 n + \zeta_3 (\nabla T)^2 + \zeta_4 (\nabla n)^2 + \zeta_5 \nabla T \cdot \nabla n \\ & + \zeta_6 \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u} + \zeta_7 \nabla \mathbf{u} : (\nabla \mathbf{u})^\dagger. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Para el análisis lineal que llevaremos a cabo en el apartado siguiente sólo necesitamos considerar las contribuciones lineales en los gradientes. Por lo tanto, limitaremos nuestra atención a  $\zeta_1$  y  $\zeta_2$ . Dejamos para el apéndice C las expresiones encontradas para estos coeficientes en dimensión  $d$ , pues son complicadas y proporcionan contribuciones a las ecuaciones de transporte que pueden ser despreciadas con mucha precisión [59].

Aunque, como ya hemos comentado, los detalles se muestran en el apéndice C, debemos precisar que todas estas expresiones para los coeficientes de transporte han sido obtenidas en la llamada primera aproximación de Sonine,

que consiste en desarrollar la función de distribución del gas en polinomios de Sonine y retener sólo las primeras correcciones que proporcionan contribuciones a los distintos flujos. Esta aproximación es muy común en gases moleculares donde ha resultado ser bastante precisa. Es de esperar que sea igualmente aplicable en los sistemas inelásticos, ya que el estado de referencia sobre el que se desarrolla, el HCS, es gaussiano en buena aproximación (ver la sección anterior). Las desviaciones respecto de la gaussiana vienen caracterizadas por  $\alpha_2(\alpha)$ , dado por la ecuación (5.16), y que, consecuentemente, nos ha aparecido en las expresiones de los coeficientes de transporte. Sela y Goldhirsch calcularon estos mismos coeficientes en dimensión  $d = 3$  por un procedimiento alternativo [87], aunque restringidos al límite de muy poca disipación. Los resultados coinciden cuantitativamente bastante bien en el límite cuasielástico común. Recientemente se ha utilizado el mismo procedimiento seguido aquí para obtener los coeficientes de transporte para  $d = 3$  a partir de la ecuación de Enskog [89], extendiendo la descripción macroscópica a densidades finitas.

### 5.3.2 ANÁLISIS DE ESTABILIDAD

En este apartado vamos a analizar la descripción hidrodinámica para estados cercanos al HCS, donde como ya vimos, la densidad  $n_H$  es uniforme,  $u_H = 0$  y la temperatura  $T_H(\tau)$  sigue la ley de Haff (5.5). De esta manera, definimos desviaciones respecto de dicho estado por medio de

$$n(x, t) = n_H + \delta n(x, t), \quad u(x, t) = \delta u(x, t), \quad T(x, t) = T_H(t) + \delta T(x, t). \quad (5.40)$$

La linealización de las ecuaciones (5.25)–(5.27) alrededor del HCS conduce a un sistema de ecuaciones en derivadas parciales con coeficientes dependientes del tiempo que no permite directamente un análisis de estabilidad. Esto es consecuencia de la dependencia temporal del estado de referencia y puede ser evitado mediante un cambio de variables temporal y adimensionalizando los campos hidrodinámicos. Definimos

$$\mathbf{x} = \frac{\nu_H(t)}{2} \left[ \frac{n}{k_B T_H(t)} \right]^{1/2} \boldsymbol{\pi}, \quad \tau = \frac{1}{2} \int_0^t dt' \nu_H(t'), \quad (5.41)$$

donde  $\nu_H = n_H k_B T_H / \tau_0(T_H)$  es una frecuencia de colisión característica. Nótese que la transformación espacial no depende del tiempo. En estas nuevas variables, la ley de variación de la temperatura (5.5) es

$$T_H(\tau) = T_H(0) e^{-2\zeta^* \tau}. \quad (5.42)$$

También introducimos los campos adimensionalizados como

$$\rho(1, \tau) = \frac{\delta n(1, \tau)}{n_H}, \quad \omega(1, \tau) = \left[ \frac{m}{k_B T_H(\tau)} \right]^{1/2} \delta u(1, \tau), \quad \theta(1, \tau) = \frac{\delta T(1, \tau)}{T_H(\tau)}. \quad (5.43)$$

Cuando se utilizan las nuevas variables y los nuevos campos, las ecuaciones hidrodinámica linealizadas quedan

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial \tau} = -ik\omega_{k\parallel}, \quad (5.44)$$

$$\frac{\partial \omega_{k\parallel}}{\partial \tau} = \left( \zeta^* - \frac{d-1}{d} \eta^* k^2 \right) \omega_{k\parallel} - ik\theta_k - ik\rho_k, \quad (5.45)$$

$$\frac{\partial \omega_{k\perp}}{\partial \tau} = \left( \zeta^* - \frac{1}{2} \eta^* k^2 \right) \omega_{k\perp}, \quad (5.46)$$

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial \tau} = - \left( \zeta^* + \frac{d+2}{2(d-1)} \kappa^* k^2 \right) \theta_k - \left( 2\zeta^* + \frac{d+2}{2(d-1)} \mu^* k^2 \right) \rho_k - \frac{2}{d} ik\omega_{k\parallel}. \quad (5.47)$$

Hemos introducido la transformada de Fourier de los campos hidrodinámicos, definida para la densidad como

$$\rho_k(\tau) = \int dl e^{-ik \cdot l} \rho(1, \tau), \quad (5.48)$$

y análogamente para los otros campos. No hemos considerado las contribuciones que provienen del término  $\zeta^{(2)}$ , ya que simplemente proporcionan pequeñas correcciones a las ecuaciones de arriba y pueden ser despreciadas. En estas ecuaciones  $\omega_{k\parallel}$  y  $\omega_{k\perp}$  son respectivamente las componentes longitudinal y perpendicular del campo de velocidad respecto del vector de onda  $k$ . La ecuación (5.46) proporciona directamente la evolución temporal de las  $(d-1)$  componentes transversales del campo de velocidad escalada

$$\omega_{k\perp}(\tau) = \omega_{k\perp}(0) e^{s_{\perp} \tau}, \quad (5.49)$$

donde  $s_{\perp}$  es el autovalor asociado a estos modos tangenciales,

$$s_{\perp} = \zeta^* - \frac{1}{2} \eta^* k^2. \quad (5.50)$$

Teniendo en cuenta las definiciones en (5.43) y la ley de variación de la temperatura en la forma (5.42), se obtiene para la evolución del campo de velocidades (sin escalar)

$$u_{k\perp}(\tau) = u_{k\perp}(0) e^{-\eta^* k^2 \tau/2}. \quad (5.51)$$

Por tanto, las perturbaciones de estas componentes de la velocidad siempre decaen en el tiempo. Las componentes transversales del campo de velocidad están directamente relacionadas con la vorticidad  $\nabla \times u$ , pues su transformada de Fourier, en nuestras variables adimensionales, es  $k \times \omega_k = k \times \omega_{k\perp}$ .

La evolución de los tres campos hidrodinámicos restantes viene dada por un sistema de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden. Este problema se resuelve escribiendo el sistema de ecuaciones (5.44), (5.45) y (5.47) en forma matricial y encontrando los autovectores y autovalores asociados a la matriz que aparece en el segundo miembro. Si el conjunto de autovectores forma una base (como es el caso, pues se obtienen tres autovalores distintos), entonces cualquier solución podrá escribirse como una combinación lineal de estos autovectores (que no dependen de  $\tau$ ) multiplicados por  $\exp[s_j(\alpha, k)\tau]$ , donde  $s_j(\alpha, k)$  son los correspondientes autovalores y  $j$  es un índice que etiqueta los tres autovalores. Estos deben ser raíces del polinomio característico, es decir, soluciones de la ecuación algebraica

$$\begin{aligned}
 s^3 + \left[ \frac{d+2}{2(d-1)}\kappa^* + \frac{d-1}{d}\eta^* \right] k^2 s^2 + \left[ \frac{d+2}{2d} k^4 \eta^* \kappa^* \right. \\
 \left. + \frac{1}{d} k^2 \left( d+2 + (d-1)\zeta^* \eta^* - \frac{d(d+2)}{2(d-1)} \zeta^* \kappa^* \right) - \zeta^{*2} \right] s \\
 \left. + \left[ \frac{d+2}{2(d-1)} (\kappa^* - \mu^*) k^2 - \zeta^* \right] k^2 = 0.
 \end{aligned} \quad (5.52)$$

Estos autovalores han sido calculados numéricamente por vez primera en la referencia [90], aunque utilizando unos coeficientes de transporte obtenidos heurísticamente y, por tanto, distintos a los presentados aquí. Como las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas se han deducido en el primer orden en los gradientes (véase el apartado anterior), sólo son válidas para describir procesos con longitudes de onda grandes comparados con el recorrido libre medio, es decir,  $k \ll 1$ . En el caso particular de colisiones elásticas,  $\alpha = 1$ , se obtiene un autovalor real asociado con el modo de difusión del calor y dos autovalores complejos (uno conjugado del otro) que corresponden a los modos de propagación del sonido. No obstante, los autovalores y los autovectores no son analíticos alrededor del punto  $\alpha = 1$  y  $k = 0$ , de forma que, incluso en el límite de  $\alpha$  muy próximo a la unidad, los modos hidrodinámicos deben interpretarse con cuidado. En la figura 5.12 hemos representado la parte real de todos los autovalores para un sistema tridimensional con  $\alpha = 0.8$ , obtenidos a partir de la ecuación (5.52). Los resultados son muy parecidos para otros valores del coeficiente de restitución (ver figura 5.18). Los modos tangenciales han sido etiquetados con el símbolo  $\langle \perp \rangle$ . En el límite  $k \ll \zeta^*$  todos los autovalores son reales y no existe propa-

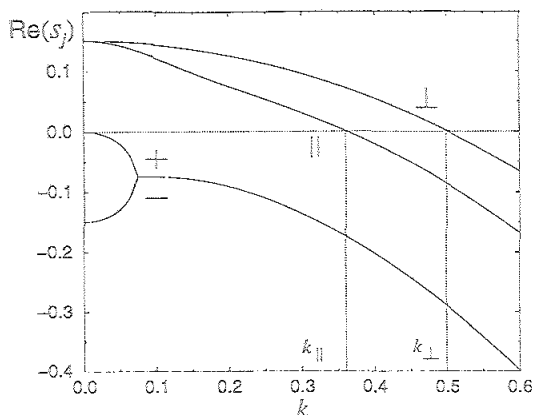


FIGURA 5.12: Relaciones de dispersión de un gas de esferas duras inelásticas ( $d = 3$ ) con  $\alpha = 0.8$ . Sólo se representa la parte real de los autovalores.

gación. Para  $k$  mayores, dos autovalores se vuelven complejos conjugados y los correspondientes modos (sonoros) muestran propagación ( $\pm$ ). Hemos denotado por  $\ll$  el modo asociado a la conducción del calor, pues en el límite  $k \ll \zeta^*$  se asocia directamente a las fluctuaciones de la velocidad longitudinal. En el límite  $k \gg (\zeta^*)^{1/2}$  los modos pueden interpretarse de forma análoga al caso elástico.

Las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas caracterizan la estabilidad del estado de enfriamiento homogéneo. Los autovalores asociados a los modos tangenciales y del calor son positivos para  $k < k_{\perp}$  y  $k < k_{\parallel}$ , respectivamente, donde

$$k_{\perp} = \left( \frac{2\zeta^*}{\eta^*} \right)^{1/2}, \quad k_{\parallel} = \left[ \frac{2(d-1)}{(d+2)(\kappa^* - \mu^*)} \right]^{1/2}. \quad (5.53)$$

De esta manera, las perturbaciones iniciales alrededor del HCS que exciten estos modos van a crecer exponencialmente en la variable  $\tau$ . Puede comprobarse fácilmente a partir de las ecuaciones (5.41) y (5.42) que esto se traduce en un crecimiento algebraico en la variable temporal  $t$ ,

$$e^{\tau} = \left( 1 + \frac{t}{t_0} \right)^{1/\zeta^*}, \quad (5.54)$$

donde  $t_0^{-1} = \nu_H(0)\zeta^*/2$ . No obstante, ya hemos visto que la velocidad transversal real (sin escalar) decae siempre en el tiempo. Podría ocurrir que las variables escaladas fueran inestables y sin embargo todas las perturbaciones en las variables de partida decayeran en el tiempo, habiendo en realidad una inestabilidad

relativa. Sin embargo, la densidad reducida, definida en la ecuación (5.43), sólo se escala con la densidad media del sistema  $n_M$ , que no depende del tiempo. En consecuencia, los modos asociados a un número de onda  $k < k_H$  van a provocar una inestabilidad absoluta de la densidad. De esta manera, el HOS es linealmente inestable ante fluctuaciones espaciales. A medida que la perturbación se vuelve más grande el sistema se sale del régimen lineal y es necesario considerar el conjunto completo de ecuaciones hidrodinámicas no lineales para comprender la evolución del sistema y su posible estabilidad. No obstante, para que esto se produzca las perturbaciones tienen que producirse con longitudes de onda suficientemente grandes. En consecuencia, los efectos del tamaño finito del sistema son importantes. En particular, las distintas inestabilidades no se producen cuando el sistema es suficientemente pequeño. Este punto se discutirá con más detalle en la sección siguiente.

### 5.3.3 VALIDEZ DE LA HIDRODINÁMICA LINEAL

En el apartado anterior hemos obtenido una descripción hidrodinámica a partir de la ecuación de Boltzmann, suponiendo que el método de Chapman-Enskog puede utilizarse para generar una solución normal de la ecuación cinética. Esto requiere una separación clara entre la escala de tiempo que gobierna las excitaciones cinéticas del sistema (las escalas asociadas a la evolución temporal de la función de distribución) y la escala de tiempo, mucho más lenta, en la cual se mueven los campos hidrodinámicos. Esta separación está bien establecida en el caso de los gases moleculares, pero la situación es más complicada cuando las colisiones no son elásticas. La evolución temporal de los campos hidrodinámicos no está determinada exclusivamente por sus gradientes espaciales, sino que existe otra escala temporal asociada al ritmo de decrecimiento de la temperatura que proviene del carácter inelástico del sistema. En este sentido, se podría decir que existen dos escalas de tiempo hidrodinámicas: una asociada a los gradientes macroscópicos y otra que se sigue directamente de la disipación en las colisiones. Sin embargo, la dificultad no estriba en cuándo estas escalas están separadas o no unas de otras, sino en cuándo ambas son mucho más grandes que las asociadas a los (microscópicos) modos cinéticos.

Existe cierta controversia sobre la validez de la descripción hidrodinámica más allá del límite cuasielástico [91,92]. Debido a que la nueva escala de tiempo asociada a la disipación de la energía es más rápida que la escala hidrodinámica de los fluidos moleculares, podría darse el caso que no existiese separación de escala entre los modos hidrodinámicos y los cinéticos. Sólo se puede dar una respuesta definitiva a esta cuestión resolviendo exactamente la ecuación cinética, lo cual parece lejos de ser factible en la actualidad. Un método alternativo

consiste en construir soluciones numéricas de la ecuación de Boltzmann y compararlas con las soluciones obtenidas suponiendo la validez de la descripción hidrodinámica [74]. Esto es lo que haremos en este apartado.

Hemos realizado simulaciones DSMC de un sistema tridimensional en el que las condiciones iniciales consistían en pequeñas perturbaciones alrededor del HCS, de forma que es de esperar que sean aplicables las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas (5.44)–(5.47). Más concretamente, seguimos el procedimiento siguiente. Inicialmente las partículas estaban uniformemente distribuidas con una distribución de velocidades gaussiana. Después de un pequeño intervalo de tiempo el sistema alcanzaba el HCS. Entonces se introducía una pequeña perturbación en los campos hidrodinámicos, tomando este instante de tiempo como  $t = 0$ . Las simulaciones se han llevado a cabo típicamente con  $2 \cdot 10^5$  partículas y los datos han sido promediados sobre 100 trayectorias. Hemos considerado un sistema de tamaño  $L$  en la dirección en la cual analizamos los gradientes de los campos hidrodinámicos, tomada como el eje  $x$ . En esta dirección aplicamos condiciones periódicas de contorno, mientras que el sistema es forzado a ser homogéneo con respecto a las coordenadas  $y$  y  $z$  (utilizando capas en vez de celdas).

En esta geometría «unidimensional», podemos definir las transformadas de Fourier de los campos hidrodinámicos escalados como

$$\rho_k = \frac{1}{L} \int_0^L dx e^{-iqx} \rho(x), \quad (5.55)$$

y lo mismo para  $\theta$  y  $\omega$ , donde  $q$  es el número de onda (sin escalar) correspondiente a  $k$ , es decir,  $q = \frac{1}{2} \nu_H (m/k_B T_H)^{1/2} k$ .

La primera perturbación macroscópica que hemos considerado consiste en una perturbación armónica de la componente transversal de la velocidad,

$$u_y(x, 0) = u_0 \sin(q_0 x). \quad (5.56)$$

En nuestras simulaciones tomamos  $u_0 = 0.1 [2k_B T(0)/m]^{1/2}$  y  $q_0 = 2\pi/L$ . De acuerdo con la ecuación (5.51), la evolución temporal de la perturbación debe seguir la ley

$$u_y(x, 0) = u_\tau \sin(q_0 x), \quad u_\tau = u_0 e^{-\pi^* k_0^2 \tau/2}, \quad (5.57)$$

donde  $k_0 = 2\nu_H^{-1} (k_B T_H/m)^{1/2} q_0$ . En la figura 5.13 hemos representado el perfil  $u_y(x)$  en tres instantes de tiempo obtenidos en una simulación típica. Los valores de los parámetros en este caso son  $\alpha = 0.85$  y  $L = 50 l_0$ , siendo  $l_0$  el recorrido libre medio (ver capítulo 4). Los puntos corresponden a los resultados de simulación y la línea continua a la predicción teórica (5.57). El ajuste es

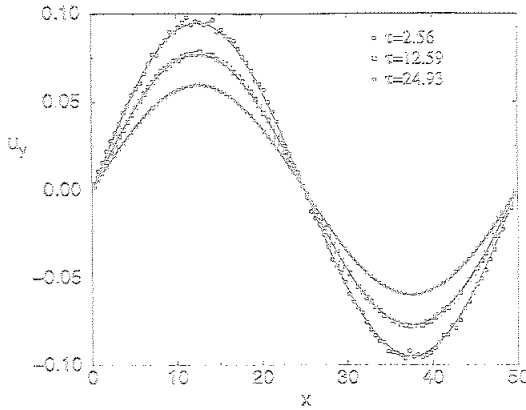


FIGURA 5.13: Velocidad transversal en tres instantes de tiempo después de una perturbación inicial armónica en un sistema con  $\alpha = 0.85$ . La velocidad se mide en unidades de  $(2k_B T(0)/m)^{1/2}$  y  $x$  en unidades del recorrido libre medio  $l_0$ . Los símbolos son el resultado de la simulación y las líneas continuas las predicciones teóricas.

excelente. Obsérvese que el campo de velocidades macroscópico siempre decae en el tiempo, mientras que la correspondiente magnitud escalada puede aumentar, dependiendo del valor del vector de onda. En particular, en la simulación presentada en la figura 5.13, con un número de onda  $k_0 = 0.197$ ,  $\omega_y$  debe crecer exponencialmente, pues el autovalor correspondiente ( $s_{\perp}$ ) es positivo.

Con objeto de obtener una comparación más cuantitativa hemos ajustado numéricamente el perfil transversal de velocidad a una curva sinusoidal de longitud de onda  $L$  en distintos intervalos de tiempo. En concordancia con la ecuación (5.57), la amplitud de dicha función decae exponencialmente con  $\tau$ , de manera que la pendiente del logaritmo de esta función nos proporciona el valor numérico de la viscosidad tangencial  $\eta^*(\alpha)$ . Realizamos simulaciones para varios valores de  $\alpha$  dentro del intervalo  $0.625 \leq \alpha \leq 0.925$ . El análisis de valores más pequeños del coeficiente de restitución es muy complicado, pues el sistema se vuelve rápidamente inestable y es muy difícil obtener una estadística suficientemente buena. En la figura 5.14 se comparan los valores numéricos de la velocidad tangencial con las predicciones teóricas de la ecuación (5.30). La primera conclusión que se puede hacer de estos resultados es que existe una dependencia relevante del coeficiente de viscosidad reducido con el coeficiente de restitución, éste aumenta a medida que  $\alpha$  disminuye. Para  $\alpha = 0.8$  esta reducción es del orden del 10%. No obstante, aunque las predicciones de la teoría concuerdan bastante bien con los valores de la simulación, existe una pequeña desviación sistemática. Creemos que esto es debido en parte a las aproximaciones que



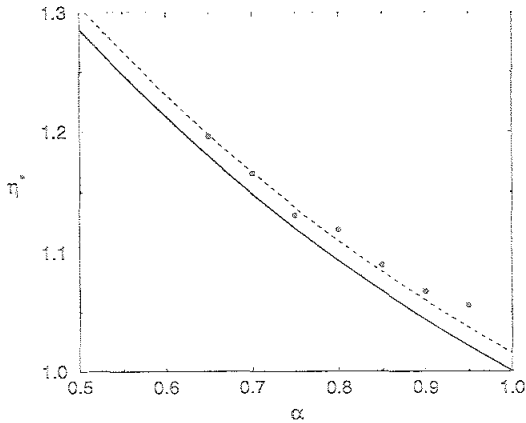


FIGURA 5.14: Viscosidad tangencial reducida  $\eta^*$  en función del coeficiente de restitución  $\alpha$ . Los puntos son el resultado de la simulación y la línea continua la ecuación (5.30) con  $d = 3$ . La línea discontinua se obtiene multiplicando el valor de  $\eta^*$  teórico por el factor constante 1.016, calculado en el límite elástico.

hemos utilizado al aplicar el método de Chapman-Enskog; y, en particular, al evaluar los coeficientes de transporte en la primera aproximación de Sonine. De hecho, se sabe que el cálculo del orden siguiente en el desarrollo de Sonine proporciona un factor de corrección de 1.016 para la viscosidad tangencial en el límite  $\alpha = 1$  [93]. Si se tiene en cuenta este factor, la teoría concuerda mejor con la simulación (línea discontinua en la figura 5.14). Otra fuente de discrepancia proviene del crecimiento de la amplitud de la perturbación escalada  $\omega_{\perp}$ , la cual, en última instancia, invalida el análisis lineal.

Se podría argumentar que la velocidad transversal es un campo hidrodinámico muy especial, ya que está desacoplada de los demás campos; de forma que debería presentarse la evolución de una perturbación más general para verificar la validez de la descripción hidrodinámica lineal. Por este motivo, hemos analizado la evolución temporal de los restantes campos hidrodinámicos cuando se introduce una perturbación inicial de la forma

$$\rho(x, 0) = \rho_0 \text{sen}(q_0 x), \quad (5.58)$$

donde  $q_0$  es el mismo que en la ecuación (5.56). Esta perturbación posee componentes a lo largo de los tres autovectores de la matriz asociada al problema lineal definido por las ecuaciones (5.44), (5.45) y (5.47). De esta forma, no sólo la densidad sino también la temperatura y la componente longitudinal de la velocidad se desvían de sus valores de referencia para  $t > 0$ . En el régimen lineal éstos vienen dados por funciones armónicas de longitud de onda  $L$ . En la

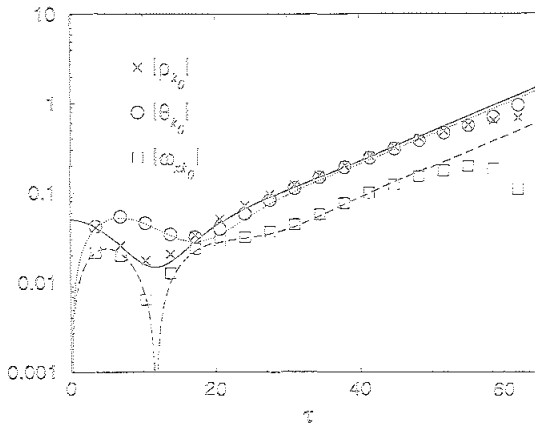


FIGURA 5.15: Evolución temporal de las componentes de Fourier de la densidad escalada  $\rho$ , la temperatura  $\theta$  y la velocidad longitudinal  $\omega_x$  a partir de una perturbación armónica de la densidad en un sistema con  $\alpha = 0.8$  y  $L = 50 l_0$ . Los símbolos son el resultado de la simulación y las líneas las predicciones de la hidrodinámica.

figura 5.15 mostramos la evolución temporal de las amplitudes de Fourier de los campos hidrodinámicos mencionados para la perturbación dada por la ecuación (5.58) con  $\rho_0 = 0.1$ ,  $\alpha = 0.8$  y  $L = 50 l_0$ . Los otros parámetros de la simulación son los mismos que en la figura 5.13. Las líneas continuas han sido obtenidas resolviendo numéricamente las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas. El acuerdo con los resultados de simulación de la ecuación de la Boltzmann es nuevamente excelente y se extiende sobre un intervalo de tiempo bastante grande. Para otros valores de  $\alpha$  y  $L$  se obtienen resultados similares, comprobándose la validez de la hidrodinámica para describir la evolución temporal de un gas granular diluido, al menos en las proximidades del HCS.

Se puede observar en la figura 5.15 que los tres campos hidrodinámicos representados crecen exponencialmente después de un intervalo de tiempo transitorio. Además todos crecen con el mismo valor de la pendiente en la gráfica semilogarítmica. Esto es consistente con la descripción hidrodinámica, pues en este caso  $s_{||}$  es positivo, mientras que la parte real de los autovalores asociados a los modos sonoros son siempre negativos. Así, la dependencia temporal de los campos  $\rho$ ,  $\omega_{||}$  y  $\theta$  debe acabar siendo dominada por el modo  $s_{||}$ , tomando la forma  $\exp(s_{||}\tau)$ . En la figura 5.15 se observa también que los campos acaban desviándose de esta ley exponencial, pero esto es lógico, porque al crecer las amplitudes en el tiempo, el sistema completo se acaba saliendo del régimen lineal. Sin embargo, se pueden utilizar los resultados de simulación en el intervalo de tiempo en el que los campos mencionados crecen con la misma pendiente para

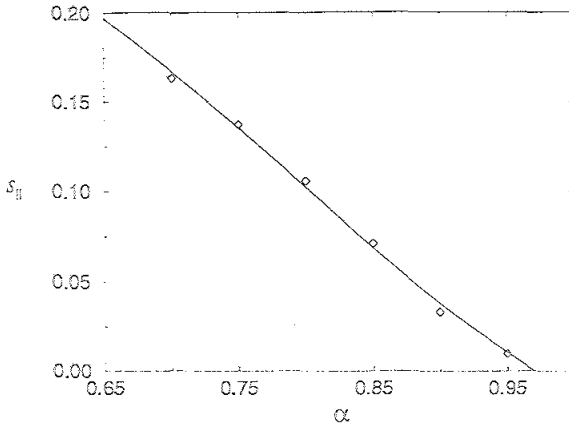


FIGURA 5.16: El autovalor  $s_{||}$  para distintos valores del coeficiente de restitución y  $k = 0.1406$ , equivalente a  $L = 70 l_0$ . Los símbolos son el resultado de la simulación de Monte Carlo y la línea continua la predicción teórica de las ecuaciones hidrodinámicas.

calcular el valor numérico de  $s_{||}$ . Hemos repetido este análisis para distintos valores del coeficiente de restitución dentro del intervalo  $0.7 \leq \alpha \leq 0.95$ . En la figura 5.16 hemos representado el  $s_{||}$  obtenido a partir de la simulación en función de  $\alpha$  para un número de onda fijo  $k = 0.1406$ , comparándolo con la predicción teórica de la ecuación (5.52). El acuerdo entre ambos es muy bueno, mostrando la capacidad de la hidrodinámica para describir cualitativa y cuantitativamente los flujos granulares diluidos no sólo en el límite de muy baja disipación, sino sobre un amplio margen de valores del coeficiente de restitución. En la referencia [94] se analiza  $s_{||}$  en función de  $k$  manteniendo  $\alpha$  constante a través del factor de estructura de un sistema de discos duros con simulaciones de Dinámica Molecular, llegando también a la conclusión que la hidrodinámica predice correctamente las observaciones de sus simulaciones.

Tal como se ha explicado, en la figura 5.15 se puede observar cómo la amplitud de la densidad del primer modo de Fourier aumenta progresivamente en el tiempo, provocando que el sistema sea cada vez más inhomogéneo. Uno podría preguntarse en qué termina todo esto y si éste es el mecanismo responsable de la formación de agregados en el sistema. En la sección siguiente veremos que no es mecanismo dominante.

## 5.4 ORIGEN DE LA FORMACIÓN DE AGREGADOS

Uno de los fenómenos más peculiares de los medios granulares, en contraposición con los fluidos moleculares, es su tendencia a formar agregados de

partículas o regiones de alta densidad cuando evolucionan libremente. El origen de esta tendencia parece ser la inestabilidad de las ecuaciones hidrodinámicas debida a la presencia del término sumidero de disipación. Goldhirsch y Zanetti [50] propusieron el siguiente razonamiento cualitativo para explicar la formación de estos agregados: supongamos que en un determinado instante la densidad de una región del fluido aumenta debido a una fluctuación. En un fluido atómico o molecular la presión se incrementa localmente y estabiliza el sistema. Sin embargo, en un fluido granular, al aumentar la frecuencia de colisión en esa región, la temperatura disminuye con respecto a sus alrededores debido a la mayor disipación en las colisiones. Si la disminución en temperatura es mayor que el incremento en densidad, de modo que disminuye la presión en dicha región, más partículas son atraídas a la región involucrada y se forma un agregado (o *cluster*). Sin embargo, aún aceptando este argumento, dos mecanismos muy distintos podrían en principio ser los responsables de la formación de los agregados. En la referencia [50] se considera una fluctuación del modo de velocidad transversal que crece y se acopla no linealmente con la temperatura, de manera que se produce un calentamiento viscoso del sistema en las regiones de mayor vorticidad. Así, la presión deja de ser constante y se forman los agregados por el procedimiento descrito anteriormente. Otra posibilidad sería que la fluctuación inicial de densidad no sea más que un efecto lineal debido a la inestabilidad del modo paralelo [94, 95]. En el primer mecanismo, la formación de regiones de alta densidad está íntimamente ligada a la formación de vórtices de velocidad en el sistema, mientras que ambos fenómenos son considerados totalmente independientes en el segundo. Nuestro propósito en esta sección es discriminar entre los dos mecanismos. Para ellos nos valdremos del método de simulación DSMC, que nos permitirá seguir en detalle la evolución de los distintos campos hidrodinámicos.

En las simulaciones de medios granulares que evolucionan libremente a partir de un estado inicialmente homogéneo se observan varios regímenes sucesivos [96]. Durante un primer periodo de tiempo, el sistema se mantiene en el estado de enfriamiento homogéneo, con la temperatura disminuyendo de acuerdo con la ley de Hañ (5.5). Después van apareciendo gradualmente inhomogeneidades espaciales en el campo de velocidades; en particular se van formando vórtices en el sistema. En este punto, el campo de densidad se vuelve ligeramente inhomogéneo, aunque estas inhomogeneidades no se convierten en verdaderos agregados hasta mucho más tarde. En la figura 5.17 hemos representado el campo de velocidades y de densidad en un instante dado, obtenidos utilizando el método DSMC para un medio granular de discos duros ( $d = 2$ ) que evoluciona libremente. Los colores más oscuros en la figura 5.17 (b) corresponden a las densidades más bajas. Se puede observar que existe una correlación entre las

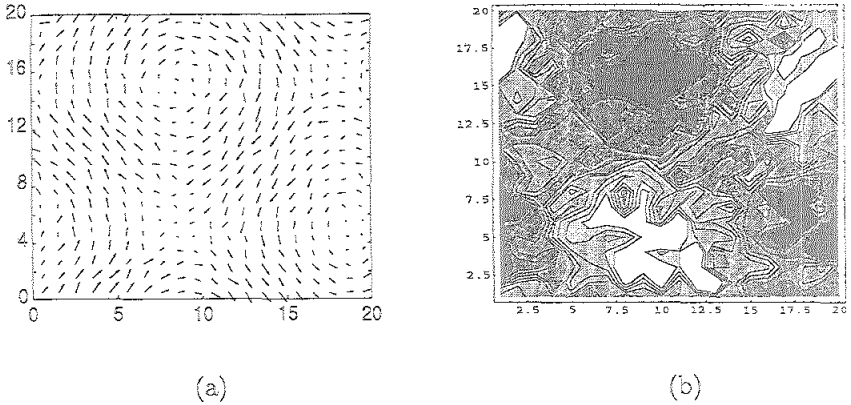


FIGURA 5.17: Campo de velocidades (a) y mapa de contorno de la densidad (b) de un medio de discos duros con un coeficiente de restitución  $\alpha = 0.8$  que evoluciona libremente. Las flechas del campo de velocidades es proporcional a la velocidad local del fluido. Los colores más oscuros corresponden a las densidades más bajas, siempre en el rango  $0.75 \leq n/n_H \leq 1.25$ . La posición se mide en unidades del recorrido libre medio inicial.

regiones de alta y baja densidad y los vórtices que se han desarrollado en el sistema, correspondiéndose una menor densidad al centro de los vórtices. Resultados similares se obtienen con simulaciones de Dinámica Molecular [50,95,96].

Como vimos en la sección anterior, la inestabilidad lineal del estado de enfriamiento homogéneo es una consecuencia de la disipación de la energía en las colisiones. La densidad y la cantidad de movimiento son magnitudes que se conservan y el ritmo de decaimiento de fluctuaciones de estas cantidades es más lento cuanto más grande es la longitud de onda asociada. De esta manera, las fluctuaciones con una longitud de onda suficientemente grande van a decaer más lentamente que el ritmo de enfriamiento debido a las colisiones, que por otra parte está determinado localmente. En la figura 5.18 se muestra las relaciones de dispersión para un gas de esferas duras ( $d = 3$ ) y  $\alpha = 0.95$ .

En un sistema finito no se pueden dar perturbaciones o fluctuaciones con un vector de onda arbitrario. Por simplicidad supongamos que sólo hay una dirección del espacio relevante (en el sentido que sólo se consideran gradientes en esa dirección), en la cual la longitud del sistema es  $L$ . Entonces, sólo son posibles números de onda múltiplos de  $q_0 = 2\pi/L$ . Denotemos por  $k_0$  es número de onda adimensional correspondiente a  $q_0$  tal cómo se hace en el apartado 5.3.3. Los valores límite  $k_{\perp}$  y  $k_{\parallel}$  que se observan en la figura 5.18 vienen dados en función del coeficiente de restitución por las ecuaciones (5.53). En un sistema suficientemente pequeño, es decir, en el que  $k_{\perp} < k_0$ , todas las fluctuaciones

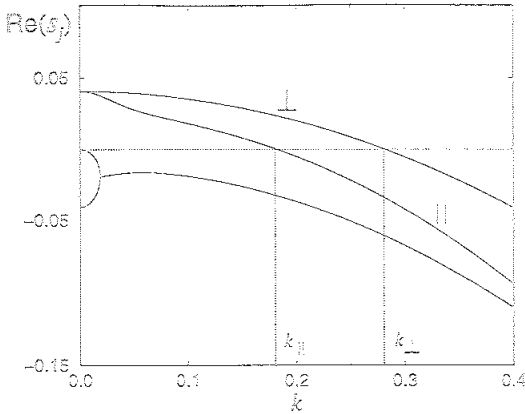


FIGURA 5.18: Relaciones de dispersión para un gas granular diluido de esferas duras ( $d = 3$ ) con  $\alpha = 0.95$ . Sólo se representa la parte real de los autovalores.

decaen en el tiempo y el sistema es estable. Si el tamaño del sistema es suficientemente grande, de forma que  $k_{\parallel} < k_0 < k_{\perp}$ , la velocidad transversal escalada es inestable y aparecen vórtices. Esta es la situación de la figura 5.17; donde, por otra parte, se observa que la densidad está lejos de ser homogénea (lo que sugiere que es el acoplo, que sólo puede ser no lineal, entre densidad y vorticidad el responsable de la formación de agregados). En el caso de que  $k_0 < k_{\parallel}$ , la densidad es absolutamente inestable y se forman inhomogeneidades en densidad aún en el régimen lineal.

En el apartado 5.4.1 analizaremos los dos mecanismos posibles para la formación de agregados a partir de la simulación de un sistema en el que todas las componentes del campo de velocidad son perturbadas externamente en un instante dado. Dicho análisis nos llevará a proponer en el apartado 5.4.2 un modelo hidrodinámico sencillo que avala el mecanismo no lineal para explicar lo que se observa en las simulaciones. Finalmente, en el apartado 5.4.3 discutiremos el caso del crecimiento de una fluctuación espontánea, así como el estado final que parece alcanzar.

#### 5.4.1 RESPUESTA A UNA PERTURBACIÓN DEL CAMPO DE VELOCIDADES

En todas las simulaciones DSMC que presentaremos en lo que resta de sección, hemos considerado un sistema de esferas duras ( $d = 3$ ) inelásticas entre dos planos perpendiculares al eje  $x$  y separadas una distancia  $L$ . Se han aplicado condiciones periódicas de contorno en esta dirección, mientras que en las otras se

forzaba al sistema a ser homogéneo utilizando capas en vez de celdas. De esta manera, además de simplificar considerablemente el problema, pues sólo hay una dirección relevante, se incrementa la estadística. Típicamente, realizamos simulaciones de  $5 \times 10^6$  partículas, dividiendo al sistema en 120 capas. En cada simulación, se comenzaba con un sistema homogéneo con una distribución de velocidades isotrópica y se dejaba evolucionar hasta que alcanzaba el HCS. Entonces, se introducía una perturbación externa del campo de velocidades dada por

$$\omega(x, 0) = \omega_0 \text{sen}(q_0 x), \quad (5.59)$$

donde  $q_0 = 2\pi/L$  y  $\omega_0$  es un vector de componentes  $\omega_{0x} = \omega_{0y} = \omega_{0z} = \omega_0$ . En este caso,  $\omega_y$  y  $\omega_z$  son las componentes transversales de la velocidad, mientras que  $\omega_x$  es la componente longitudinal, pues sólo son posibles gradientes en la dirección de  $x$ . Utilizando las definiciones de la sección anterior, el número de onda adimensional más pequeño permitido es  $k_0 = 2\nu_H^{-1}(k_B T_H/m)^{1/2} q_0$ .

En la figura 5.19 se muestran los resultados numéricos de los perfiles hidrodinámicos de un sistema con  $\alpha = 0.95$  y  $L = 60l_0$ . La amplitud inicial de la perturbación es  $\omega_0 = 0.05\sqrt{2}$ . En este sistema  $k_0 \simeq 0.164$ , luego a partir de las relaciones de dispersión representadas en la figura 5.18 se tiene que  $k_0 < k_{\parallel} < k_{\perp}$  y  $k_{\perp} < 2k_0$ . De esta manera, todos los modos hidrodinámicos con  $k = k_0$  deben crecer exponencialmente en la variable temporal escalada  $\tau$ , mientras que todos los demás, y en particular los segundos modos con  $k = 2k_0$  deben ser linealmente estables y decaer exponencialmente. Concretamente, es claro que la aparición y crecimiento de una componente de cualquier campo hidrodinámico (escalado) correspondiendo al modo  $2k_0$  sólo puede ser debido a acoplamientos no lineales. Escogimos precisamente este valor de  $L = 60l_0$  para que se cumpliera esta condición, manteniéndose, no obstante,  $k_0$  suficientemente pequeño para esperar que sea válida la descripción hidrodinámica presentada en la sección anterior, que está restringida a gradientes pequeños.

Los perfiles mostrados en la figura 5.19 corresponden al instante  $\tau = 148.5$ . Se puede observar que la componente transversal de la velocidad  $\omega_y$  todavía viene bien descrita por la función sinusoidal asociada al armónico más bajo. De hecho, el análisis de la amplitud muestra que se sigue cumpliendo en este instante la ley lineal dada por la ecuación (5.49). La otra componente transversal,  $\omega_z$ , sigue un comportamiento similar. Por otro lado, las figuras indican que los perfiles de densidad, temperatura y velocidad longitudinal están dominados por el segundo armónico, esto es, por las componentes de Fourier correspondientes a  $k = 2k_0$ . Además, las amplitudes de estos coeficientes aumentan en el tiempo, contrariamente a los resultados obtenidos del análisis lineal de las ecuaciones hidrodinámicas. Obsérvese que la amplitud de la perturbación longitudinal es-

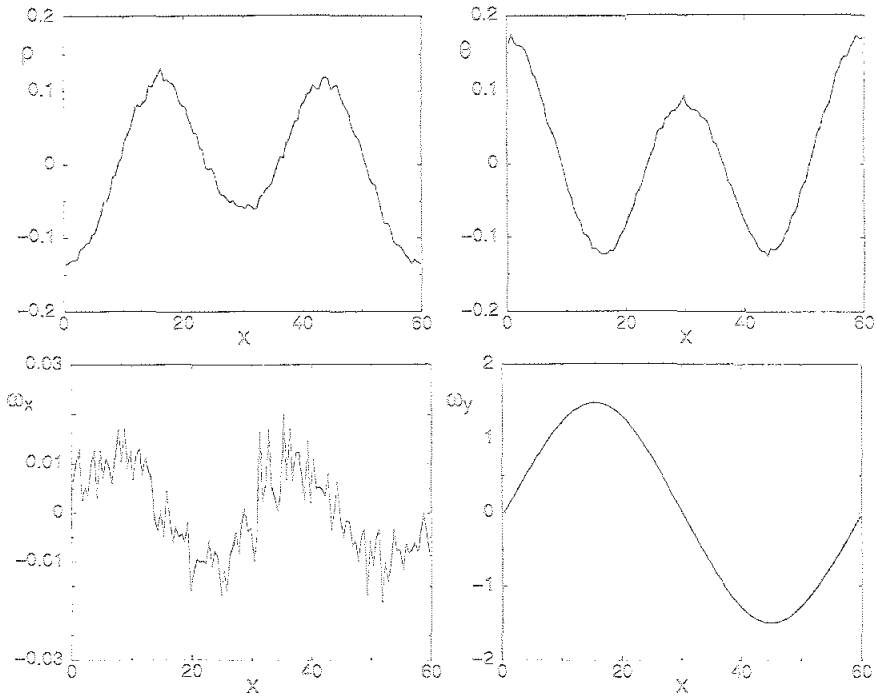


FIGURA 5.19: Perfiles de densidad  $\rho$ , temperatura  $\theta$ , velocidad longitudinal  $\omega_x$  y transversal  $\omega_y$ , en el instante  $\tau = 148.5$  a partir de la perturbación inicial armónica dada por la ecuación (5.59). La posición se mide en unidades del recorrido libre medio  $l_0$ . El coeficiente de restitución es  $\alpha = 0.95$ .

calada de la velocidad  $\omega_x$  se mantiene acotada por su valor inicial, mientras que las componentes transversales de la perturbación se han incrementado dos órdenes de magnitud. Todo esto sugiere de forma nítida que el campo de velocidad transversal ha esclavizado los otros campos hidrodinámicos a través de un acoplamiento no lineal. Se han obtenido resultados similares para otros valores del coeficiente de restitución en el rango  $0.675 \leq \alpha \leq 0.95$ .

#### 5.4.2 CONTRIBUCIONES DE LOS MODOS HIDRODINÁMICOS NO LINEALES

Como la principal contribución al comportamiento no lineal del sistema parece ser provenir, al menos en las primeras etapas de la evolución, de las componentes transversales del campo de velocidades, hemos intentado construir una teoría hidrodinámica basada en esta idea. Para una perturbación  $\delta u(x)$ , el término



no lineal que da cuenta del calentamiento viscoso debido a un flujo tangencial en la ecuación de la temperatura (5.27) es  $-2(3n\kappa_B)^{-1}\eta[(\partial\delta u_y/\partial x)^2 + (\partial\delta u_x/\partial x)^2]$  ( $d=3$ ). Si se mantiene este término cuando se linealiza la ecuación de la temperatura alrededor del HCS, se obtiene

$$\left[\frac{\partial}{\partial\tau} + \zeta^* + \frac{5}{4}\kappa^*k^2\right]\theta_k + \left[2\zeta^* + \frac{5}{4}\mu^*k^2\right]\rho_k + \frac{2}{3}ik\omega_{xk} + \frac{1}{3}\eta^*k_0^2 \sum_{j_1=-\infty}^{\infty} j_1(j-j_1)[\omega_{y j_1 k_0}\omega_{y(j-j_1)k_0} + \omega_{z j_1 k_0}\omega_{z(j-j_1)k_0}] = 0, \quad (5.60)$$

donde hemos escrito  $k = jk_0$ , siendo  $j$  un número entero, y hemos tenido en cuenta que en la simulación sólo se consideran los gradientes en la dirección  $x$ . La transformada de Fourier de los campos hidrodinámicos se definen en este caso como en la ecuación (5.55).

Ya hemos visto que en los intervalos de tiempo que estamos considerando, las componentes transversales de la velocidad vienen todavía bien descritas por la aproximación lineal, mientras que los otros campos hidrodinámicos muestran fuertes acoplos no lineales. Nuestro modelo sencillo intenta explicar estas influencias únicamente a través del término de calentamiento viscoso, mientras que consideramos válidas las otras ecuaciones obtenidas para el régimen lineal. Por lo tanto, utilizando la ecuación (5.49), sustituimos  $\omega_{yk}(\tau)$  y  $\omega_{zk}(\tau)$  en (5.60) por  $-i\frac{1}{2}\omega_0 \exp(s_{\perp}\tau)$ . De esta forma, la ecuación (5.60) junto con el resto de ecuaciones linealizadas (5.44)–(5.45) forman un sistema de ecuaciones diferenciales lineales, aunque inhomogéneas.

Las aproximaciones que estamos utilizando se proponen para explicar los resultados numéricos mostrados en la figura 5.19, que indican el papel relevante que juega la vorticidad. Desde luego, no esperamos que esta teoría sirva para describir completamente el desarrollo de la inestabilidad, sino sólo las primeras etapas no lineales. En cualquier caso, la justificación última de las aproximaciones llevadas a cabo viene dada por la comparación con los resultados numéricos obtenidos a partir de la ecuación de Boltzmann, que presentaremos a continuación.

Analicemos las implicaciones de la ecuación (5.60). Para  $k = k_0$  (esto es,  $j = 1$ ), cada uno de los números  $j_1$  o bien  $j - j_1$  que aparecen dentro del sumatorio del último término de la ecuación son iguales o mayores que 2. Con el tamaño del sistema que estamos usando, para  $k \geq 2k_0$  tenemos que  $s_{\perp}(k) < 0$ . En consecuencia, se puede despreciar todo el último término de la ecuación (5.60) para  $k = k_0$ . Esto significa que el modo de Fourier más bajo debe venir bien descrito por la aproximación lineal aún dentro de la región no lineal. Con objeto de comprobar esta predicción hemos analizado las distintas componentes de Fourier de los perfiles hidrodinámicos para el mismo sistema que se presenta

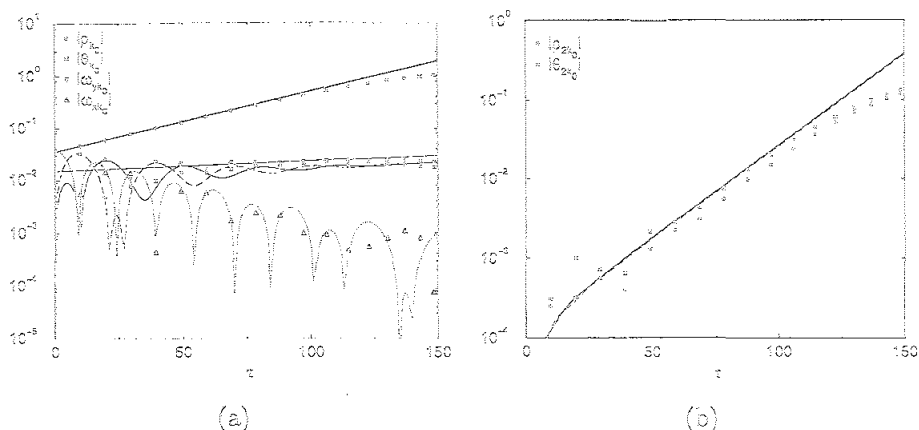


FIGURA 5.20: Evolución temporal de las componentes de Fourier más bajas  $k = k_0$  (a) y los segundos armónicos  $k = 2k_0$  (b) de los campos hidrodinámicos a partir de la perturbación inicial dada por la ecuación (5.59). Los parámetros del sistema son los mismos que en la figura 5.19. Los símbolos son el resultado de la simulación y las líneas las predicciones teóricas a partir de la ecuación (5.60).

en la figura 5.19. En la figura 5.20 (a) se comparan los modos de Fourier de los campos con  $k = k_0$  con la solución de las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas. Esta solución ha sido obtenida resolviendo numéricamente las ecuaciones diferenciales (5.44)–(5.47) con las condiciones iniciales  $\rho_{k_0}(0) = 0$ ,  $\theta_{k_0}(0) = 0$  y  $\omega_{k_0}(0)$  dada por la transformada de Fourier de la ecuación (5.59). Las líneas corresponden a la descripción de la hidrodinámica linealizada y se ajustan muy bien a los puntos, que son el resultado de la simulación de Monte Carlo. El nivel de ruido para la componente longitudinal de la velocidad es muy grande ya que la señal es muy pequeña. Debemos resaltar que el acuerdo de la figura no es trivial ya que el análisis se extiende bien dentro de la región no lineal, llegando incluso a tiempos cercanos a  $\tau = 148.5$ , valor para el cual presentamos los perfiles en la figura 5.19, y que muestran claramente efectos no lineales.

Consideremos ahora las componentes de Fourier de los campos hidrodinámicos con  $k = 2k_0$  ( $j = 2$ ). En este caso, el término correspondiente a  $j_1 = 1$  en el último sumando de la ecuación (5.60) proporciona una contribución que crece en el tiempo. Es más, si nos quedamos con la parte dominante de ésta ecuación tenemos

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \tau} + \zeta^* + 5\kappa^* k_0^2 \right] \theta_{2k_0} + [2\zeta^* + 5\mu^* k_0^2] \rho_{2k_0} + \frac{4}{3} j k_0 \omega_{x2k_0} - \frac{1}{6} \eta^* k_0^2 \omega_0^2 e^{2s \pm \tau} = 0. \quad (5.61)$$

Las ecuaciones para  $\rho_{2k_0}$  y  $\omega_{2k_0}$  son las mismas que con la aproximación lineal.

Las predicciones teóricas que se siguen de estas ecuaciones se comparan con los resultados numéricos del método DSMC en la figura 5.20 (b). No se han representado las componentes de la velocidad, ya que  $\omega_{y2k_0}$  y  $\omega_{z2k_0}$  son muy pequeños con respecto a  $\omega_{yk_0}$  y  $\omega_{zk_0}$ , y la componente longitudinal se mantiene del orden del ruido de la simulación en el intervalo de tiempo considerado. El acuerdo para los campos mostrados es muy bueno, incluso hasta tiempos del orden de  $\tau = 100$ . Comparando los resultados entre las figuras 5.20 (a) y (b), se comprueba que para estos instantes la contribución de la segunda componente de Fourier es mucho más grande que la de la primera componente, tanto para la densidad como para la temperatura. Hemos obtenido resultados similares para otros valores de  $\alpha$  y  $L$ .

Todo lo anterior nos lleva a concluir que el mecanismo responsable para el desarrollo de inhomogeneidades en densidad, y finalmente agregados, es el acoplamiento de las componentes transversales del campo de velocidad. Después de un corto intervalo de tiempo, este efecto determina y domina el crecimiento de las fluctuaciones en densidad.

### 5.4.3 EVOLUCIÓN DE UNA FLUCTUACIÓN ESPONTÁNEA

En este punto uno podría preguntarse si es lícito extender las conclusiones a las que hemos llegado en el apartado anterior, que se han alcanzado estudiando la respuesta del sistema a una perturbación inicial externa específica, al caso del desarrollo de una fluctuación espontánea en un sistema granular que evoluciona libremente. En la figura 5.21 se muestran los resultados obtenidos simulando un sistema que evoluciona libremente a partir de una situación inicialmente homogénea. No se aplicó ninguna perturbación externa en ningún momento. En este caso, los parámetros del sistema son los mismos que antes, es decir,  $\alpha = 0.95$  y  $L = 60 l_0$ . Nuevamente, sólo se permiten gradientes en la dirección de  $x$ , debido a la geometría simulada. Se observa que el sistema desarrolla rápida y espontáneamente inhomogeneidades en los campos. Después de un periodo transitorio, el crecimiento de las componentes de Fourier de los campos es aproximadamente exponencial en la variable temporal escalada  $\tau$ . Mientras que la componente transversal de la velocidad está dominada por la primera componente de Fourier en el intervalo de tiempo considerado, las segundas componentes de Fourier de la densidad y la temperatura crecen mucho más rápido que las primeras, y finalmente, se vuelven las contribuciones dominantes de los campos hidrodinámicos. Esto está de acuerdo con la imagen discutida previamente. Las líneas continuas en la figura 5.21 corresponden al comportamiento exponencial que se obtiene de las ecuaciones propuestas en el límite de tiempos grandes, esto es, para los primeros modos  $|\omega_{yk_0}| \propto \exp(s_{\perp}\tau)$ ,  $|\rho_{k_0}|, |\theta_{k_0}|, |\omega_{xk_0}| \propto \exp(s_{\parallel}\tau)$ ,

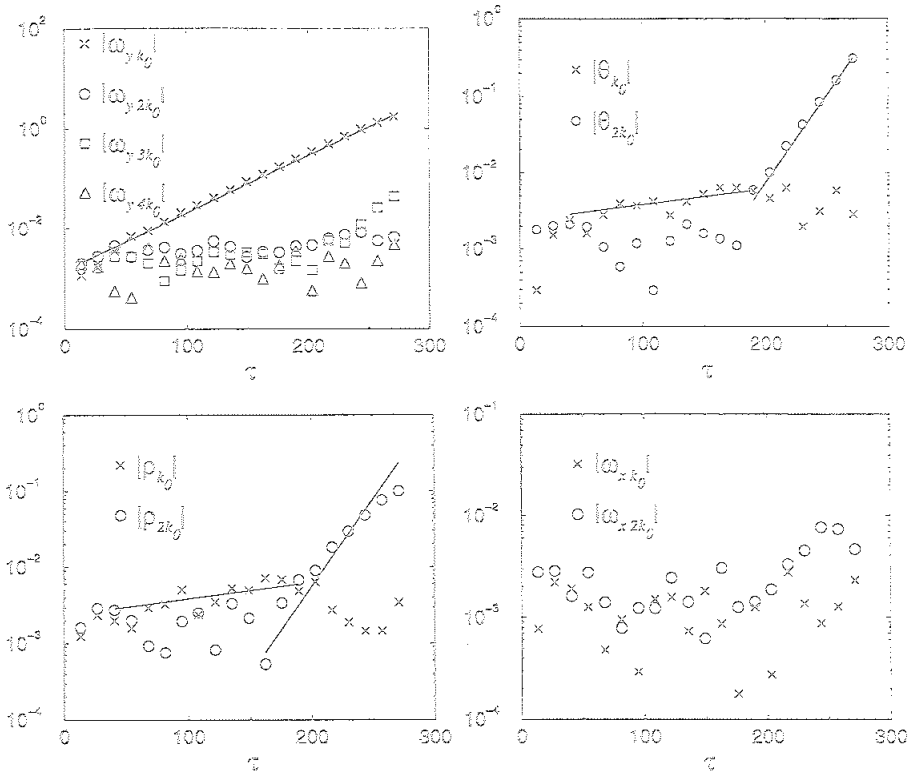


FIGURA 5.21: Evolución temporal de las primeras componentes de Fourier de las fluctuaciones espontáneas de los campos hidrodinámicos en un sistema que evoluciona libremente a partir de una situación inicial homogénea. Los parámetros del sistema son los mismos que en las figuras anteriores. Se ha representado como referencia las pendientes predichas por el modelo sencillo planteado en el texto (líneas continuas).

y para los segundos  $|\rho_{2k_0}|, |\theta_{2k_0}|, |\omega_{x2k_0}| \propto \exp(2s_{\perp}\tau)$ . No sólo debe crecer el segundo modo de la densidad más rápidamente que el primero porque  $s_{\perp}$  es mayor que  $s_{\parallel}$  para todos los valores de  $k$ , como puede verse en la figura 5.18, sino porque además el ritmo de crecimiento está multiplicado por un factor 2 que proviene de su carácter no lineal. Las líneas rectas de la figura se han colocado a modo de referencia, con las pendientes dadas por este comportamiento asintótico para tiempos grandes. Consideramos que el acuerdo es muy bueno, sobretodo teniendo en cuenta el carácter espontáneo de las excitaciones que estamos describiendo. No obstante, tanto en la figura 5.20 (b) como en la figura 5.21 se observa que la segunda componente de Fourier acaba desviándose

del comportamiento exponencial. Esto significa que nuestras ecuaciones no son válidas para describir las últimas etapas del desarrollo de la inestabilidad, como era de esperar pues hemos despreciado todos los otros términos no lineales de las ecuaciones hidrodinámicas, en particular los convectivos. La figura 5.20 (b) sugiere que la inhomogeneidad en densidad parece tender a un valor finito. Trataremos este punto a continuación.

En esta sección hemos presentado evidencias cualitativas y cuantitativas de que, en el caso de un gas inelástico diluido, el principal mecanismo responsable de la formación de inhomogeneidades en densidad en el sistema son los efectos de acoplamiento no lineal que provienen de la componente transversal del flujo, y no la inestabilidad lineal asociada con el acoplamiento (lineal) de las fluctuaciones de la velocidad longitudinal con la densidad. De hecho, ya podemos explicar cualitativamente la correlación entre los vórtices y la densidad que observamos en la figura 5.17, que corresponde a una simulación de discos duros en la que se permiten gradientes en todas las direcciones del espacio. En el centro de los vórtices es donde la vorticidad es más grande. De esta manera, por el mecanismo de calentamiento viscoso que hemos explicado en esta sección, la temperatura allí tiende a ser mayor, y como el sistema trata de mantener la presión uniforme, esta región debe corresponder a una zona de menor densidad.

Todos los resultados que se han presentado hasta ahora se refieren al comienzo del desarrollo de inhomogeneidades en el sistema. De hecho, la inhomogeneidad más grande, como se observa por ejemplo en la figura 5.19, es del orden de un 20% de la densidad media. De esta manera, la siguiente cuestión aparece de forma natural: ¿qué pasa después? Lo que se observa en la simulación es que la densidad se satura alcanzando un perfil estacionario, prácticamente independiente de las condiciones iniciales, esto es, independientemente de que el sistema haya sido perturbado o no inicialmente. Asintóticamente ocurre que todas las magnitudes escaladas  $\rho(\tau)$ ,  $\theta(\tau)$  y  $\omega(\tau)$  alcanzan valores constantes. De esta forma, el estado final no es estrictamente estacionario, pues algunas magnitudes sin escalar siguen variando en el tiempo. En particular, la temperatura continúa disminuyendo como consecuencia de la disipación en las colisiones.

En la figura 5.22 (a) se muestra la evolución temporal del perfil de densidad para el mismo sistema que estamos considerando en toda esta sección. Se observa que éste alcanza una forma estacionaria en que el cociente entre la densidad más grande y la más baja es aproximadamente 2. Resultados similares se obtienen cuando se consideran otros valores del coeficiente de restitución y otros tamaños del sistema. La diferencia principal es cuantitativa. La inhomogeneidad se vuelve más grande a medida que  $\alpha$  es más pequeño o  $L$  más grande, pero la densidad acaba saturándose en todos los casos. Como la ecua-

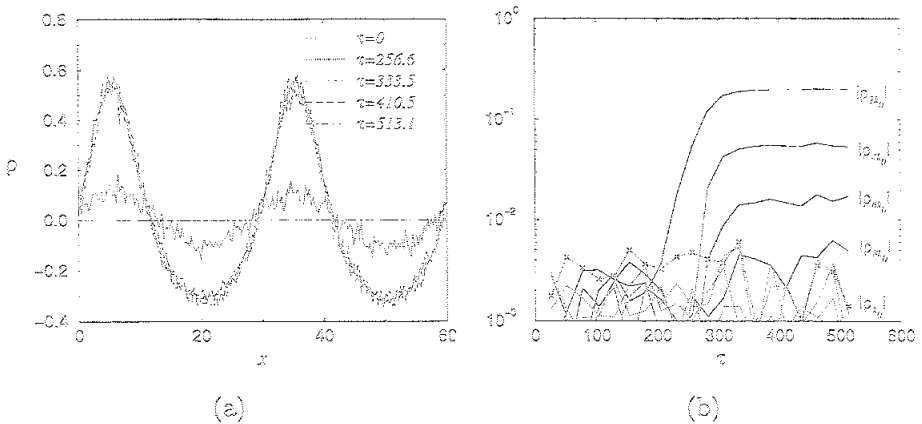


FIGURA 5.22: Evolución temporal de la densidad para el mismo sistema que en la figura 5.19. La condición inicial es homogénea. Se obtiene el mismo estado pseudo-estacionario cuando se utilizan distintas condiciones iniciales. (a) Evolución del perfil de densidad en la dirección  $x$ , medida en unidades del recorrido libre medio. (b) Evolución de las componentes de Fourier de la densidad. Las líneas de puntos corresponden a los modos impares, de los cuales sólo el primero  $|\rho_{k_0}|$  ha sido etiquetado.

ción de Boltzmann no contiene efectos de volumen excluido, esta saturación no puede ser geométrica, es decir, debido al tamaño finito de las partículas. Es más, debido al carácter suave del perfil de densidad y a la relativamente baja inhomogeneidad del sistema, es probable que éste sea un efecto puramente hidrodinámico.

También hemos analizado el carácter lineal o no lineal del perfil estacionario. En la figura 5.22 (b) se presenta la evolución temporal de las primeras componentes de Fourier del perfil de densidad. La figura corresponde, al igual que (a), al caso de evolución libre a partir de una situación homogénea, de manera que el perfil estacionario se alcanza espontáneamente. Evidentemente, en la figura 5.22 (a) la posición de los máximos y los mínimos es diferente en cada trayectoria, aunque el perfil final de densidad, salvo traslación, es independiente de las condiciones iniciales. La amplitud de las componentes de Fourier siempre alcanza el mismo valor mostrado figura 5.22 (b). Todos los modos impares se mantienen muy pequeños (del orden del ruido de la simulación), mientras que los pares alcanzan un valor de saturación aproximadamente equidistante en la escala logarítmica. En particular, el primer modo de la densidad no aumenta en el tiempo, contrariamente a la predicción lineal. Es más, cuando se excita externamente siempre acaba decayendo al nivel del ruido, indicando que es asintóticamente estable. Se obtienen conclusiones similares cuando se analizan sistemas en los cuales se permiten gradientes en varias direcciones, aunque la

situación se vuelve más complicada, ya que hay que considerar vectores de onda con varias componentes.

Como la densidad máxima que se alcanza es del mismo orden de magnitud que su valor promediado, parece plausible admitir que la evolución temporal del sistema se puede describir con precisión utilizando la ecuación de Boltzmann. Esta situación puede ser distinta en sistemas muy grandes con un coeficiente de restitución muy bajo. Evidentemente, si el sistema desarrolla regiones de densidad muy grandes, próximas al valor de máximo empaquetamiento, la ecuación de Boltzmann no es válida. En cualquier caso, parece claro que la ecuación de Boltzmann inelástica no nos lleva a ninguna singularidad en el espacio real, aunque el fenómeno de la formación de agregados estudiado mediante simulaciones de Monte Carlo posee esencialmente los mismos rasgos característicos que se han observado con Dinámica Molecular en gases no muy densos, al menos en las primeras etapas. Es importante resaltar que el fenómeno de la formación de agregados de partículas también ha sido observado en experimentos de materiales granulares [38].

## CAPÍTULO 6

# AUTODIFUSIÓN EN EL ESTADO DE ENFRIAMIENTO HOMOGÉNEO

### 6.1 INTRODUCCIÓN

En el capítulo 3 presentamos una descripción de los gases granulares diluidos al nivel de teoría cinética partiendo de primeros principios. Seguidamente, en el capítulo 5 utilizamos el método de Chapman-Enskog para pasar a una descripción hidrodinámica, en términos de un número reducido de variables, los campos hidrodinámicos. De esta manera obtuvimos unas ecuaciones hidrodinámicas análogas a las ecuaciones de Navier-Stokes de los fluidos moleculares, además de expresiones explícitas de los coeficientes de transporte que aparecen en ellas. Estas ecuaciones son válidas para gases diluidos en estados próximos al HCS, y en este sentido se comprobó su validez en el régimen lineal utilizando el método de simulación directa de Monte Carlo, que permite resolver numéricamente la ecuación de Boltzmann. No obstante, la validez de este trabajo descansa en la propia ecuación de Boltzmann, y más concretamente en la hipótesis de caos molecular.

El proceso de transporte más simple que se puede pensar es la autodifusión, esto es, la difusión de partículas marcadas en un sistema de partículas mecánicamente equivalentes. En sistemas moleculares, la autodifusión en el equilibrio ha servido con frecuencia como prototipo de fenómenos de transporte más complicados, tanto desde un punto de vista computacional como conceptual. En 1967 Alder y Wainright [97-99] encontraron, mediante simulaciones por ordenador de gases elásticos de esferas y discos duros, que la función de autocorrelación de velocidades no decaía exponencialmente en el tiempo, tal como predice la hipótesis de caos molecular, sino algebraicamente, concretamente como  $\sim t^{-d/2}$ . En consecuencia, el coeficiente de autodifusión en dimensión dos



debe divergir logarítmicamente ( $\sim \ln t$ ) para tiempos grandes. Posteriormente se mostró que todos los coeficientes de transporte de Navier-Stokes exhiben una divergencia logarítmica en 2D [100–103]. Este fenómeno también es responsable de la no existencia de los coeficientes de Burnett en 3D, que divergen para  $t \rightarrow \infty$  como  $\sqrt{t}$  [104, 105]. Sin embargo, en la práctica se puede ignorar la divergencia de los coeficientes de transporte en las simulaciones de sistemas bidimensionales, ya que las contribuciones divergentes sólo se vuelven significativas después de intervalos temporales extremadamente grandes, que no pueden ser alcanzados con los ordenadores de hoy en día [106, 107].

En este capítulo calcularemos el coeficiente de autodifusión para un gas granular diluido en el HCS [108], admitiendo la hipótesis de caos molecular y comparándolo con los resultados de Dinámica Molecular en 2D, que reproduce íntegramente la dinámica de un gas de discos duros inelásticos. La autodifusión también ha sido estudiada previamente bajo otros flujos granulares. Se han llevado a cabo experimentos con flujos macroscópicos [109] y con sistemas verticalmente vibrados [110], así como simulaciones de Dinámica Molecular en flujos tangenciales [111].

El punto de partida de nuestro estudio será la ecuación de Boltzmann-Lorentz [53] para un medio inelástico diluido. Se particularizará para un gas en el HCS y se resolverá mediante el procedimiento de Chapman-Enskog en la sección 6.2. Algunos detalles de los cálculos se dan en el apéndice D. Como el HCS es inestable ante fluctuaciones espaciales (véase la sección 5.4 del capítulo anterior), todo el análisis está restringido a pequeños intervalos de tiempo, antes de que se desarrollen agregados de partículas.

El procedimiento de Chapman-Enskog se basa en la existencia de unas escalas espaciales y temporales sobre las cuales es posible encontrar una solución normal de la ecuación de Boltzmann o de Boltzmann-Lorentz. Ello está íntimamente relacionado con la validez de la descripción hidrodinámica del sistema. Con objeto de verificar ésto en el contexto de la autodifusión, en la sección 6.3 presentamos las soluciones numéricas de la ecuación de Boltzmann-Lorentz, obtenidas mediante el método de simulación directa de Monte Carlo (capítulo 4). En la sección 6.4 verificaremos la precisión de la propia ecuación cinética mediante simulaciones de Dinámica Molecular.

En los fluidos moleculares en equilibrio, la desviación cuadrática media de las partículas marcadas para  $t \rightarrow \infty$  es proporcional al tiempo [53, 112],  $\langle(\Delta r)^2\rangle \sim t$ . Además, si se acepta la hipótesis de caos molecular, la función de autocorrelación de velocidades decae exponencialmente en el tiempo. En los fluidos granulares veremos que como consecuencia de la ley de Haff esto sigue siendo cierto, pero en una variable temporal  $\tau$  distinta. Esta escala se puede definir como el número medio de colisiones que ha experimentado una

partícula hasta el instante  $t$ . De esta manera, veremos que las partículas se difunden mucho más lentamente que en un fluido molecular; en particular, de forma  $\langle(\Delta r)^2\rangle \sim \ln t$ . En la sección 6.5 mostraremos que la función de autocorrelación de velocidades decae exponencialmente en la variable  $\tau$ , a la vez que recalcularemos el coeficiente de autodifusión mediante una fórmula de Green-Kubo, generalizada para un estado de referencia que depende del tiempo. Esto nos permitirá analizar con detalle la escala de tiempos en la que es válida la ecuación de difusión que se obtiene en la sección 6.2.

## 6.2 SOLUCIÓN DE CHAPMAN-ENSKOG

Consideremos una gas diluido de esferas duras ( $d = 3$ ) o discos duros ( $d = 2$ ) de masa  $m$ , diámetro  $\sigma$  y un coeficiente de restitución normal  $\alpha$ . Algunas de las partículas están marcadas, aunque todas son mecánicamente idénticas. Denotemos por  $f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  la función de distribución monoparticular de las partículas marcadas y por  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  la de todas las demás.

La evolución temporal de  $f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  viene dada por la extensión al caso de colisiones inelásticas de la ecuación de Boltzmann-Lorentz [53, 112],

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\right) f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \Lambda(t) f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (6.1)$$

donde  $\Lambda(t)$  es el operador de colisión de Boltzmann-Lorentz inelástico, que se define a partir del operador de colisión de Boltzmann (3.30) como

$$\begin{aligned} \Lambda(t) f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) &\equiv J_B[\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t | f_s, f] \\ &= \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_2 \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \\ &\quad \times \left[ \frac{1}{\alpha^2} f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1^{**}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2^{**}, t) - f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t) \right], \end{aligned} \quad (6.2)$$

siendo  $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$  y  $\mathbf{v}_1^{**}$  y  $\mathbf{v}_2^{**}$  las velocidades precolisionales, que vienen dadas por las ecuaciones (3.31)–(3.32). La densidad de partículas marcadas es mucho menor que la del resto del gas, de manera que la función de distribución de las partículas del baño  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  obedece una ecuación de evolución independiente de las partículas marcadas, concretamente la ecuación de Boltzmann inelástica (3.29). Por consiguiente, el operador de Boltzmann-Lorentz  $\Lambda(t)$  y la propia ecuación (6.1) son lineales en lo que a  $f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  se refiere.

Las partículas marcadas pueden intercambiar energía y cantidad de movimiento con el resto del fluido y, por tanto, éstas no son magnitudes invariantes

del operador de colisiones  $J_B[f_s, f]$ . Sólo se conserva el número de partículas marcadas. Más concretamente, la densidad

$$n_s(x, t) = \int dv f_s(x, v, t), \quad (6.3)$$

obedece la ley de conservación

$$\frac{\partial n_s(x, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot J_s(x, t), \quad (6.4)$$

con el flujo de partículas marcadas  $J_s$ , definido por

$$J_s(x, t) = \int dv v f_s(x, v, t). \quad (6.5)$$

Esta ley de conservación se vuelve una ecuación hidrodinámica cerrada para la densidad de las partículas marcadas si se expresa  $J_s$  como una funcional de ella y de los campos macroscópicos que definen el estado completo del gas. El objetivo aquí es obtener el orden más bajo de  $J_s$  en el gradiente de densidad —que en fluidos normales se conoce como la ley de Fick— aplicando el método de Chapman-Enskog para resolver la ecuación de Boltzmann-Lorentz. Se presupone que, independientemente de las condiciones iniciales y en el límite de tiempos grandes, la solución de la ecuación cinética se vuelve normal, es decir, toda dependencia temporal y espacial puede expresarse a través de los campos hidrodinámicos:

$$f_s(x, v, t) = f_s[v|n_s(x, t), \{B_i(x, t)\}], \quad (6.6)$$

donde el conjunto  $\{B_i(x, t)\}$  denota el conjunto de los campos hidrodinámicos asociados a  $f(x, v, t)$ , la cual también se presupone normal. Aunque el formalismo se puede aplicar, en principio, a cualquier estado del gas, nos vamos a restringir al estado de enfriamiento homogéneo, que ya hemos estudiado extensivamente en el capítulo anterior. Toda la dependencia temporal de este estado viene dado por la temperatura del gas  $T_H(t)$ , que a su vez obedece la ley de Haff (5.5). Aunque no conocemos exactamente la función de distribución solución de la ecuación de Boltzmann para este estado homogéneo, en el apartado 5.2.1 encontramos una buena aproximación de esta solución para el rango de velocidades térmicas utilizando los polinomios de Sonine. Esta debe ser más que suficiente para la descripción hidrodinámica que llevaremos a cabo en este capítulo. Denotemos entonces por  $f_H(v, t)$  la función de distribución que obtuvimos en el apartado 5.2.1 reteniendo los primeros polinomios de Sonine,

$$f_H(v, t) = f_M(v, t) \left\{ 1 + \frac{a_2(\alpha)}{2} \left[ \frac{(2+d)d}{4} - \frac{(2+d)m}{2k_B T_H(t)} v^2 + \left( \frac{m}{2k_B T_H(t)} \right)^2 v^4 \right] \right\}, \quad (6.7)$$

donde  $a_2(\alpha)$  viene dado por la ecuación (5.16) y  $f_M$  es la función de distribución de Maxwell-Boltzmann,

$$f_M(\mathbf{v}, t) = n \left( \frac{m}{2\pi k_B T_H(t)} \right)^{d/2} \exp \left( -\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T_H(t)} \right). \quad (6.8)$$

En esta aproximación podemos escribir la ley de variación de la temperatura del sistema como

$$\frac{\partial T_H}{\partial t} = -\zeta_H T_H, \quad (6.9)$$

donde  $\zeta_H$  viene dado por las ecuaciones (5.38) y (5.35), y escribiéndola explícitamente en la notación de este capítulo,

$$\zeta_H = (1 - \alpha^2) \frac{2\pi^{(d-1)/2}}{d\Gamma(d/2)} n \sigma^{d-1} \left( \frac{k_B T_H}{m} \right)^{1/2} \left( 1 + \frac{3a_2(\alpha)}{16} \right). \quad (6.10)$$

Apliquemos ahora el método de Chapman-Enskog a la ecuación (6.2). La función de distribución se desarrolla en serie en un parámetro de «uniformidad» formal (que hacemos uno al final de los cálculos),

$$f_s = f_s^{(0)} + \varepsilon f_s^{(1)} + \varepsilon^2 f_s^{(2)} + \dots \quad (6.11)$$

Como lo que queremos hacer es un desarrollo en los gradientes espaciales, asignaremos un factor  $\varepsilon$  a cada operador gradiente. No obstante, en el método de Chapman-Enskog no se desarrollan los campos, sino que vienen dados exactamente por el orden cero del desarrollo, esto es,

$$n_s(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f_s^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (6.12)$$

y, por tanto,

$$\int d\mathbf{v} f_s^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0 \quad \text{para todo } j > 0. \quad (6.13)$$

Lo que se hace es desarrollar las derivadas de los campos. Como se explica en el apéndice C, esto se puede llevar a cabo utilizando el método de escalas múltiples, es decir, introduciendo varias escalas temporales

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \dots \quad (6.14)$$

Cuando se tiene en cuenta este desarrollo en la ecuación de balance de la densidad, se obtiene que  $\delta n_s / \partial t_0 = 0$  y

$$\frac{\delta n_s}{\partial t_j} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_s^{(j-1)}, \quad (6.15)$$

donde el vector flujo en cada orden es

$$J_s^{(j)}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f_s^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (6.16)$$

De esta manera, en el orden cero en  $\varepsilon$  se obtiene a partir de la ecuación cinética (6.1)

$$\frac{\partial}{\partial t_0} f_s^{(0)} = \Lambda f_s^{(0)} = J_B[f_s^{(0)}, f_H]. \quad (6.17)$$

Ya conocemos una solución normal de esta ecuación, precisamente la función de distribución  $f_H$ , asociada al estado de referencia HCS. Podemos utilizarla de manera que se cumpla la normalización (6.12) del orden cero:

$$f_s^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t_0, t_1, \dots) = \frac{n_s(\mathbf{r}, t_1, \dots)}{n} f_H(\mathbf{v}, t_0). \quad (6.18)$$

Obsérvese que en esta expresión los campos hidrodinámicos del baño sólo dependen de  $t_0$ , ya que se considera homogéneo en todo instante y, por tanto, no hay que asociarle ningún gradiente. Como  $f_H(\mathbf{v})$  es una función isótropa, en el orden cero no hay contribución al flujo de partículas marcadas, esto es,  $J_s^{(0)} = 0$ .

En el primer orden en  $\varepsilon$ , la ecuación cinética nos lleva a

$$\left( \frac{\partial}{\partial t_0} - \Lambda \right) f_s^{(1)} = - \left( \frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) f_s^{(0)}. \quad (6.19)$$

Utilizando la ecuación (6.15) y los resultados en el orden cero se llega a que  $\partial n_s / \partial t_1 = 0$ . Esto implica que  $f_s^{(0)}$  no depende de  $t_1$ , lo que nos permite reescribir la ecuación (6.19) como

$$\left( \frac{\partial}{\partial t_0} - \Lambda \right) f_s^{(1)} = - \frac{1}{n} (\mathbf{v} \cdot \nabla n_s) f_H. \quad (6.20)$$

Buscamos soluciones normales de esta ecuación, que deben ser proporcionales al gradiente de densidad, que es arbitrario. Escribamos la solución como

$$f_s^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \mathbf{B}(\mathbf{v}) \cdot \nabla n_s(\mathbf{r}), \quad (6.21)$$

donde el vector  $\mathbf{B}(\mathbf{v})$  también dependerá del tiempo a través de  $T_H(t_0)$ , aunque por simplicidad no hemos escrito las dependencias temporales. De la variable temporal  $t_0$  podemos pasar a la temperatura del baño a partir de la ecuación (6.9), de forma que podemos sustituir  $\partial / \partial t_0$  por  $-\zeta_H T_H \partial / \partial T_H$ . Entonces, buscando una solución de (6.20) de la forma (6.21) se obtiene la siguiente ecuación para  $\mathbf{B}(\mathbf{v})$

$$\left( \zeta_H T_H \frac{\partial}{\partial T_H} + \Lambda \right) \mathbf{B} = \frac{1}{n} \mathbf{v} f_H. \quad (6.22)$$

La contribución al flujo de partículas en el primer orden en los gradientes es

$$\mathbf{J}_s^{(1)} = -D \nabla n_s, \quad (6.23)$$

donde

$$D = -\frac{1}{d} \int d\mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{v}). \quad (6.24)$$

Para llegar a esta última expresión hemos hecho uso de consideraciones de simetría. Integrando la ecuación (6.22) se encuentra fácilmente una ecuación para el coeficiente de autodifusión  $D$

$$\left( \zeta_H T_H \frac{\partial}{\partial T_H} - \nu_D \right) D = -\frac{k_B T_H}{m}, \quad (6.25)$$

donde  $\nu_D$  es una funcional de  $\mathbf{B}(\mathbf{v})$ ,

$$\nu_D = -\frac{\int d\mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \Lambda \mathbf{B}(\mathbf{v})}{\int d\mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{v})}. \quad (6.26)$$

Como  $\zeta_H \propto T_H^{1/2}$ , análisis dimensional requiere que  $D \propto T_H^{1/2}$  y, por tanto,  $\partial D / \partial T_H = D / (2T_H)$ , de forma que

$$D = \frac{k_B T_H}{m} \left( \nu_D - \frac{\zeta_H}{2} \right)^{-1}. \quad (6.27)$$

Con objeto de obtener una expresión explícita de  $D$  hemos utilizado la primera aproximación de Sonine, en la cual sólo se retiene el término dominante en el desarrollo de  $\mathbf{B}(\mathbf{v})$  en polinomios de Sonine. Como el operador lineal de colisiones  $\Lambda$  es invariante ante rotaciones (en el espacio de velocidades), el vector  $\mathbf{B}$  debe tener la forma  $\mathbf{B}(\mathbf{v}) = \mathbf{v} B(v)$ , donde  $B(v)$  es una función isótropa. En el orden más bajo de Sonine  $B(v)$  es proporcional a la gaussiana  $f_M$  definida en la ecuación (6.8). Los detalles del análisis se dan en el apéndice D, donde también se calcula la forma explícita de  $f_s^{(1)}$ . Los resultados son

$$D^*(\alpha) = \frac{D(\alpha)}{D_0} = \frac{4}{(1 + \alpha)^2 - \frac{a_2(\alpha)}{16} (4 + \alpha - 3\alpha^2)}, \quad (6.28)$$

donde  $D_0$  es el límite elástico ( $\alpha = 1$ ) del coeficiente de difusión en el equilibrio, pero con una temperatura  $T_H$  que depende del tiempo,

$$D_0 = \frac{d\Gamma(d/2)}{4\pi^{(d-1)/2}} \frac{1}{n\sigma^{d-1}} \left( \frac{k_B T_H}{m} \right)^{1/2}. \quad (6.29)$$

El último paso del método de Chapman-Enskog consiste en recuperar la variable temporal ordinaria. Para hacer esto nos basta con identificar  $\partial / \partial t_0 +$

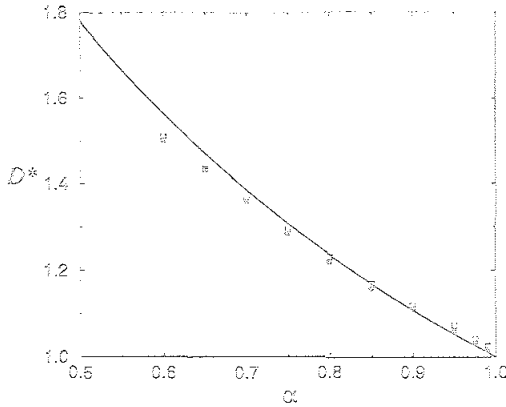


FIGURA 6.1: El coeficiente de autodifusión adimensional  $D^*$  en función del coeficiente de restitución  $\alpha$  para  $d = 3$ . La línea continua es la predicción teórica dada por la ecuación (6.28), mientras que los símbolos son el resultado de la simulación DSMC de la ecuación de Boltzmann-Lorentz, a partir del desplazamiento cuadrático medio de las partículas (círculos) y la evolución temporal de una perturbación sinusoidal en la densidad de las partículas marcadas (cuadrados).

$\varepsilon \partial / \partial t_1$  con  $\partial / \partial t$  y tomar el parámetro formal  $\varepsilon$  como la unidad. Entonces obtenemos la ecuación de autodifusión para un gas granular diluido en el HCS,

$$\frac{\partial n_s(x, t)}{\partial t} = D(t) \nabla^2 n_s(x, t). \quad (6.30)$$

Al igual que los coeficientes de transporte de Navier-Stokes que obtuvimos en la sección 5.3, el coeficiente  $D$  exhibe una doble dependencia del coeficiente de restitución. En primer lugar hay una dependencia explícita dada por el factor  $D^*(\alpha)$  en la ecuación (6.28). Además, el coeficiente de autodifusión posee una dependencia intrínseca a través de la evolución temporal de la temperatura  $T_H(t)$ , que viene también gobernada por  $\alpha$ .

Hisau y Hunt [113] y Savage y Dai [114] también encontraron, independientemente, una expresión para el coeficiente de autodifusión. En nuestra notación podemos escribir el coeficiente que ellos calcularon como

$$D^*(\alpha) = \frac{2}{1 + \alpha}, \quad (6.31)$$

que no coincide con el obtenido aquí excepto en el caso límite de  $\alpha = 1$ .

En la figura 6.1 se presenta el coeficiente de difusión adimensional  $D^*$  en función del coeficiente de restitución en el intervalo  $0.5 \leq \alpha \leq 1$  para  $d = 3$ . Se puede observar que la desviación respecto del caso elástico es bastante considerable. Por otro lado, si se aproxima la función de distribución del baño  $f_H$

por una gaussiana, esto es, si formalmente se toma  $a_2(\alpha) = 0$  en la ecuación (6.28), la curva que resulta se superpone completamente con la representada en la figura 6.1 en la escala utilizada. De esta manera, se puede despreciar con tranquilidad la contribución que proviene de  $a_2(\alpha)$  en el coeficiente de autodifusión.

### 6.3 SIMULACIÓN DIRECTA DE MONTE CARLO

En el capítulo anterior utilizamos el método DSMC para obtener soluciones numéricas de la ecuación de Boltzmann. En esta sección se usará para resolver la ecuación de Boltzmann-Lorentz, en el que la función de distribución del baño viene dada por  $f_H(v, t)$ . Aquí no estamos interesados en si un sistema granular dado se mantiene o no en el estado de enfriamiento homogéneo, se presupone que éste es el caso. Desde luego, esto evita, por construcción, la posibilidad de que el sistema desarrolle las inestabilidades en densidad y velocidad que vimos en la sección 5.4.

En primer lugar notemos que la ecuación de difusión (6.30) también puede escribirse como una ecuación para la densidad probabilidad  $P(\mathbf{r}, t)$  de encontrar una sola partícula marcada en la posición  $\mathbf{r}$  sin más que sustituir  $n_s$  por  $P$ , ya que ambas densidades están relacionadas por una constante de proporcionalidad, concretamente el número total de partículas marcadas,

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D(t) \nabla^2 P(\mathbf{r}, t). \quad (6.32)$$

Se puede eliminar la dependencia temporal del coeficiente de difusión en esta ecuación a través de un cambio de variables. Introduzcamos la frecuencia de colisión de Boltzmann  $\nu_0(t)$ , que corresponde a un gas diluido con una función de distribución maxwelliana a la temperatura  $T_H(t)$ ,

$$\nu_0(t) = \frac{2\pi^{(d-1)/2}}{\Gamma(d/2)} n \sigma^{d-1} \left( \frac{k_B T_H(t)}{m} \right)^{1/2}. \quad (6.33)$$

Definamos las variables espaciales y temporales adimensionales como

$$\mathbf{l} = \frac{\nu_0(t)}{2} \left( \frac{m}{k_B T_H(t)} \right)^{1/2} \mathbf{r}, \quad \tau = \frac{1}{2} \int_0^t dt' \nu_0(t'). \quad (6.34)$$

La escala de tiempo  $\tau$  proporciona una estimación del número medio de colisiones por partícula que se han producido en el intervalo de tiempo entre 0 y  $t$ , mientras que la unidad de longitud introducida (que es independiente del tiempo) es proporcional al recorrido libre medio de las partículas. En términos



de estas variables la ecuación de autodifusión queda

$$\frac{\partial \tilde{P}(\mathbf{l}, \tau)}{\partial \tau} = \frac{d}{4} D^*(\alpha) \nabla_{\mathbf{l}}^2 \tilde{P}(\mathbf{l}, \tau), \quad (6.35)$$

donde  $\nabla_{\mathbf{l}}^2$  y  $\tilde{P} = P[(2/\nu_0)(k_B T_H/m)^{1/2}]^d$  son el laplaciano y la densidad de probabilidad en el espacio adimensional  $\mathbf{l}$ , respectivamente. La expresión (6.35) es una ecuación de difusión con un coeficiente constante de difusión  $D^*(\alpha)d/4$ . Supongamos que la partícula marcada se suelta en el sistema en el instante  $\tau = 0$  ( $t = 0$ ) en la posición  $\mathbf{l} = \mathbf{l}_0$  ( $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$ ). La probabilidad de encontrar a la partícula en la posición  $\mathbf{l}$  un tiempo  $\tau$  posterior vendrá dada por la solución de la ecuación (6.35) con la condición inicial  $\tilde{P}(\mathbf{l}, 0) = \delta(\mathbf{l} - \mathbf{l}_0)$ , esto es,

$$\tilde{P}(\mathbf{l}, \tau) = \frac{1}{(\pi d D^* \tau)^{d/2}} \exp \left[ -\frac{(\mathbf{l} - \mathbf{l}_0)^2}{d D^* \tau} \right]. \quad (6.36)$$

La desviación cuadrática media de la posición  $\mathbf{l}$  a partir de su valor inicial  $\mathbf{l}_0$  después de un intervalo de tiempo  $\tau$  es

$$\langle (\Delta \mathbf{l})^2 \rangle_\tau = \int d\mathbf{l} (\mathbf{l} - \mathbf{l}_0)^2 \tilde{P}(\mathbf{l}, \tau) = \frac{d^2}{2} D^*(\alpha) \tau. \quad (6.37)$$

Este resultado extiende al caso de colisiones disipativas la relación bien conocida que existe entre el desplazamiento cuadrático medio de las partículas con el coeficiente de autodifusión en sistemas elásticos. La ecuación (6.37) es equivalente a

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle (\Delta \mathbf{r})^2 \rangle_t = 2dD(\alpha, t), \quad (6.38)$$

y también a

$$\langle (\Delta \mathbf{r})^2 \rangle_\tau = \frac{d^2 \Gamma(d/2)^2}{2\pi^{d-1} \Gamma^2 \sigma^{2(d-1)}} D^*(\alpha) \tau. \quad (6.39)$$

El primer método que hemos utilizado para medir el coeficiente de difusión numéricamente se basa directamente en la ecuación (6.37). En las simulaciones se consideraron  $N = 2.5 \times 10^5$  esferas duras marcadas. Estas partículas no interaccionan las unas con las otras, de forma que, equivalentemente, generamos  $N = 2.5 \times 10^5$  trayectorias independientes de una sola partícula marcada. Sólo se guardaban las posiciones y velocidades de las partículas marcadas, ya que no generamos la distribución del sistema completo, sino que era introducida externamente. Cada vez que una partícula marcada sufría una colisión, se generaba la velocidad de la partícula conque iba a colisionar a partir de la función de distribución  $f_H(\mathbf{v}, t)$  (6.7), esto es, la correspondiente al HCS en

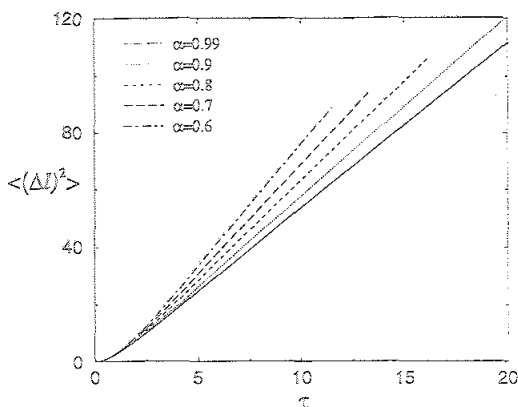


FIGURA 6.2: Cálculo numérico del coeficiente de autodifusión de un gas de esferas duras con el método DSMC. Desplazamiento cuadrático medio de las partículas marcadas en función del tiempo para varios valores de  $\alpha$ . Todas las demás se miden en las unidades reducidas definidas en el texto.

la primera aproximación de Sonine. En consecuencia, no había necesidad de dividir al sistema en celdas, ya que el baño que ven las partículas no depende de su posición. Por el mismo motivo no es necesario especificar el tamaño del sistema ni ninguna clase de condiciones de contorno. En otras palabras: el sistema se consideraba infinito y homogéneo en todas las direcciones. El intervalo de tiempo sobre el cual se supone que no hay correlaciones entre el movimiento libre de las partículas y las colisiones es de  $\Delta t_m = 5 \times 10^{-2} l_0 [2k_B T(0)/m]^{1/2}$  (véase el capítulo 4), donde  $l_0 = (\sqrt{2}\pi n\sigma^2)^{-1}$  es el recorrido libre medio y  $T(0)$  es la temperatura inicial del sistema. Este intervalo de tiempo debe ser elegido de forma que se mantenga pequeño en comparación con el tiempo medio entre colisiones. Como la temperatura de nuestro sistema disminuye en el tiempo, se garantiza así que esta condición se verifica en todo instante.

En la figura 6.2 se representa  $\langle(\Delta l)^2\rangle$  en función del número medio de colisiones que cada partícula ha experimentado, medido por la escala temporal  $\tau$  definida en la ecuación (6.34). Se han considerado varios valores del coeficiente de restitución en el intervalo  $0.6 \leq \alpha \leq 0.99$ . En la figura se observa que tras un periodo de tiempo transitorio, en el cual cada partícula marcada ha colisionado alrededor de 5 veces, el desplazamiento cuadrático medio escalado se vuelve una función lineal de  $\tau$ , tal y como predice la ecuación (6.37). Obtuvimos  $D^*$  midiendo las pendientes de las distintas curvas en la región lineal. En la figura 6.1 se presenta la comparación de estos valores con los obtenidos con el método de Chapman-Enskog en la sección anterior, ecuación (6.28). El

acuerdo es muy bueno en todo el rango de valores de  $\alpha$  considerado, aunque la discrepancia aumenta a medida que el valor de  $\alpha$  disminuye. Nótese que el coeficiente de autodifusión escalado  $D^*(\alpha)$  varía hasta una cantidad del orden del 50% de su valor en el caso elástico.

Podemos medir también el coeficiente de difusión numéricamente a partir de la propia ecuación de autodifusión (6.30), de manera análoga a como medimos los otros coeficientes de transporte de Navier-Stokes en el capítulo anterior. Introduciendo la transformada de Fourier de la densidad de las partículas marcadas  $n_{s,k}$ , podemos escribir la ecuación de difusión escalada (6.35) como

$$n_{s,k}(\tau) = n_{s,k}(0) \exp(-s_D \tau), \quad (6.40)$$

donde

$$s_D = \frac{d}{4} D^* k^2. \quad (6.41)$$

De esta forma, podemos calcular el coeficiente  $D^*(\alpha)$  a partir de la evolución temporal de la amplitud de una perturbación sinusoidal de la densidad de partículas marcadas, de manera totalmente análoga al cálculo de la viscosidad a partir del perfil de la velocidad transversal que llevamos a cabo en el apartado 5.3.3. Para este caso, dividimos al sistema en 100 capas del mismo tamaño perpendiculares al eje  $x$ , que es precisamente la dirección de la perturbación introducida. El tamaño del sistema que consideramos en esta dirección es de  $L = 50l_0$ , aplicando condiciones periódicas de contorno. Los resultados se muestran también en la figura 6.1 (cuadrados) y, por supuesto, coinciden con los calculados por el procedimiento anterior.

## 6.4 RESULTADOS DE DINÁMICA MOLECULAR

Los resultados presentados en las secciones anteriores descansan en la validez de la ecuación de Boltzmann para describir un gas granular de baja densidad. También lo hacen en la posibilidad de observar al sistema en el HOS durante un periodo de tiempo suficientemente grande para alcanzar el régimen de autodifusión. Se admitió implícitamente la existencia de una ventana de tiempo en la es válida la ecuación de difusión. Esto no es en absoluto evidente debido a la inestabilidades que ya discutimos en la sección 5.4. Por estas razones, a continuación presentaremos algunos resultados obtenidos con simulaciones de Dinámica Molecular.

Cuando se utiliza Dinámica Molecular la densidad del sistema no es asintóticamente pequeña, como requiere la ecuación de Boltzmann, y en general son de esperar efectos de densidad finita. Como ya vimos en la sección 3.4,

la ecuación de Enskog nos proporciona una generalización de la ecuación de Boltzmann para densidades más altas [52,53]. Cuando se aplica al problema de la autodifusión en el HCS, la ecuación de Enskog toma la forma

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\right) f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \chi_e(n) J_B[\mathbf{r}, \mathbf{v}, t | f_s, f_H], \quad (6.42)$$

donde el operador de colisiones  $J_B$  sigue estando definido por la ecuación (6.2) y  $\chi_e(n)$  es la función de correlación de pares en el equilibrio para un sistema de densidad  $n$  y a una distancia  $\sigma$ . De esta manera, el coeficiente de autodifusión debe venir dado también por la ecuación (6.28), aunque ahora aparecerá una corrección debida a  $\chi_e(n)$  en el coeficiente  $D_0$ ,

$$D_0^E = \frac{d\Gamma(d/2)}{4\pi^{(d-1)/2}} \frac{1}{n\sigma^{d-1}\chi_e(n)} \left(\frac{k_B T_H}{m}\right)^{1/2}. \quad (6.43)$$

Obviamente, cuando se escalan adecuadamente, las soluciones de la ecuación de Boltzmann-Lorentz y la ecuación (6.42) coinciden. Por consiguiente, todos los resultados de las secciones anteriores pueden ser directamente trasladadas a la ecuación de Enskog. Esto es debido a la homogeneidad del estado que estamos considerando.

Hemos simulado un sistema de discos duros en un dominio cuadrado con condiciones periódicas de contorno en ambas direcciones. Durante un primer periodo de tiempo se dejaba evolucionar al sistema con colisiones elásticas ( $\alpha = 1$ ), a partir de una distribución de partículas uniforme y una distribución de velocidades isotropa. De esta manera, el sistema alcanzaba la función de distribución de equilibrio de Maxwell-Boltzmann. Este estado se toma como la condición inicial de nuestro medio granular. Simulamos típicamente un sistema constituido por  $N = 6400$  partículas, promediando sobre 30 trayectorias. La técnica de simulación utilizada está basada en el algoritmo *event driven* [64], que básicamente consiste en calcular el instante de tiempo en que se va a producir la primera colisión y avanzar todas las partículas de acuerdo con su velocidad durante ese intervalo, en vez de mover todas las partículas a pequeños intervalos de tiempos fijos, como se suele hacer en Dinámica Molecular con otros potenciales de interacción. En la referencia [115] se discute la aplicación del método a los fluidos granulares.

En la figura 6.3 presentamos los resultados obtenidos en un sistema muy diluido con una fracción sólida (la razón entre la suma de los áreas de los discos que componen el sistema y el área total de éste) de  $5 \times 10^{-4}$ , equivalente a una densidad numérica de  $n\sigma^2 \simeq 6.37 \times 10^{-4}$ . Para esta densidad de discos duros la función de correlación de pares en el equilibrio es  $\chi_e(n) \simeq 1.0008$  [116]. En la figura 6.3 (a) se representa la cantidad  $m_D \equiv (4D_0^E)^{-1} \partial \langle (\Delta r)^2 \rangle / \partial t$  en

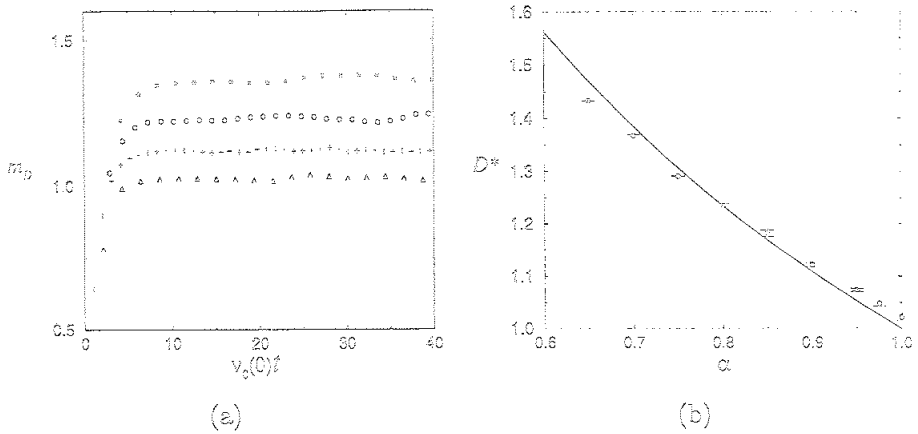


FIGURA 6.3: Cálculo numérico del coeficiente de autodifusión con Dinámica Molecular de un gas de discos duros ( $d = 2$ ). (a) Evolución temporal de la pendiente reducida  $m_D = (4D_0^E)^{-1} \partial_t ((\Delta r)^2)$  para  $\alpha = 0.7, 0.8, 0.9, 1$ , de arriba a abajo. Los valores estacionarios determinan  $D^*$ . (b) Comparación del coeficiente de autodifusión adimensional obtenido a partir de simulaciones de Dinámica Molecular (símbolos) con la predicción teórica dada por la ecuación (6.28) (línea continua).

función de  $\nu_0(0)$  para varios valores del coeficiente de restitución en el intervalo  $0.7 \leq \alpha \leq 1$ , donde  $\nu_0(0)$  es el valor inicial de la frecuencia de colisión de Boltzmann definido en la ecuación (6.33). Después de un pequeño intervalo de tiempo transitorio, las curvas alcanzan un *plateau* independiente del tiempo. En todo momento, la desviación cuadrática media de la densidad, junto con el cociente entre la energía cinética total y la energía térmica se mantenían muy pequeños, indicando que no había un movimiento significativo organizado de densidad o cantidad de movimiento. También se comprobó que la evolución de la temperatura seguía la ley de Haff. En base a ello, se puede afirmar que el sistema todavía se encontraba en el HCS [96].

De acuerdo con la predicción teórica de la ecuación (6.38), los valores estacionarios en la figura 6.3 (a) deben corresponderse con  $D^*(\alpha)$ , que viene dado por la ecuación (6.28). En la figura 6.3 (b) se comparan los valores teóricos con los obtenidos con la simulación de Dinámica Molecular de discos duros. De nuevo se observa un acuerdo muy bueno. También puede comprobarse que las pequeñas desviaciones que existen entre la simulación y la teoría son las mismas que las que se observan con las soluciones numéricas de la ecuación de Boltzmann para esferas duras, figura 6.1. De hecho, los resultados numéricos con un método de simulación y otro se superponen, aún cuando corresponden a sistemas de distinta dimensión. Esto es debido a que la única dependencia que

tiene  $D^*$  con la dimensionalidad del sistema  $d$  viene dada a través del coeficiente  $\alpha_2$ , que proporciona una contribución despreciable. Todo parece indicar que las discrepancias entre la teoría y la simulación son debidas al carácter aproximado de la solución de Chapman-Enskog que hemos obtenido, y en particular al uso de la primera aproximación de Sonine.

## 6.5 LA FUNCIÓN DE AUTOCORRELACIÓN DE VELOCIDADES

Como la ecuación de Boltzmann-Lorentz (6.1) es lineal, podemos escribirla fácilmente como una ecuación integro-diferencial para la densidad de probabilidad  $P(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  de que la partícula marcada esté en la posición  $\mathbf{r}$  con una velocidad  $\mathbf{v}$  en el instante  $t$ ,

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) P(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \Lambda(t)P(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (6.44)$$

donde el operador de colisiones  $\Lambda(t)$  viene dado por la ecuación (6.2). En esta ecuación el baño  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  es independiente del estado de las partículas marcadas. Ello es coherente con un proceso estocástico markoviano [117]. Efectivamente, la posición y velocidad de la partícula marcada en el instante  $t$  depende de la posición y la velocidad de la propia partícula en el instante anterior, así como del estado del baño en el momento en el que se producen las colisiones. Pero como éste no se modifica por el estado de la partícula marcada, no guarda ningún tipo de memoria de la historia de la partícula. Por supuesto, esto es una aproximación, se sabe que para tiempos suficientemente grandes hay que tener en cuenta que el resto de las partículas se ven alteradas por las partículas marcadas. En los sistemas elásticos este fenómeno es responsable de la divergencia del coeficiente de autodifusión en 2D, aunque, como comentamos en la introducción, este efecto es despreciable en las simulaciones que se pueden hacer actualmente. Si quisiéramos incluir estos efectos entonces el proceso no sería de Markov, pero tampoco sería válida la propia ecuación de Boltzmann-Lorentz, y al fin y al cabo, ya hemos visto en la sección 6.4 que reproduce fielmente los resultados de Dinámica Molecular para el coeficiente de autodifusión.

Obsérvese que, en principio, el proceso estocástico es markoviano en la variable  $X = \{\mathbf{r}, \mathbf{v}\}$ , así como en  $\mathbf{v}$  (pues el baño es homogéneo), pero no en la variable  $\mathbf{r}$ . Sin embargo, en realidad ya hemos visto en la sección 6.2 que en una escala temporal suficientemente grande el proceso se vuelve de Markov también en la variable  $\mathbf{r}$ . Utilizando el método de escalas múltiples obtuvimos una ecuación de evolución cerrada para la densidad de probabilidad  $P(\mathbf{r}, t)$ .

En esta escala de tiempo la partícula marcada colisiona tantas veces que su posición no se ve afectada realmente por su velocidad en un instante dado. No obstante, en la sección 6.2 no definimos la escala de tiempo en la que es válida la ecuación de difusión. Esto lo haremos en esta sección analizando la función de autocorrelación de velocidades.

Al ser el baño homogéneo, solamente estamos interesados en una ecuación en la variable  $v$ . Definamos la densidad de probabilidad  $P(v, t)$  como la marginal

$$P(v, t) = \int dx P(x, v, t). \quad (6.45)$$

Entonces, integrando la ecuación (6.44) obtenemos la ecuación de evolución para esta distribución,

$$\frac{\partial}{\partial t} P(v, t) = \Lambda(t) P(v, t), \quad (6.46)$$

cuya solución formal es

$$P(v, t) = e^{\int_0^t dt' \Lambda(t')} P(v, 0). \quad (6.47)$$

Por otro lado, la función de autocorrelación de velocidades se define para  $t_0 \leq t$  como [117]

$$\begin{aligned} \langle v_x(t_0) v_x(t) \rangle &= \int dv_1 \int dv_2 v_{1x} v_{2x} P_2(v_1, t_0; v_2, t) \\ &= \int dv_1 \int dv_2 v_{1x} v_{2x} P_{1/1}(v_2, t | v_1, t_0) P(v_1, t_0), \end{aligned} \quad (6.48)$$

donde  $P_{1/1}(v_2, t | v_1, t_0)$  es la densidad de probabilidad condicionada de que la partícula tenga la velocidad  $v_2$  en el instante  $t$  sabiendo que en el instante  $t_0$  tenía una velocidad  $v_1$ . Por tanto,  $P_{1/1}$  será solución de la ecuación (6.46) con la condición inicial  $P_{1/1}(v_2, t_0 | v_1, t_0) = \delta(v_2 - v_1)$ . A partir de (6.47) será pues

$$P_{1/1}(v_2, t | v_1, t_0) = e^{\int_{t_0}^t dt' \Lambda(t')} \delta(v_2 - v_1). \quad (6.49)$$

En esta ecuación el operador lineal  $\Lambda$  sólo actúa sobre  $v_2$ . Así,

$$\begin{aligned} \langle v_x(t_0) v_x(t) \rangle &= \int dv_2 v_{2x} e^{\int_{t_0}^t dt' \Lambda(t')} \int dv_1 v_{1x} P(v_1, t_0) \delta(v_2 - v_1) \\ &= \int dv_2 v_{2x} e^{\int_{t_0}^t dt' \Lambda(t')} v_{2x} P(v_2, t_0). \end{aligned} \quad (6.50)$$

Por otro lado, sabemos que para tiempos suficientemente grandes, independientemente de las condiciones iniciales, la función de distribución de la partícula

marcada debe ser la misma que la del resto de las partículas baño, pues todas las partículas son mecánicamente equivalentes. Aquí vamos a calcular la función de autocorrelación de velocidades a partir del instante  $t_0$  en el que la distribución de velocidades de la partícula marcada sigue al baño, esto es,  $P(\mathbf{v}, t_0) = f(\mathbf{v}, t_0)/n$ .

Resumiendo, hemos encontrado que se puede escribir la función de autocorrelación de velocidades como

$$\langle v_x(t_0)v_x(t) \rangle = \int d\mathbf{v} v_x \varphi(\mathbf{v}, t), \quad (6.51)$$

donde  $\varphi(\mathbf{v}, t)$  es solución de la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{v}, t) = \Lambda(t) \varphi(\mathbf{v}, t), \quad (6.52)$$

con la condición inicial  $\varphi(\mathbf{v}, t_0) = v_x f(\mathbf{v}, t_0)/n$ . Para resolver este problema utilizaremos la misma aproximación que usamos en la sección 6.2 para calcular el coeficiente de autodifusión. Es decir, vamos a aproximar  $\varphi(\mathbf{v}, t)$  por el orden más bajo en el desarrollo en polinomios de Sonine

$$\varphi(\mathbf{v}, t) \approx r(t) v_x f_M(\mathbf{v}, t), \quad (6.53)$$

donde  $f_M(\mathbf{v}, t)$  es la distribución gaussiana (6.8) y  $r(t)$  es una función del tiempo que tenemos que calcular. Sin embargo, nótese que con la aproximación (6.53) no se verifica exactamente la condición inicial, pues la función de distribución del baño  $f_H(\mathbf{v}, t)$  (6.7) incluye correcciones de órdenes superiores de Sonine. Entonces uno podría estar tentado en suponer  $\varphi(\mathbf{v}, t) \approx r(t) v_x f_H(\mathbf{v}, t)$ , lo cual no modificaría la dependencia temporal de la función de autocorrelación. No obstante, lo más correcto sería desarrollar  $\varphi$  en los tres primeros polinomios de Sonine, el mismo orden que tenemos en  $f_H$ , y resolver el sistema de ecuaciones que resulta. Por el contrario, ya hemos visto en las secciones anteriores que la dependencia del coeficiente de autodifusión con el coeficiente de Sonine  $a_2(\alpha)$  del baño es despreciable. De esta manera, vamos a ser consistentes con los cálculos que llevamos a cabo en la sección 6.2 y considerar directamente (6.53).

Al igual que pasaba con el procedimiento de Chapman-Enskog, no necesitamos calcular  $r(t)$  explícitamente. Derivando la ecuación (6.51) con respecto al tiempo se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle v_x(t_0)v_x(t) \rangle = -\nu_D(t) \langle v_x(t_0)v_x(t) \rangle, \quad (6.54)$$

donde  $\nu_D(t)$  es

$$\nu_D(t) = -\frac{\int d\mathbf{v} v_x \Lambda(t) f_M(\mathbf{v}, t) v_x}{\int d\mathbf{v} v_x^2 f_M(\mathbf{v}, t)}. \quad (6.55)$$



Pero ya hemos calculado este coeficiente en el apéndice D, allí obtuvimos (D.6):

$$\nu_D(t) = \frac{2(1+\alpha)\pi^{(d-1)/2}}{d\Gamma(d/2)} \left( \frac{k_B T_H(t)}{m} \right)^{1/2} n \sigma^{d-1} \left( 1 - \frac{\alpha_2(\alpha)}{32} \right). \quad (6.56)$$

Podemos resolver fácilmente la ecuación diferencial (6.54) en la escala del tiempo de colisión  $\tau$  definida en la ecuación (6.34), pues entonces

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \langle v_x(\tau_0) v_x(\tau) \rangle = -\gamma^* \langle v_x(\tau_0) v_x(\tau) \rangle, \quad (6.57)$$

donde

$$\gamma^*(\alpha) = \frac{2(1+\alpha)}{d} \left( 1 - \frac{\alpha_2(\alpha)}{32} \right). \quad (6.58)$$

En el instante  $\tau_0$  la partícula ya sigue la distribución del baño,  $\langle v_x(\tau_0)^2 \rangle = k_B T_H(\tau_0)/m$ , por lo tanto,

$$\langle v_x(\tau_0) v_x(\tau) \rangle = \frac{k_B T_H(\tau_0)}{m} e^{-\gamma^*(\tau-\tau_0)} \quad \tau > \tau_0. \quad (6.59)$$

Luego la función de autocorrelación de velocidades en un gas granular diluido que se encuentra en el estado de enfriamiento homogéneo decae exponencialmente en la variable del tiempo de colisión. Esto se traduce en un decaimiento algebraico en la variable temporal  $t$ . Efectivamente, si definimos  $\nu^*(\alpha)$  de forma que  $\zeta_H(t) = \nu^* \nu_0(t)$ , es decir<sup>1</sup>,

$$\nu^*(\alpha) = \frac{1-\alpha^2}{d} \left( 1 + \frac{3\alpha_2(\alpha)}{16} \right), \quad (6.60)$$

entonces, a partir de la ecuación (6.9), podemos escribir la ley de variación de la temperatura del gas como  $T_H(\tau) = T_H(0)e^{-2\nu^*\tau}$  y de aquí  $\nu_0(\tau) = \nu_0(0)e^{-\nu^*\tau}$ . De esta manera, teniendo en cuenta la definición de la frecuencia de colisión  $\nu_0(t)$  (6.33), se puede calcular fácilmente la relación que existe entre ambas variables temporales,

$$\tau = \frac{1}{\nu^*} \ln \left( 1 + \frac{\nu_0(0)}{2} \nu^* t \right). \quad (6.61)$$

En el límite elástico ( $\alpha = 1$ ) la variable del tiempo de colisión  $\tau$  es lineal con  $t$ , mientras que para cualquier otro valor de  $\alpha$  aumenta logarítmicamente en el

<sup>1</sup>No confundir esta frecuencia de colisión adimensional  $\nu^*(\alpha)$  con la definida en el capítulo anterior  $\zeta^*(\alpha)$  (5.35), aunque son iguales salvo una constante de proporcionalidad. En el primer caso  $\zeta^*$  está definida a partir de una frecuencia de colisión típica basada en la viscosidad tangencial  $\nu_H(t)$ , mientras que aquí definimos  $\nu^*$  a partir de la frecuencia de colisión de la gaussiana  $\nu_0(t)$  (6.33).

tiempo y, por consiguiente, la función de autocorrelación de velocidades (6.59) decae algebraicamente.

Veamos ahora cómo podemos relacionar estos resultados con los obtenidos en las secciones anteriores. La velocidad de la partícula no es más que la derivada temporal de la posición. Por consiguiente, la función de autocorrelación de velocidades debe estar relacionada con la desviación cuadrática media de la posición mediante la expresión

$$\langle x(t)^2 \rangle = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle v_x(t_1) v_x(t_2) \rangle, \quad (6.62)$$

donde hemos supuesto, por simplicidad, que en  $t = 0$  la partícula se encuentra en  $x = 0$ . Por otro lado, de acuerdo con lo que vimos en la sección 6.2 para el coeficiente de autodifusión, en la escala de tiempo en el que es válida la solución normal y por tanto la ecuación (6.38) debe cumplirse

$$\langle x(t)^2 \rangle = \int_0^t dt_1 2D(t_1), \quad (6.63)$$

con el coeficiente de autodifusión dado por (6.28). Comparando estas dos últimas ecuaciones se observa que ambas descripciones son compatibles si se verifica

$$2D(t_1) = \int_0^{t_1} dt_2 \langle v_x(t_1) v_x(t_2) \rangle. \quad (6.64)$$

Es de esperar que sea así si  $t$  es suficientemente grande, de forma que la función de autocorrelación haya decaído y la integral no dependa sensiblemente de  $t$ . Para ello calculemos la integral del segundo miembro de (6.64) utilizando la expresión que hemos obtenido para la función de autocorrelación de velocidades, ecuación (6.59),

$$\begin{aligned} \int_0^t dt_2 \langle v_x(t_1) v_x(t_2) \rangle &= \int_0^{t_1} dt_2 \langle v_x(t_1) v_x(t_2) \rangle + \int_{t_1}^t dt_2 \langle v_x(t_1) v_x(t_2) \rangle \\ &= \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \frac{2}{\nu_0(\tau_2)} \langle v_x(\tau_2) v_x(\tau_1) \rangle + \int_{\tau_1}^{\tau} d\tau_2 \frac{2}{\nu_0(\tau_2)} \langle v_x(\tau_1) v_x(\tau_2) \rangle \\ &= \frac{2k_B T_H(0)}{\nu_0(0)m} e^{-\nu^* \tau_1} \left[ \int_0^{\tau_1} d\tau_2 e^{-(\gamma^* - \nu^*)(\tau_1 - \tau_2)} \right. \\ &\quad \left. + \int_{\tau_1}^{\tau} d\tau_2 e^{-(\gamma^* - \nu^*)(\tau_2 - \tau_1)} \right]. \end{aligned} \quad (6.65)$$

Si  $\tau_1$  y  $\tau$  están en la escala de tiempos en el que la función de autocorrelación de velocidades ya ha decaído, es decir, si se cumple que  $(\gamma^* - \nu^*)\tau_1 \gg 1$  y

$(\gamma^* - \nu^*)(\tau - \tau_1) \gg 1$ , podemos extender los límites de integración en (6.65) hasta infinito,

$$\begin{aligned}
 \int_0^t dt_2 \langle v_x(t_1) v_x(t_2) \rangle &= \frac{2k_B T_H(0)}{\nu_0(0)m} e^{-\nu^* \tau_1} \left[ \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 e^{-(\gamma^* - \nu^*)(\tau_1 - \tau_2)} \right. \\
 &\quad \left. + \int_{\tau_1}^{\infty} d\tau_2 e^{-(\gamma^* - \nu^*)(\tau_2 - \tau_1)} \right] \\
 &= \frac{2k_B T_H(0)}{\nu_0(0)m} e^{-\nu^* \tau_1} 2 \int_{\tau_1}^{\infty} d\tau_2 e^{-(\gamma^* - \nu^*)(\tau_2 - \tau_1)} \\
 &= 2 \int_{t_1}^{\infty} dt_2 \langle v_x(t_1) v_x(t_2) \rangle \\
 &= \frac{4k_B T_H(0)}{\nu_0(0)m} \frac{e^{-\nu^* \tau_1}}{\gamma^* - \nu^*} \\
 &= 2 \frac{\Gamma(d/2)}{\pi^{(d-1)/2} n \sigma^{d-1}} \frac{1}{(\gamma^* - \nu^*)} \left[ \frac{k_B T_H(\tau_1)}{m} \right]^{1/2}.
 \end{aligned} \tag{6.66}$$

Comparando la expresión que obtuvimos para  $D^*$  (6.28) con la de  $\gamma^*$  (6.58) y  $\nu^*$  (6.60) se llega a que

$$D^*(\alpha) = \frac{4}{d[\gamma^*(\alpha) - \nu^*(\alpha)]}. \tag{6.67}$$

Finalmente, utilizando esta ecuación junto con la definición del coeficiente de difusión elástico  $D_0$  (6.29) se prueba la ecuación (6.64).

Haciendo uso de los pasos intermedios en (6.66) podemos reescribir este resultado como

$$D(t) = \int_t^{\infty} dt' \langle v_x(t) v_x(t') \rangle, \tag{6.68}$$

que es lo que se conoce como una fórmula de Green-Kubo [118-120], y nos relaciona el coeficiente de transporte asociado a la autodifusión con las fluctuaciones de la velocidad en el estado de enfriamiento homogéneo.

Despreciando las correcciones de Sonine del baño, la cantidad  $\gamma^* - \nu^* = (1+\alpha)^2/d$  es siempre del orden de la unidad en el rango permitido del coeficiente de restitución ( $0 < \alpha \leq 1$ ). En consecuencia, la fórmula de Green-Kubo (6.68) es válida en una escala de tiempo en la que la variable del tiempo de colisión es muy grande. Traducido a la variable real  $t$ , la condición que se tiene que cumplir es que

$$\Delta t \gg \frac{2}{\nu_0(t)}. \tag{6.69}$$

Este es el resultado que esperábamos, pues la ecuación de difusión debe ser válida en una escala de tiempo en el que la partícula experimenta muchas colisiones, de forma que la velocidad instantánea de la partícula no es importante para describir la difusión de ésta en el baño. La única diferencia con el caso elástico es que el estado de referencia depende del tiempo y, por lo tanto, el número medio de colisiones que experimenta cada partícula será cada vez menor. Por supuesto, todo ello aparte de las inestabilidades en densidad y velocidad que se acaban desarrollando en el sistema, alcanzándose un estado que se encuentra fuera del ámbito de este capítulo.

## CAPÍTULO 7

# SOLUCIÓN NORMAL EN UN ESTADO ESTACIONARIO SIN FLUJOS CONVECTIVOS

### 7.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se estudia el estado estacionario de un gas diluido de esferas duras inelásticas confinado entre dos paredes paralelas a la misma temperatura. El concepto de «pared térmica» se definirá con precisión en la sección 7.2, aunque lo importante aquí es que las dos paredes suministran energía al sistema de forma simétrica. Muchos de los resultados que obtendremos no dependen de la forma concreta en que se introduce energía en el sistema a través de las paredes. Esta energía es necesaria para compensar la energía cinética disipada en las colisiones y poder alcanzar así un estado estacionario.

Este estado fue estudiado por vez primera por Kadanoff et al. [121] en un sistema unidimensional <sup>1</sup>, poniendo de manifiesto la insuficiencia de las ecuaciones hidrodinámicas para describir tal estado. En particular, se observaba había partículas con velocidades muy distintas, careciendo de sentido los perfiles de temperatura y densidad obtenidos mediante una descripción hidrodinámica. Por contra, en trabajos posteriores [61, 122] se mostró que no sucedía lo mismo en un sistema bidimensional. Los perfiles de densidad y temperatura eran suaves y las ecuaciones de Navier-Stokes se verificaban con un grado aceptable de precisión, relegando «la ruptura de la hidrodinámica» a las peculiaridades de los sistemas monodimensionales, los cuales, por otra parte, también son patológicos cuando las colisiones son elásticas, pues estas no son capaces de llevar al sistema al equilibrio termodinámico. Sin embargo, a medida que se disminuye el coeficiente de restitución los gradientes son mayores, lo que hace necesario con-

---

<sup>1</sup>Ellos consideraban el gas entre una pared térmica y otra perfectamente elástica, que por el método de las imágenes es cinéticamente equivalente al nuestro, como veremos más adelante.

siderar órdenes superiores en el método de Chapman-Enskog. Este problema es particularmente interesante, porque nos permite controlar el tamaño de los gradientes modificando el coeficiente de restitución (en el caso límite de  $\alpha = 1$  el estado es homogéneo), siendo idóneo para analizar la validez de una descripción hidrodinámica en una situación muy inhomogénea.

En la sección 7.2 describiremos brevemente el sistema estudiado. En la sección 7.3 discutiremos con detalle la aproximación de Navier-Stokes y la compararemos con resultados de la simulación de la ecuación de Boltzmann [61]. Las ecuaciones de Navier-Stokes ofrecen un buen nivel de descripción en el límite cuasielástico, aunque no son capaces de predecir la anisotropía del tensor de presiones en el estado estacionario. Cuando se disminuye el coeficiente de restitución estas ecuaciones dejan de ser aplicables, aunque, como veremos en la sección 7.4, todavía existe una región de volumen en el sistema donde la función de distribución es normal. De hecho, en la sección 7.4 propondremos un método para determinar dicha región. En la sección 7.5 analizaremos directamente, a partir de la ecuación de Boltzmann, la parte de esta solución normal donde la presión es constante (lejos del centro del sistema). En particular, veremos que se verifica la ley de Fourier para un gradiente de temperatura arbitrario [123].

## 7.2 DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA

El sistema que vamos a considerar consiste en un gas de esferas duras inelásticas confinado entre dos placas infinitas perpendiculares al eje  $x$  y separadas por una distancia  $L$ , tomando el origen de coordenadas en el centro del sistema. Las dos placas son paredes térmicas difusivas a la misma temperatura  $T_w$ , es decir, cada vez que una partícula colisiona con la pared es devuelta con una velocidad escogida aleatoriamente de acuerdo con la distribución de Maxwell-Boltzmann

$$P(\mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d-1}{2}}} \left( \frac{m}{k_B T_w} \right)^{\frac{d+1}{2}} |v_x| \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T_w}\right). \quad (7.1)$$

Estas paredes se utilizan frecuentemente en el contexto de los fluidos moleculares. También son relevantes en el marco de los medios granulares, ya que se pueden reproducir experimentalmente utilizando una placa vibrante en el régimen donde la frecuencia de las oscilaciones (sinuosidales) es mucho mayor que la frecuencia de colisión en el gas [124]. Matemáticamente, estas paredes implican las siguientes condiciones de contorno para la función de distribución

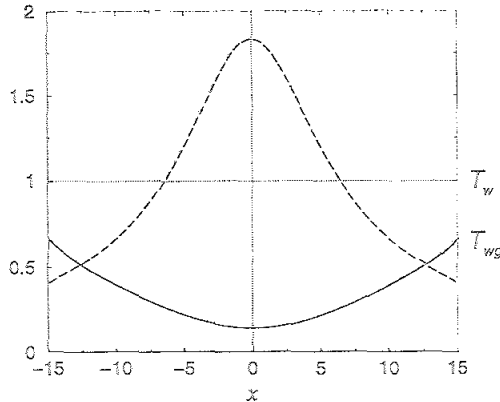


FIGURA 7.1: Perfiles hidrodinámicos en el estado estacionario de un gas de discos duros con  $\alpha = 0.95$ . La línea discontinua es la densidad normalizada por la densidad media y la línea continua la temperatura granular escalada con la temperatura  $T_w$  de las paredes,  $T_{wg}$  es la temperatura del gas en las proximidades de las paredes térmicas. La posición se mide en unidades del recorrido libre medio.

de una partícula (ver apéndice E)

$$f(x = \pm L/2, \mathbf{v}, t) \theta(\mp v_x) = \theta(\mp v_x) \int d\mathbf{v}' \theta(\pm v'_x) f(x = \pm L/2, \mathbf{v}', t) \frac{|v'_x|}{|v_x|} P(\mathbf{v}), \quad (7.2)$$

donde  $\theta(x)$  es la función escalón o de Heaviside. Si las colisiones fueran elásticas, el estado final sería de equilibrio termodinámico a la temperatura de las paredes  $T_w$ . Cuando se consideran partículas inelásticas también se observa un estado final estacionario, pero este es altamente inhomogéneo en el espacio. En la figura 7.1 hemos representado los perfiles típicos de la densidad y la temperatura para un gas de discos duros inelásticos con  $\alpha = 0.95$  en este estado, obtenidos a partir del método de simulación DSMC de la ecuación de Boltzmann. Se observa que en el centro del sistema se encuentra la mayor concentración de partículas, las cuales se mueven lentamente (la temperatura tiene un mínimo en  $x = 0$ ). Una cantidad más pequeña de partículas, con mayor velocidad, se encargan de recoger energía de las paredes y transmitirlas al grueso del sistema.

Debido a la simetría del sistema, la solución estacionaria de la ecuación de Boltzmann (3.29) con las condiciones de contorno (7.2) debe cumplir

$$f(x, v_x, v_y, v_z) = f(-x, -v_x, v_y, v_z). \quad (7.3)$$

Consideremos ahora un sistema confinado entre una pared térmica en  $x = -L/2$  y una pared reflectante en  $x = 0$ . La condición de contorno cinética en la pared

térmica viene dada por la ecuación (7.2) (con el signo negativo), mientras que la de la pared elástica no es más que (7.3) con  $\alpha = 0$  (véase el apéndice E). Por tanto, la solución del problema de las dos paredes térmicas también es solución de esta configuración, pues verifica la misma ecuación y las condiciones de contorno que determinan la función de distribución. El recíproco también es cierto, a partir de la solución estacionaria del sistema con la pared reflectante podemos construir la solución del problema simétrico. Sin embargo, desde el punto de vista de simulación ambos sistemas no son completamente equivalentes. Cuando se llevan a cabo simulaciones del sistema de las dos paredes térmicas, en situaciones tales en las que el pico del perfil de densidad es muy agudo (esto se puede conseguir disminuyendo suficientemente el coeficiente de restitución), se observa que la posición de éste fluctúa rápidamente respecto a  $x = 0$ . La velocidad de este movimiento colectivo puede llegar a ser mucho mayor que la velocidad térmica en el centro del pico [91]. Sin embargo, este fenómeno es difícil de observar en el sistema con una pared reflectante.

## 7.3 LA APROXIMACIÓN DE NAVIER-STOKES

La suavidad de los campos hidrodinámicos en la figura 7.1 sugiere que la hidrodinámica debe funcionar para este estado. En esta sección analizaremos la aproximación de Navier-Stokes en este sistema.

### 7.3.1 ECUACIONES HIDRODINÁMICAS

Estamos interesados en las propiedades de un estado estacionario sin campo de velocidades macroscópico, es decir,  $u = 0$ . En el sistema que consideramos sólo existen gradientes en la dirección del eje  $x$ . Es conveniente introducir una nueva variable espacial  $s^*$ , definida por

$$s^* = \sqrt{\frac{m}{2k_B T_0}} \int_0^x dx' \nu(x'), \quad (7.4)$$

donde  $\nu$  es una frecuencia de colisión característica,

$$\nu(x) = C n(x) \sigma^{d-1} \left( \frac{\pi k_B T(x)}{m} \right)^{1/2}, \quad (7.5)$$

siendo

$$C = \frac{8(d-1)\pi^{\frac{d-2}{2}}}{\Gamma(d/2)d(d+2)} = \begin{cases} 1 & d=2 \\ \frac{32}{15} & d=3 \end{cases} \quad (7.6)$$



la constante necesaria para que la conductividad térmica del modelo cinético definido en la sección 3.5 coincida exactamente con la de Boltzmann en el límite elástico. Aunque en este capítulo sólo se discutirán resultados obtenidos a partir de la ecuación de Boltzmann, esta definición es útil para poder compararlos fácilmente con los que se obtienen a partir del modelo cinético [61]. En la ecuación (7.4)  $T_0 = T(0)$  es la temperatura en el centro del sistema. Hacemos uso de esta temperatura en la definición de  $s^*$  con objeto de que sea una cantidad sin dimensiones.<sup>2</sup>

A partir de consideraciones de simetría, la función de distribución debe ser una función par de las componentes de la velocidad perpendiculares a la dirección  $x$ . Esto implica que las componentes no diagonales del tensor de presiones (3.37) deben ser todas nulas. De esta manera, las ecuaciones de balance (3.34)–(3.36) se reducen en este estado a

$$\frac{\partial P_{xx}}{\partial s^*} = 0, \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial q_x}{\partial s^*} = -(1 - \alpha^2) \left( \frac{2k_B T_0}{m} \right)^{1/2} \frac{\omega}{\nu}. \quad (7.8)$$

En la sección 5.3 se calcularon las expresiones para el tensor de presiones  $P$ , el flujo de calor  $q$  y el término fuente  $\omega$  en el orden de Navier-Stokes. Particularizando para este problema sin flujos convectivos, se obtiene un tensor de presiones isótropo

$$P_{ij} = p\delta_{ij}, \quad (7.9)$$

donde  $p = nk_B T$  es la presión hidrostática. Entonces, en concordancia con la ecuación (7.7), la presión debe ser uniforme en el estado estacionario:

$$\frac{\partial p^*}{\partial s^*} = 0, \quad (7.10)$$

donde  $p^* = p/p_0$ , siendo  $p_0$  la presión en  $x = 0$ . Utilizando este resultado se encuentra para el flujo de calor en el orden más bajo

$$q_x = -(\kappa^* - \mu^*) \frac{d+2}{2} \left( \frac{k_B T_0}{2m} \right)^{1/2} p \frac{\partial T^*}{\partial s^*}, \quad (7.11)$$

donde  $\kappa^*$  y  $\mu^*$  vienen dados por las ecuaciones (5.31) y (5.32), respectivamente, y  $T^* = T/T_0$ . En el orden de Navier-Stokes, el término fuente  $\omega$  contiene

<sup>2</sup>El motivo por el cual hemos utilizado  $T_0$  y no  $T_w$  está relacionado con el concepto de solución normal, como se verá más adelante.

contribuciones hasta segundo orden en los gradientes (véase la sección 5.3). Sin embargo, todos los gradientes que aparecen en el sistema están íntimamente ligados con el parámetro de inelasticidad  $\epsilon = 1 - \alpha^2$ , pues cuando  $\epsilon \rightarrow 0$  estos desaparecen. De esta manera, un desarrollo en gradientes es, de alguna manera, un desarrollo en  $\epsilon$ .<sup>3</sup> Hay que tener esto en cuenta porque en la ecuación (7.8) aparece un factor  $\epsilon$  multiplicando a  $w$ . Por consiguiente, para ser realmente consistentes debemos retener el orden más bajo del desarrollo de  $w$ . A partir de la ecuación (5.38) se obtiene (despreciando el coeficiente de Sonine  $c_2$ )

$$w = \frac{d(d+2)}{8(d-1)} \nu p. \quad (7.12)$$

Estas dos últimas ecuaciones nos proporcionan el perfil de temperatura en la variable  $s^*$ :

$$\frac{\partial^2 T^*}{\partial s^{*2}} = c(\alpha), \quad (7.13)$$

donde

$$c(\alpha) = \frac{d(1-\alpha^2)}{2(d-1)(\kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha))}. \quad (7.14)$$

### 7.3.2 CONDICIONES DE CONTORNO

Consideremos ahora las condiciones de contorno que debemos aplicar a las ecuaciones hidrodinámicas. De la propia definición de la temperatura escalada  $T^*$  se deduce que  $T^*(0) = 1$ . Por otro lado, a partir de la simetría del sistema (7.3) el gradiente de temperatura debe anularse en  $x = 0$ , o sea,  $\partial T^*/\partial s^*(0) = 0$ . Integrando la ecuación (7.13) se obtiene un perfil de temperatura parabólico,  $T^*(s^*) = 1 + c(\alpha)s^{*2}/2$ . Análogamente, a partir de la ecuación (7.10) se obtiene  $p^*(s^*) = 1$ . Sin embargo, todavía debemos conectar estas variables escaladas con las reales.

Partiendo de la definición de  $s^*$ , ecuación (7.4), tenemos

$$\sqrt{\frac{2k_B T_0}{m}} \frac{1}{\nu} ds = dx, \quad (7.15)$$

e integrando esta ecuación resulta

$$\int_0^{s^L} ds^* \frac{T^*(s^*)^{1/2}}{p^*(s^*)} = C \sigma^{d-1} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \frac{L p_0}{2k_B T_0}, \quad (7.16)$$

<sup>3</sup>De hecho es un desarrollo en potencias de  $\epsilon^{1/2}$ , véase la referencia [61].

donde  $s_L \equiv s^*(x = L/2)$ .

En la figura 7.1 se puede observar que la temperatura del gas en las cercanías de las paredes térmicas no es igual a la temperatura de las paredes  $T_w$  (1 en la gráfica), sino que alcanza un valor inferior  $T_{wg}$ . Este efecto es conocido aún en los sistemas con colisiones elásticas, produciéndose un salto discontinuo de la temperatura siempre que existe un gradiente de temperatura en el sistema [88]. La razón es que la solución normal sobre la cual se sustentan las ecuaciones hidrodinámicas (ver apéndice C) no verifica la condición de contorno cinética (7.2). Para resolver este problema hay que acudir a la propia ecuación cinética, lo cual es muy complicado. Sin embargo, en la simulación se observa que el valor del cociente  $T_{wg}/T_w$  es prácticamente constante cuando se modifica el tamaño del sistema, dependiendo sólo del coeficiente de restitución. Podemos utilizar este valor medido de la simulación como condición de contorno, es decir,

$$T^*(s_L) = \frac{T_{wg}}{T_0}. \quad (7.17)$$

La condición de contorno que nos queda está relacionada con el número total de partículas de nuestro sistema, es decir,  $\langle n \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx n(x)/L$ , donde  $\langle n \rangle$  es la densidad numérica media. De esta manera, en términos nuestras variables adimensionales debe verificarse

$$\int_0^{s_L} ds^* \frac{1}{T^*(s^*)^{1/2}} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} C \frac{\langle n \rangle \sigma^{d-1} L}{2}. \quad (7.18)$$

Las relaciones (7.16)–(7.18) forman un conjunto de tres ecuaciones que nos determinan  $s_L$ ,  $T_0$  y  $p_0$  en función de los parámetros del sistema. Sustituyendo en estas ecuaciones la expresiones de  $T^*(s^*)$  y  $p^*(s^*)$  que hemos encontrado en el orden de Navier-Stokes se obtiene

$$s_L = \left(\frac{2}{c}\right)^{1/2} \sinh\left(\beta \frac{L}{l_0}\right), \quad (7.19)$$

$$T_0 = \frac{T_{wg}}{\cosh\left(\beta \frac{L}{l_0}\right)^2} \quad (7.20)$$

y

$$\frac{p_0}{k_B T_0} = \frac{\langle n \rangle}{2} \left[ 1 + \frac{1}{2\beta(L/l_0)} \sinh\left(2\beta \frac{L}{l_0}\right) \right], \quad (7.21)$$

donde

$$\beta(\alpha) \equiv \frac{(d-1)\Gamma\left(\frac{d+1}{2}\right)}{d(d+2)\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \sqrt{2c(\alpha)}. \quad (7.22)$$

En estas ecuaciones  $l_0$  es el recorrido libre medio efectivo, definido en (4.9).

Desde luego, también podemos expresar  $s^*$  en términos de la coordenada  $x$ . Integrando la ecuación (7.15) y utilizando (7.21) se llega a

$$\sqrt{\frac{c}{2}} s^* \sqrt{1 + \frac{c s^{*2}}{2}} + \operatorname{arcsenh} \left( \sqrt{\frac{c}{2}} s^* \right) = \frac{2\beta x}{l_0} \left[ 1 + \frac{1}{2\beta(L/l_0)} \operatorname{senh} \left( 2\beta \frac{L}{l_0} \right) \right]. \quad (7.23)$$

Consideremos ahora el límite  $L/l_0 \rightarrow \infty$ . Físicamente podemos tomar este límite bien aumentando el tamaño del sistema  $L$ , bien aumentando la densidad numérica de partículas ( $n$ ) (véase la sección 4.4). En cualquier caso, para un  $x \neq 0$ , el segundo miembro de la ecuación (7.23) tiende a infinito, lo que implica  $s^* \rightarrow \infty$ . Pero entonces podemos despreciar el segundo sumando frente al primero en el primer miembro de (7.23). Expresando  $s^*$  en función de  $T^*$  se obtiene

$$T^* \sim \frac{1}{L} \operatorname{senh} \left( 2\beta \frac{L}{l_0} \right) |x|. \quad (7.24)$$

Como  $T = T_0 T^*$ , utilizando (7.20) se llega al sorprendente resultado

$$T(x) \sim T_w \frac{2|x|}{L} \quad (L/l_0 \rightarrow \infty, x \neq 0). \quad (7.25)$$

Esto es, en sistemas suficientemente densos o grandes, la temperatura (y por tanto el inverso de la densidad) decae linealmente con  $x$  cerca de las paredes. Esta situación ha sido observada en simulaciones de Dinámica Molecular [122] y será analizada con más detenimiento en la sección 7.5.

### 7.3.3 SIMULACIÓN DIRECTA DE MONTE CARLO

Para comprobar las predicciones teóricas obtenidas en el apartado anterior hemos realizado simulaciones de Monte Carlo de la ecuación de Boltzmann. Consideramos un gas de  $N = 48000$  discos duros inelásticos ( $d = 2$ ) en un sistema con la geometría descrita en la sección 7.2. Para emular un sistema infinito en la dirección  $y$  utilizamos condiciones periódicas de contorno. Las unidades reducidas vienen definidas por  $m = 1$ ,  $k_B T_w = 1/2$  y  $l_0 = 1$ . Escogimos un tiempo de evolución libre  $\Delta t_n = 0.2$  (ver capítulo 4). En las simulaciones que presentaremos en esta sección se han utilizado un total de  $120 \times 10$  celdas, con un tamaño del sistema fijo de  $L = 30l_0$ . El estado inicial era homogéneo con una distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann a la misma temperatura que las paredes. Los resultados han sido promediados sobre varias trayectorias, además de sobre distintos instantes de tiempo una vez que se alcanzaba el estado estacionario.

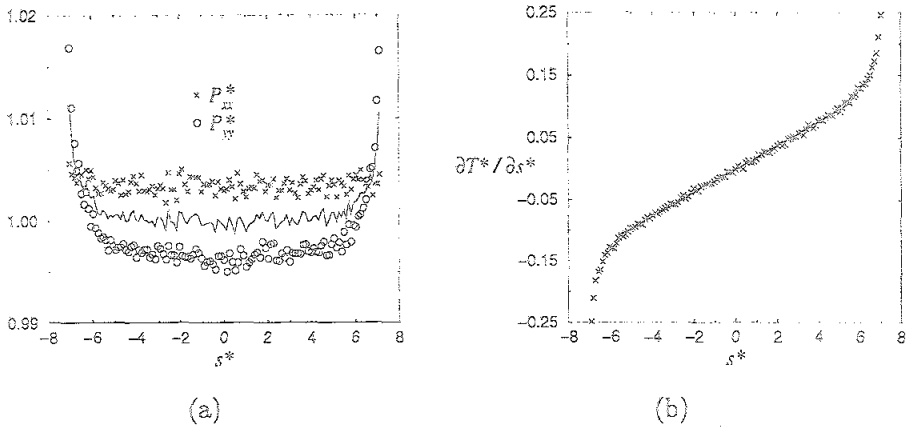


FIGURA 7.2: Estado estacionario para  $\alpha = 0.99$ . (a) Perfiles de las componentes diagonales del tensor de presiones:  $P_{xx}^* = P_{xx}/p_0$  (cruces) y  $P_{yy}^* = P_{yy}/p_0$  (círculos). La línea continua es la presión hidrostática  $p^*$ . (b) Pendiente del perfil de temperatura.

En la figura 7.2 presentamos los resultados de simulación del tensor de presiones y la temperatura en función de  $s^*$  para un sistema con  $\alpha = 0.99$ . Lejos de las paredes se observa que la presión es uniforme y el perfil de temperatura se puede describir de forma precisa por una parábola, en concordancia con las predicciones de la aproximación de Navier-Stokes. La línea continua en la figura 7.2 (b) es un ajuste lineal usado para determinar el valor numérico de  $\partial^2 T^*/\partial s^{*2}$  en el volumen del sistema. Sin embargo, cerca de las paredes ni la presión es uniforme ni la temperatura se comporta como predicen las ecuaciones hidrodinámicas. Esto no es sorprendente, ya que incluso en los fluidos moleculares las ecuaciones de Navier-Stokes sólo son válidas en la región del espacio donde la función de distribución es una solución normal, es decir, la región donde la dependencia espacial (y también temporal en el caso general) de la función de distribución está determinada enteramente a través de los campos hidrodinámicos. En la región cercana de los contornos, denominada «capa de Knudsen», la función de distribución de velocidades depende drásticamente del tipo de pared que se esté utilizando.

No obstante, en la figura 7.2 (a) se puede observar que aún en el volumen del sistema  $P_{xx}$  es más grande que  $P_{yy}$ , contrariamente a la predicción de la aproximación de Navier-Stokes, ecuación (7.9). Esta discrepancia es fácil de comprender ya que la desviación de las componentes del tensor de presiones es de orden  $\epsilon$ , mientras que la aproximación de Navier-Stokes es un desarrollo en primer orden en los gradientes, que equivale a quedarse en el orden  $\epsilon^{1/2}$  (como puede comprobarse fácilmente analizando las ecuaciones (7.8) y (7.11)). En la referencia [61] se consigue explicar este fenómeno a partir de un desarrollo en el

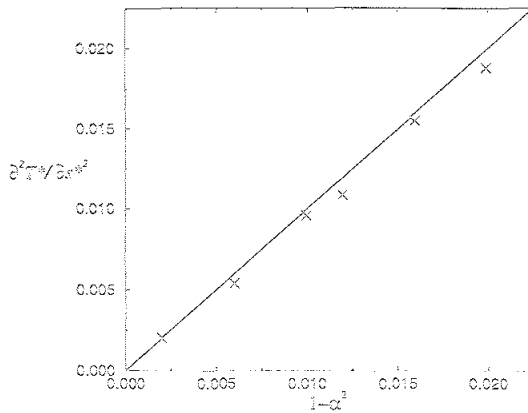


FIGURA 7.3: Derivada segunda de la temperatura adimensional  $T^*$  respecto a la posición  $s^*$  en función del parámetro de disipación  $\epsilon = 1 - \alpha^2$ . Las cruces son los valores obtenidos a partir del ajuste lineal de los resultados de simulación en el volumen del sistema. La línea continua es la predicción de la aproximación de Navier-Stokes, ecuación (7.13).

parámetro de disipación hasta el orden de Burnett.

Se obtienen resultados similares cuando se consideran otros valores del coeficiente de restitución en el intervalo  $0.99 \leq \alpha < 1$ , que denominaremos «límite cuasielástico». En la figura 7.3 hemos representado los valores de simulación de  $\partial^2 T^* / \partial s^{*2}$ , junto con la correspondiente predicción teórica (7.13) con  $d = 2$  en función del parámetro de disipación  $\epsilon$ . Los valores de la simulación han sido obtenidos ajustando a una recta los valores numéricos de  $\partial T^* / \partial s^*$  en la región central del sistema, tal como se indica en la figura 7.2. Puede observarse que el acuerdo es excelente. En el rango de valores de  $\epsilon$  mostrados no se puede apreciar la dependencia de los coeficientes de transporte adimensionales  $\kappa^*$  y  $\mu^*$  con  $\alpha$ . Es decir, se obtiene la misma curva cuando se representa  $c(\alpha)$  considerando  $\kappa^*(\alpha) = \kappa^*(1) = 1$  y  $\mu^*(\alpha) = \mu^*(1) = 0$ .

Cuando nos salimos del límite cuasielástico, la aproximación de Navier-Stokes deja de ser válida. Al disminuir  $\alpha$  no sólo aumenta la anisotropía del tensor de presiones, sino que además la presión se vuelve inhomogénea en todo el sistema. Esta inhomogeneidad proviene de la componente  $P_{yy}$ , ya que  $P_{xx}$  se mantiene siempre uniforme, como se requiere de la conservación de la cantidad de movimiento, ecuación (7.7). A modo de ejemplo, en la figura 7.4 presentamos las componentes del tensor de presiones para  $\alpha = 0.95$ . También mostramos la derivada de la temperatura en la misma situación. Se puede observar una pequeña curvatura en la pendiente de la temperatura. Esta se hace más evidente a medida que disminuimos  $\alpha$ . Entonces los valores numéricos de la derivada

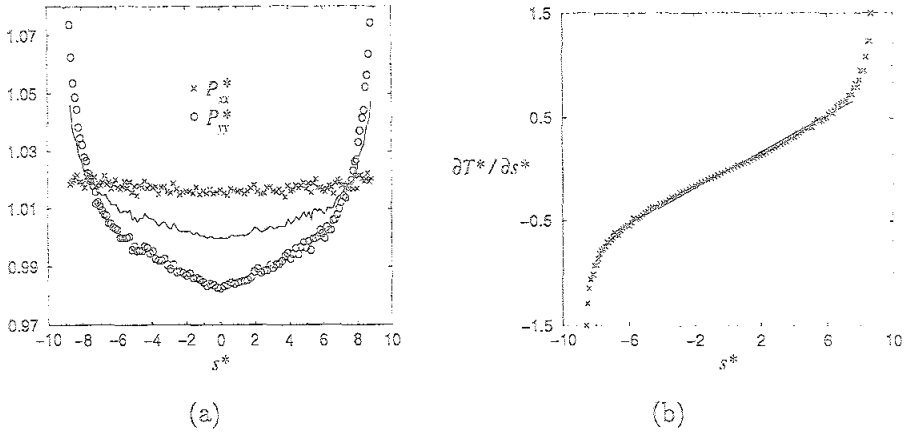


FIGURA 7.4: Lo mismo que la figura 7.2 pero para  $\alpha = 0.95$ .

segunda de la temperatura se desvían considerablemente de los predichos por la aproximación de Navier-Stokes.

En las figuras anteriores hemos representado los campos hidrodinámicos en función de la variable  $s^*$ . Esta ha sido obtenida evaluando numéricamente la integral en (7.4) a partir de los campos hidrodinámicos de la simulación. Por supuesto, también podemos comparar estos valores numéricos con la expresión teórica que obtuvimos en la aproximación de Navier-Stokes en el apartado anterior. En la figura 7.5 hemos representado  $s^*$  en función de  $x$  para un sistema con  $\alpha = 0.99$ . Los símbolos son el resultado de la simulación y la línea conti-

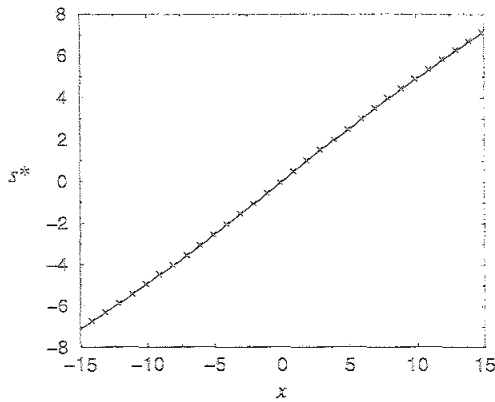


FIGURA 7.5: Variable adimensional  $s^*$  en función de la coordenada espacial  $x$  (en unidades de  $l_0$ ) para  $\alpha = 0.99$ . Los símbolos son el resultado de la simulación y la línea continua la predicción de la teoría, ecuación (7.23).

na los valores que se obtienen cuando se resuelve numéricamente la ecuación trascendente (7.23). El ajuste es excelente, incluso cerca de las paredes.

## 7.4 MÁS ALLÁ DE NAVIER-STOKES

En la sección anterior mostramos que la aproximación de Navier-Stokes ofrece una buena descripción del sistema en límite cuasielástico, esto es, para  $\alpha \geq 0.99$ . En esta sección presentaremos algunos resultados que también son válidos cuando el grado de disipación es mayor.

### 7.4.1 DEPENDENCIA DE LA TEMPERATURA DE LA PARED

En cualquier sistema físico, los resultados no deben depender de la escala temporal sobre la que se está midiendo. Si utilizando unas unidades la función de distribución de una partícula es  $f(x, v, t)$ , entonces, con otras unidades definidas a partir de las primeras por  $x' = x$ ,  $v' = v/\gamma$ ,  $t' = \gamma t$  (cambio de escala temporal) la función de distribución será  $f'(x', v', t')$ , que a su vez debe estar relacionada con la anterior por

$$f'(x', v', t') dx' dv' = f(x, v, t) dx dv, \quad (7.26)$$

pues ambas funciones describen el mismo sistema. Esta relación implica que  $f'(x', v', t') = \gamma^d f(x', \gamma v', t'/\gamma)$ . Matemáticamente esto es equivalente a afirmar que si  $f(x, v, t)$  es una solución de la ecuación cinética, entonces  $\gamma^d f(x, \gamma v, t/\gamma)$  también es solución de la misma ecuación.

La consecuencia de esto es que el estado estacionario de un medio granular entre dos paredes a la misma temperatura no depende de las temperaturas de las paredes. Es más, si las paredes están a las temperaturas  $T_{w1}$  y  $T_{w2}$  y la función de distribución del estado estacionario es  $f(x, v)$ , entonces la función de distribución de un sistema con temperaturas en las paredes  $\alpha T_{w1}$  y  $\alpha T_{w2}$  es

$$\alpha^{-d/2} f\left(x, \frac{v}{\alpha^{1/2}}\right), \quad (7.27)$$

pues esta solución verifica la ecuación cinética y las condiciones de contorno. De esta manera, la temperatura de las paredes básicamente nos define la unidad de tiempo. Un sistema sometido a una temperatura distinta está relacionado con el anterior por un cambio de escala. Desde luego, también se pueden aplicar razonamientos similares cuando se consideran otros tipos de paredes.

### 7.4.2 DEPENDENCIA DEL TAMAÑO DEL SISTEMA

En el apartado anterior hemos hecho uso de la invariancia temporal de la ecuación cinética en el estado estacionario. En este apartado aplicaremos el



mismo método dimensional a la escala espacial. Esto nos permitirá identificar la región del sistema que es «universal», es decir, independiente del tipo de pared considerado.

En primer lugar, definamos la densidad numérica reducida  $\rho$  como

$$\rho(x) = \frac{n(x)}{\langle n \rangle}. \quad (7.28)$$

En la figura 7.6 se muestra el perfil de densidad reducida para un sistema típico de tamaño  $L$  entre dos paredes a la misma temperatura. Al igual que en las simulaciones de Monte Carlo de la ecuación de Boltzmann, fijemos la unidad de longitud tomando como unidad el recorrido libre medio  $l_0$ , ecuación (4.9). Es de esperar que lejos de las paredes la función de distribución sea normal (al menos aproximadamente). Consideremos una región de tamaño  $L'$  dentro del volumen del sistema (esto es, fuera de las capas de Knudsen). De esta manera, podemos construir un sistema de longitud  $L'$  con los mismos perfiles (y función de distribución), aunque si queremos que el recorrido libre medio sea uno tenemos que hacer un cambio de unidades. En particular, la nueva coordenada espacial  $x'$  y la nueva densidad reducida  $\rho'$  serían

$$x' = x \frac{l_0}{L'} = x \frac{\langle n' \rangle}{\langle n \rangle}, \quad \rho'(x') = \rho(x) \frac{\langle n \rangle}{\langle n' \rangle}, \quad (7.29)$$

donde  $\langle n' \rangle = \frac{1}{L'} \int_{-L'/2}^{L'/2} dx n(x)$  es la densidad media de nuestro nuevo sistema. Podemos escribir estas ecuaciones sin mencionar explícitamente la densidad media de cada sistema, pues en realidad es arbitraria (véase la sección 4.4),

$$x' = x \frac{\rho(0)}{\rho'(0)}, \quad \rho'(x') = \rho(x) \frac{\rho'(0)}{\rho(0)}, \quad (7.30)$$

Desde luego, este sistema no tiene efectos de pared, es enteramente normal y, por tanto, correspondería a la solución de un problema cinético con unas condiciones de contorno muy particulares. Sin embargo, la solución normal debe ser única si sólo depende localmente de la densidad y la temperatura, pues el estado no depende ni de la densidad media  $\langle n \rangle$  ni de la temperatura de las paredes. Esto está de acuerdo con las ecuaciones hidrodinámicas discutidas en la sección anterior, ya que la solución está automáticamente determinada cuando se dan los valores de  $n$  y  $T$  en el centro del sistema (donde se anulan las primeras derivadas de los campos debido a la simetría). La consecuencia de ello es que la región de volumen de un sistema de tamaño  $L'$  con paredes «reales» debe estar relacionada con la de un sistema de longitud  $L$  a través de las ecuaciones (7.30). Ciertamente, si consideramos dos sistemas de tamaños  $L$  y  $L'$  y extraemos una región de volumen del mismo tamaño  $L''$  de ambos sistemas,

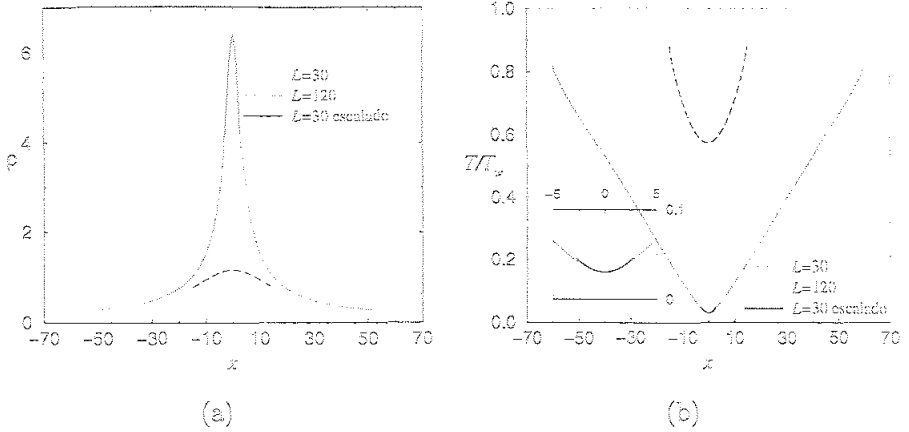


FIGURA 7.6: Escalamiento para dos sistemas de tamaños  $L = 30l_0$  y  $120l_0$  con  $\alpha = 0.99$ . La línea continua en (a) es el perfil de la densidad reducida del sistema con  $L = 30l_0$  transformada de acuerdo a  $\rho' = 5.5\rho$  y  $x' = x/5.5$ . La línea continua en (b) es el perfil de temperatura del mismo sistema dividida por un factor que coincide con el valor de  $T(0)$  del sistema con  $L = 120l_0$  y con el mismo cambio de escala  $x' = x/5.5$ .

como la solución normal es única y cada sistema está relacionado con el otro con una transformación del mismo tipo, la región normal común de ambos sistemas reales debe estar relacionado por las ecuaciones (7.30), a pesar de la presencia de efectos de pared.

Los datos de las simulaciones de Monte Carlo de la ecuación de Boltzmann admiten este escalamiento, como se muestra en la figura 7.6. Las líneas de puntos y las líneas discontinuas corresponden a los perfiles de densidad reducida y de temperatura de un sistema de tamaño  $L = 30l_0$  y  $L = 120l_0$ , respectivamente. Las líneas continuas son los perfiles del sistema  $L = 30l_0$  transformados de acuerdo a las ecuaciones (7.30).

De esta manera, al aumentar el tamaño del sistema aumentamos también la región del espacio donde la solución es normal. Como esta solución es única, esto nos permite visualizar su comportamiento para distancias más grandes.

### 7.4.3 IDENTIFICACIÓN DE LA REGIÓN NORMAL

Es importante destacar que el escalamiento analizado en el apartado anterior sólo es válido, en principio, para un gas diluido, pues se basa en el hecho de que el problema ya está definido cuando se fija el coeficiente de restitución y la cantidad  $L/l_0$ . En sistemas en los que son importantes los efectos de volumen excluido hay que fijar también la densidad (o el tamaño de las partículas). Sin

embargo, este escalamiento nos va a permitir identificar la región de volumen del sistema. En concreto, vamos a comprobar que ésta existe, a pesar de que no sean válidas las ecuaciones hidrodinámicas en el orden de Navier-Stokes. Este es un resultado relevante, y el hecho de que no sea posible aplicar el mismo método a gases densos no significa que no sea cierto.

En los resultados de simulación que presentaremos a continuación algunas veces se mostraran los perfiles de un gas granular confinado entre una pared térmica en  $x = -L/2$  y una pared reflectante en  $x = 0$ . En lo que concierne al estado estacionario, este sistema es equivalente al de las dos paredes térmicas, aunque más conveniente para evitar las fluctuaciones del máximo de densidad (véase el último párrafo del apartado 7.2), el cual siempre debería estar localizado en  $x = 0$ . Aunque el tamaño real del sistema en este caso es  $L/2$ , nos referiremos a él como  $L$  para evitar confusiones. Los sistemas de este tipo son fáciles de identificar en las figuras, ya que el dominio de los perfiles mostrados varía entre  $x = -L/2$  y  $x = 0$ , mientras que los de las dos paredes térmicas lo hacen entre  $x = -L/2$  y  $x = L/2$ .

Al principio llevamos a cabo simulaciones con celdas cuadradas del mismo tamaño. En sistemas con un grado de disipación considerable se observó que el perfil de la componente  $P_{xx}$  del tensor de presiones no era uniforme, sobre todo cerca de  $x = 0$ . Esto no tiene sentido físico, ya que no se detectaban flujos convectivos en el sistema. El problema radica en que si  $\alpha$  es suficientemente pequeño se forman regiones (cerca de las paredes térmicas) con muy poca densidad, concentrándose la mayoría de las partículas en  $x = 0$ . En el método DSMC el tamaño de las celdas debe ser suficientemente pequeño para poder obtener una buena aproximación (independiente del tamaño de las celdas) de la ecuación de Boltzmann. La primera solución consiste en disminuir el tamaño de las celdas, incrementando, por tanto, el número de celdas requerido. Sin embargo, el número de celdas necesitadas era muy grande y el tiempo de computación hubiera sido prohibitivo, lo cual a su vez es innecesario, pues hay regiones donde no hace falta considerar celdas tan pequeñas (donde la densidad es muy baja). Nosotros hemos utilizado un algoritmo con celdas cuadradas de tamaño variable. Determinamos el tamaño de las celdas a partir del perfil de densidad de una simulación de prueba de baja estadística, de forma que la longitud de las celdas era siempre mucho menor que el recorrido libre medio local correspondiente en el estado estacionario. También verificamos que los perfiles no dependían del tamaño de las celdas y que las fluctuaciones de  $P_{xx}$  eran del orden del ruido estadístico de la simulación (de los otros perfiles hidrodinámicos). En las simulaciones que se muestran en esta sección se ha considerado típicamente un gas de  $N = 2 \times 10^5$  discos duros.

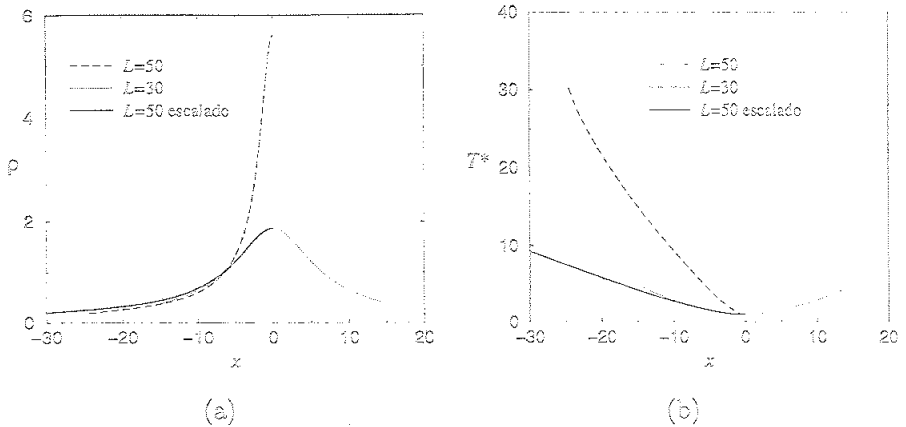


FIGURA 7.7: Escalamiento para dos sistemas de tamaños  $L = 30l_0$  y  $50l_0$  con  $\alpha = 0.95$ . (a) Perfiles de densidad reducida. La línea continua es el perfil del sistema con  $L = 50l_0$  (en realidad con un tamaño  $L/2 = 25l_0$ ) transformada de acuerdo a  $\rho' = \rho/2.998$  y  $x' = 2.998x$ . (b) Perfiles de temperatura  $T^*$ . La línea continua corresponde al sistema con  $L = 50l_0$  y ha sido escalada por la misma transformación  $x' = 2.998x$ .

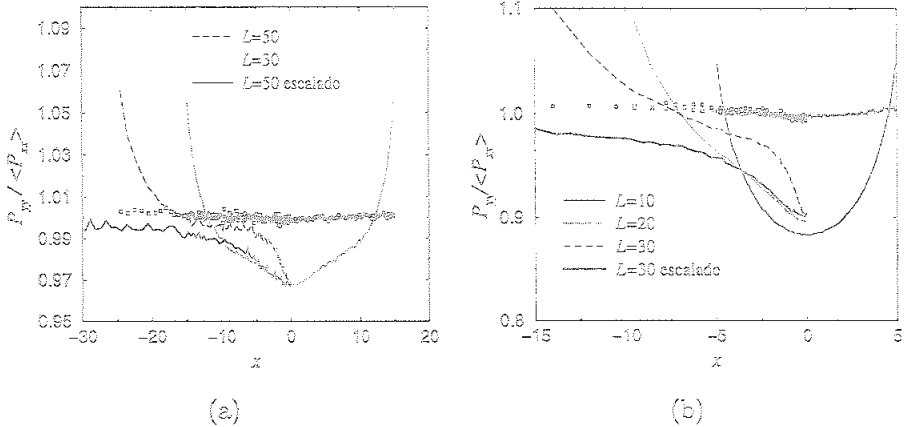


FIGURA 7.8: Perfiles de las componentes diagonales del tensor de presiones:  $P_{yy}$  (líneas) y  $P_{zz}$  (símbolos). Todos los perfiles son reducidos por  $\langle P_{zz} \rangle$ . (a) Escalamiento para dos sistemas de tamaños  $L = 30l_0$  y  $50l_0$  con  $\alpha = 0.95$ . La línea continua es el resultado de la misma transformación utilizada en la figura 7.7. (b) Perfiles correspondientes a varios sistemas con el mismo coeficiente de restitución  $\alpha = 0.8$ . El sistema con  $L = 10l_0$  (línea continua delgada) no admite escalamiento alguno, mientras que la línea continua gruesa muestra el escalamiento entre  $L = 20l_0$  y  $L = 30l_0$  con  $x' = 3.15x$ .

Para poder identificar la región normal de un sistema de longitud  $L_1$  basta con realizar una simulación de un sistema de mayor tamaño  $L_2$ . Seguidamente se mide la razón entre las densidades reducidas (7.28) de ambos sistemas en  $x = 0$  y se escalan los perfiles del sistema grande de acuerdo con la transformación (7.30). La región de volumen del sistema de tamaño  $L_1$  viene entonces definida por el lugar geométrico donde se superponen los perfiles de este sistema con los transformados del grande.

En las figuras 7.7 y 7.8 (a) verificamos este escalamiento para dos sistemas con  $\alpha = 0.95$  y tamaños  $L = 30l_0$  y  $50l_0$ . Las líneas de puntos corresponden a  $L = 30l_0$ , mientras que las discontinuas lo hacen a  $L = 50l_0$  (realmente un sistema de tamaño  $L/2 = 25l_0$ ). Hemos escalado el sistema con  $L = 50l_0$  con la transformación  $\rho' = \rho/2.998$  y  $x' = 2.998x$ . El mismo escalamiento se muestra en la figura 7.8 (a) para el cociente de las componentes diagonales del tensor de presiones  $P_{yy}/P_{xx}$ . En la figura 7.8 (b) se presenta el escalamiento para dos sistemas de tamaños  $L = 20l_0, 30l_0$  y  $\alpha = 0.8$ . La pequeña discrepancia del valor de  $P_{yy}/P_{xx}$  en  $x = 0$  está dentro de las barras de error de  $P_{xx}$  (cruces), el cual debe ser uniforme.

En estas simulaciones el tamaño de las capas de Knudsen es del orden de  $5l_0$  partiendo de las paredes térmicas. Por consiguiente, un sistema de tamaño  $L = 10l_0$  debe estar completamente dominado por efectos de pared. Esto es lo que se observa en la figura 7.8 (b), donde la razón  $P_{yy}/P_{xx}$  en  $x = 0$  no coincide con el correspondiente valor de sistemas más grandes. El escalamiento de las ecuaciones (7.30) no se aplica en sistemas tan pequeños.

En la figura 7.9 comparamos un sistema confinado entre dos paredes a distintas temperaturas,  $T_{w2} = 2T_{w1}$ , con otro entre dos paredes a la misma temperatura y con los mismos parámetros  $\alpha = 0.99$  y  $L = 60l_0$ . Puede comprobarse que todos los perfiles se superponen en la región de volumen común. Esto confirma la existencia de una solución normal única.

#### 7.4.4 ECUACIONES HIDRODINÁMICAS

Una vez que hemos comprobado que existe una región del espacio en la que la función de distribución es normal, cabe preguntarse por las ecuaciones hidrodinámicas que rigen el comportamiento de las variables hidrodinámicas  $n$  y  $T$  en esa región. En la sección anterior vimos que las ecuaciones de Navier-Stokes sólo se verificaban en el límite cuasielástico (y aún en este límite no eran capaces de describir la anisotropía del tensor de presiones). Necesitamos una teoría que siga siendo aplicable cuando los gradientes son mayores. En este sentido, es conveniente que los gradientes de los campos vengán expresados en términos de  $s^*$ , ya que esta variable adimensional es invariante ante los escalamientos que

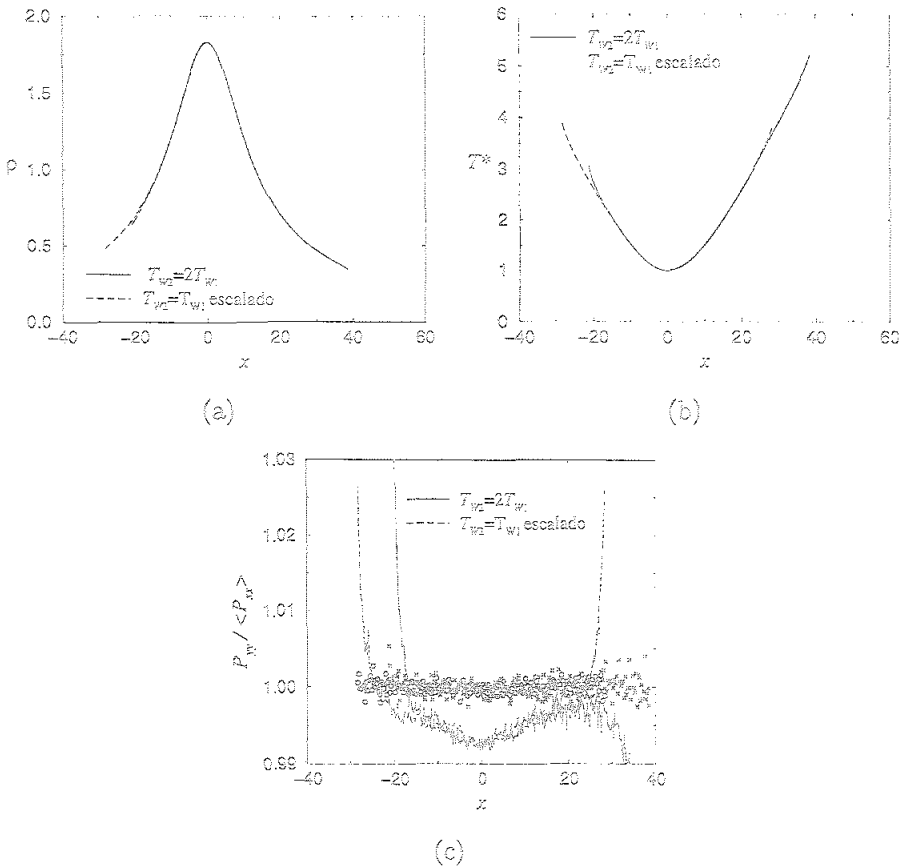


FIGURA 7.9: Identificación de la región normal de un sistema con  $\alpha = 0.99$  y  $L = 60 l_0$  entre dos paredes con temperaturas distintas. La pared de la derecha se encuentra a una temperatura que es el doble de la de la izquierda. La coordenada  $x$  ha sido trasladada para que el máximo de la densidad se localice en  $x = 0$ . Las líneas discontinuas corresponden a un sistema con los mismos parámetros pero entre dos paredes a la misma temperatura, escaladas de acuerdo a la transformación  $\rho' = \rho 1.053$ ,  $x' = x/1.053$ .

hemos utilizado a lo largo de esta sección. En la referencia [61] propusimos las siguientes ecuaciones hidrodinámicas para describir este estado

$$\frac{\partial P_{xx}^*}{\partial s^*} = 0, \quad (7.31)$$

$$P_{ij}^* = p^* \delta_{ij} \left[ 1 - (1 - d\delta_{ix})e(\alpha) + (1 - d\delta_{ix}) \frac{b(\alpha)}{(d-1)T^*} \left( \frac{\partial T^*}{\partial s^*} \right)^2 \right], \quad (7.32)$$

$$\frac{\partial p^*}{\partial s^*} = b(\alpha) p^* \frac{\partial}{\partial s^*} \left[ \frac{1}{T^*} \left( \frac{\partial T^*}{\partial s^*} \right)^2 \right], \quad (7.33)$$

$$\frac{\partial^2 T^*}{\partial s^{*2}} = c(\alpha) + h(\alpha) \frac{1}{T^*} \left( \frac{\partial T^*}{\partial s^*} \right)^2, \quad (7.34)$$

donde  $P_{ij}^* = P_{ij}/p_0$ . La ecuación (7.31) es exacta, mientras que (7.33) se puede deducir de las ecuaciones (7.31)–(7.32) teniendo en cuenta que  $p = (\sum_i P_{ii})/d$  y despreciando consistentemente los gradientes de orden superior al considerado.

Estas ecuaciones ha sido deducidas utilizando el método de Chapman-Enskog a partir del modelo cinético presentado en la sección 3.5. Las ecuaciones (7.33) y (7.34) determinan el perfil de presión y temperatura una vez que se completan con las condiciones iniciales:  $T^*(0) = 1$ ,  $\partial T^*/\partial s^*(0) = 0$  y  $p^*(0) = 1$ . Podemos conectar estas variables adimensionales con las reales utilizando las ecuaciones (7.16)–(7.18) (aunque estaríamos suponiendo que la solución normal se extiende sobre todo el espacio, despreciando los efectos de pared).

La ecuaciones (7.31)–(7.34) también son aplicables para la ecuación de Boltzmann, aunque la dependencia del coeficiente de restitución de las cantidades que allí aparecen puede llegar a ser muy diferente, como se discutirá en el apartado 7.4.5. Nosotros hemos calculado los valores numéricos de los coeficiente  $b(\alpha)$  y  $e(\alpha)$  a partir de la simulación de la ecuación de Boltzmann. Los coeficientes  $c(\alpha)$  y  $h(\alpha)$  son muy difíciles de medir ya que involucran una derivada segunda.

A partir de la ecuación (7.32), despreciando órdenes superiores en los gradientes, se obtiene

$$\frac{P_{xx}^*}{P_{yy}^*} = 1 + de(\alpha) - \frac{db(\alpha)}{(d-1)T^*} \left( \frac{\partial T^*}{\partial s^*} \right)^2. \quad (7.35)$$

En la figura 7.10 (a) hemos representado  $P_{xx}/P_{yy}$  en función de  $(\partial T^*/\partial s^*)^2/T^*$  para  $\alpha = 0.8$  y  $L = 20l_0$ . Sólo se han tenido en cuenta los valores dentro de la región normal (identificada utilizando el método gráfico descrito en el apartado anterior). Se puede comprobar que el perfil es muy aproximadamente lineal, tal como predice la ecuación (7.35). A partir de un ajuste de regresión lineal

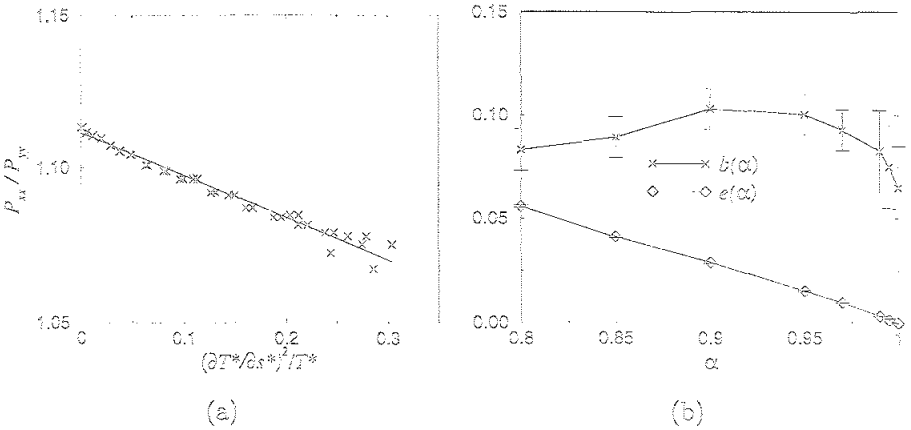


FIGURA 7.10: (a) Cociente de las componentes normales del tensor de presiones  $P_{xx}/P_{yy}$  (símbolos) en función de  $T^{*-1}(\delta T^*/\delta s^*)^2$  para  $\alpha = 0.8$  y  $L = 25l_0$ . La línea continua es un ajuste lineal utilizado para medir  $e$  y  $b$ . (b) Los coeficientes  $e(\alpha)$  (rombos) y  $b(\alpha)$  (cruces) para un gas diluido de discos duros inelásticos.

determinamos los valores de  $e$  y  $b$  correspondientes a este valor del coeficiente de restitución. Repitiendo este procedimiento obtuvimos la dependencia con  $\alpha$  de estos coeficientes, que se muestra en la figura 7.10 (b).

Consideremos el límite  $s^* \rightarrow \infty$  en las ecuaciones hidrodinámicas propuestas. En este límite pueden suceder dos cosas: o bien  $(\delta T^*/\delta s^*)^2/T^*$  tiende a infinito, o bien tiende a un valor finito o nulo (excluyendo la posibilidad de que no exista el límite, que no consideraremos). En el primer caso podemos despreciar  $c(\alpha)$  frente al segundo sumando del segundo miembro en la ecuación (7.34), quedando  $\delta^2 T^*/\delta s^{*2} \sim h(\delta T^*/\delta s^*)^2/T^*$ . La solución de esta ecuación en el límite que nos interesa es  $T^* \sim C|s^*|^{1-\alpha}$ , donde  $C$  es una constante de integración. Este resultado contradice la hipótesis de partida, ya que la derivada segunda de  $T^*$  tendería a cero cuando  $s^* \rightarrow \infty$ . Luego necesariamente  $(\delta T^*/\delta s^*)^2/T^*$  debe tender a una constante. Entonces, a partir de la ecuación (7.33) se deduce que la presión tiende a ser uniforme para valores grandes de  $s^*$ ,

$$\frac{\delta p^*}{\delta s^*} = 0 \quad (|s^*| \rightarrow \infty). \tag{7.36}$$

Además, resolviendo consistentemente este límite se encuentra que

$$\frac{\delta^2 T^*}{\delta s^{*2}} = \frac{c(\alpha)}{1 - 2h(\alpha)} \quad (|s^*| \rightarrow \infty), \tag{7.37}$$

resultado que coincide, salvo el valor de la constante, con la predicción de Navier-Stokes. Analizaremos con más detalle este límite en la sección 7.5.



## 7.4.5 SOBRE LA CURVATURA DE LA PRESIÓN

La discrepancia más significativa de los resultados de simulación con las predicciones del modelo cinético considerado radica en la curvatura del perfil de presión. A partir del modelo se obtiene que  $b(\alpha) < 0$  (véase la referencia [61]), pero en las simulaciones de la ecuación de Boltzmann que hemos realizado  $b(\alpha)$  siempre es positivo. Esta divergencia también parece estar presente en el caso límite de  $\alpha = 1$ . En este límite, el modelo cinético predice  $b(1) = 0$ , lo que a su vez está de acuerdo con la solución normal encontrada para el modelo BGK [125], que describe un gas elástico en presencia de un gradiente de temperatura y con una presión uniforme. De hecho, también se conoce una solución analítica de la ecuación de Boltzmann (elástica) para un gas de moléculas de Maxwell (es decir, con un potencial de interacción que decae como la quinta potencia de su separación) en el mismo estado estacionario con presión constante [126]. Sin embargo, no hay garantía de que suceda lo mismo con esferas duras. En la figura 7.11 presentamos los resultados de simulación de un gas de discos duros con  $\alpha = 1$  en presencia de un flujo de calor estacionario ( $T_{w2} = 500 T_{w1}$ ). En este caso se ha escalado la temperatura adimensional  $T^*$  y la variable  $s^*$  con el valor de la temperatura de la pared izquierda  $T_{w1}$ . Aunque el gradiente de temperatura en función de la variable  $s^*$  es constante en la región de volumen del sistema, la componente  $P_{yy}$  del tensor de presiones no es uniforme en ningún punto. De hecho, se puede calcular el valor de  $b(1)$  por el mismo procedimiento

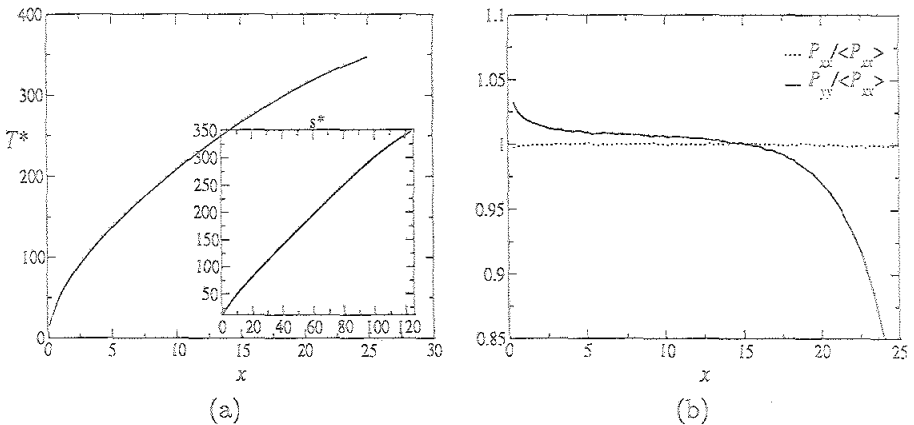


FIGURA 7.11: Gas elástico entre dos paredes a distintas temperaturas  $T_{w2} = 500 T_{w1}$  y separadas por una distancia  $L = 25 l_0$ . (a) Perfil de temperatura en función de  $x$  y  $s^*$ . (b) Componentes diagonales del tensor de presiones escaladas con  $\langle P_{xx} \rangle$ :  $P_{yy}$  (línea continua) y  $P_{xx}$  (línea discontinua).

que utilizamos en el apartado anterior para gases inelásticos. Este valor coincide con la tendencia de los demás puntos con  $\alpha < 1$ , tal como se muestra en la figura 7.10 (b).

## 7.5 ESTADO DE FOURIER

En las secciones anteriores hemos visto que si el gas es suficientemente denso o el tamaño del sistema es suficientemente grande, existe una región del espacio (formalmente correspondiente a  $|s^*| \rightarrow \infty$ ) en el que el estado estacionario viene caracterizado por presión constante y un perfil de temperatura lineal. Este estado ha sido observado previamente en simulaciones DSMC y de Dinámica Molecular. En esta sección mostraremos que la ecuación de Boltzmann admite una solución de este tipo. También discutiremos algunas propiedades de esta solución. En particular, estableceremos la validez de la ley de Fourier para un gradiente arbitrario de temperatura.

### 7.5.1 SOLUCIÓN NORMAL DE LA ECUACIÓN DE BOLTZMANN

Vamos a buscar una solución de la ecuación de Boltzmann (3.29) que verifique las siguientes condiciones: que sea estacionaria; que no haya velocidad macroscópica; que sólo existan gradientes en la dirección del eje  $x$  y que escale como

$$f(x, \mathbf{v}) = n(x) \left[ \frac{m}{2k_B T(x)} \right]^{d/2} \varphi(\mathbf{c}), \quad \mathbf{c} = \left[ \frac{m}{2k_B T(x)} \right]^{1/2} \mathbf{v}. \quad (7.38)$$

Este escalamiento es similar al que discutimos en el capítulo 5 para describir el estado de enfriamiento homogéneo, aunque en este contexto ha sido propuesto por vez primera en la referencia [122] a partir de los resultados de simulaciones de Dinámica Molecular en este estado estacionario.

Debido a las definiciones de los campos hidrodinámicos (3.24)–(3.26), la función  $\varphi$  introducida en la ecuación (7.38) debe verificar las condiciones

$$\int d\mathbf{c} \varphi(\mathbf{c}) = 1, \quad \int d\mathbf{c} \mathbf{c} \varphi(\mathbf{c}) = 0, \quad \int d\mathbf{c} \mathbf{c}^2 \varphi(\mathbf{c}) = \frac{d}{2}. \quad (7.39)$$

Consideremos ahora las ecuaciones de balance (3.34)–(3.36). En el estado estacionario en cuestión, la ecuación (3.34) se vuelve la identidad, mientras que la ecuación (3.35) junto con (7.38) implican que el tensor de presiones es uniforme. Finalmente, a partir de la ecuación de balance de la energía (3.36),

se obtiene

$$\frac{\partial T}{\partial x} \int dc c^2 c_x \varphi(c) = -(1 - \alpha^2) \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma^{d-1} p}{2k_B \Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right)} \int dc_1 \int dc_2 |c_1 - c_2|^3 \varphi(c_1) \varphi(c_2). \quad (7.40)$$

Como el segundo miembro de esta ecuación no depende de  $x$ , necesariamente

$$\frac{\partial T}{\partial x} = a = \text{constante}, \quad (7.41)$$

y, por tanto, el perfil de temperatura debe ser lineal en  $x$ . La ecuación (7.40) también establece una relación entre el gradiente de temperatura y la presión que puede ser expresada en la forma

$$\frac{ak_B}{p\sigma^{d-1}} = W[\varphi] \equiv -\frac{(1 - \alpha^2) \pi^{\frac{d-1}{2}} \int dc_1 \int dc_2 |c_1 - c_2|^3 \varphi(c_1) \varphi(c_2)}{2\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right) \int dc c^2 c_x \varphi(c)}. \quad (7.42)$$

Haciendo uso del escalamiento (7.38) y de (7.42) en la ecuación de Boltzmann (3.29) se obtiene

$$-W[\varphi] \left[ \left(1 + \frac{d}{2}\right) c_x \varphi(c) + \frac{1}{2} c_x c \cdot \frac{\partial}{\partial c} \varphi(c) \right] = I[c|\varphi], \quad (7.43)$$

donde el término de colisión  $I$  tiene la forma

$$I[c_1|\varphi] = \int dc_2 \int_{c_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (c_{12} \cdot \hat{\sigma}) \left( \frac{1}{\alpha^2} b^{-1} - 1 \right) \varphi(c_1) \varphi(c_2), \quad (7.44)$$

siendo  $c_{12} = c_1 - c_2$ . La estructura de esta ecuación es consistente con nuestra hipótesis de existencia de una solución de la ecuación de Boltzmann de la forma (7.38). Una vez que se resuelve, se obtiene  $\varphi$ , y de aquí  $W[\varphi]$ , que depende solamente del coeficiente de restitución  $\alpha$ . De esta manera, la ecuación (7.42) implica que la presión y el gradiente de temperatura no pueden tomar valores arbitrarios en el estado estacionario. La razón entre ambas cantidades viene determinada por el grado de inelasticidad en las colisiones. Este acoplamiento entre el gradiente de una variable hidrodinámica y el valor de otra variable (uniforme) es característico de los gases granulares. Se ha encontrado un comportamiento similar en sistemas sometidos a un flujo tangencial [127, 128].

### 7.5.2 LEY DE FOURIER PARA UN GRADIENTE ARBITRARIO

A partir de consideraciones de simetría, la función de distribución debe ser una función par de las componentes de la velocidad perpendiculares a la dirección  $x$ . Por consiguiente, no puede haber flujo de calor en una dirección

perpendicular al gradiente de temperatura. Por otro lado, la componente del flujo de calor en la dirección  $x$  es

$$q_x(x) = \left( \frac{2k_B T(x)}{m} \right)^{1/2} p \int dc c^2 c_x \varphi(c). \quad (7.45)$$

Teniendo en cuenta la ecuación (7.42) se llega a que este flujo es proporcional al gradiente de temperatura  $\alpha$ , esto es, se puede escribir como

$$q_x = -\Phi(\alpha) \kappa_0 \alpha, \quad (7.46)$$

donde  $\Phi$  es una función desconocida del coeficiente de restitución y  $\kappa_0$  es la conductividad térmica de Boltzmann, que viene dada por la ecuación (5.34). De esta manera, hemos obtenido que el flujo de calor está linealmente acoplado con el gradiente de temperatura, independientemente de lo grande que éste sea. Podemos utilizar la aproximación de Navier-Stokes para obtener una expresión para la constante de proporcionalidad, con el resultado

$$\Phi(\alpha) \approx \kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha). \quad (7.47)$$

Merece la pena mencionar que en la solución analítica de la ecuación de Boltzmann (elástica) para moléculas de Maxwell presentada en la referencia [126] también se verifica la ley de Fourier para un gradiente de temperatura arbitrario.

### 7.5.3 LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN MARGINAL

No hay razón para esperar que la función de distribución en el estado estacionario tenga una dependencia sencilla con el gradiente de temperatura. Sin embargo, podemos utilizar la expresión que encontramos en el apéndice C mediante el método de Chapman-Enskog para la función de distribución en el primer orden en los gradientes. Nos concentraremos en la distribución de velocidades marginal

$$\varphi_x(c_x) = \int dc_{\perp} \varphi(c). \quad (7.48)$$

El símbolo  $\langle \perp \rangle$  denota integración sobre las  $(d-1)$  componentes de  $c$  perpendiculares al eje  $x$ . A partir de la ecuación (C.61) se obtiene

$$\varphi_x(c_x) \approx \frac{e^{-c_x^2}}{\pi^{1/2}} \left\{ 1 - \left[ \frac{4d^2 \zeta^*(\kappa^* - \mu^*)}{(d+2)(d-1)} \right]^{1/2} \left( c_x^2 - \frac{3}{2} \right) c_x \right\}. \quad (7.49)$$

Al calcular esta expresión hemos supuesto, sin pérdida de generalidad, que  $\partial T / \partial x = \alpha > 0$ . En caso contrario debe cambiarse  $c_x$  por  $-c_x$ . El factor

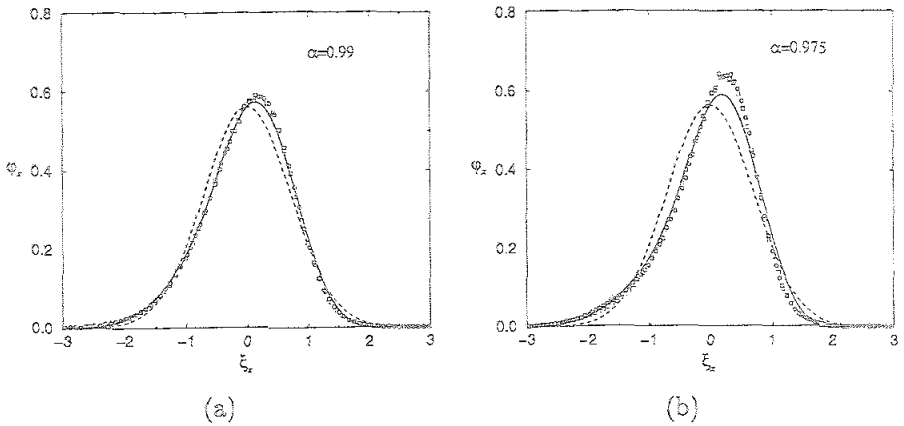


FIGURA 7.12: Distribución marginal de velocidades en la dirección del gradiente de temperatura para  $\alpha = 0.99$  (a) y  $\alpha = 0.975$  (b) en un sistema vibrado bidimensional. La línea continua es la predicción teórica dada por la ecuación (7.49). Los símbolos son el resultado de la simulación, que corresponden a dos posiciones distintas (cuadrados y círculos) en la región de volumen. La línea de puntos es la gaussiana, representada a modo de referencia.

$\alpha k_B / p\sigma^{d-1}$  ha sido eliminado utilizando la ecuación de Navier-Stokes para la temperatura. En principio, la ecuación (7.49) sólo es aplicable en el límite de gradientes pequeños, que en el estado que estamos considerando es equivalente a poca disipación. Además, como estamos utilizando una expresión obtenida con el método de Chapman-Enskog en la primera aproximación de Sonine (ver apéndice C), la ecuación (7.49) sólo es válida para valores de  $|c_x|$  del orden de la unidad (rango de velocidades térmicas).

En la figura 7.12 comparamos la ecuación (7.49) con los resultados numéricos obtenidos a partir de simulaciones de Monte Carlo de la ecuación de Boltzmann de un sistema vibrado <sup>4</sup> con  $d = 2$ . Se han representado los datos correspondientes a dos posiciones distintas en la región de volumen del sistema (círculos y cuadrados). La diferencia relativa de las temperaturas en ambas posiciones es del 30%. Los dos tipos de símbolos se superponen en la gráfica, consistentemente con el escalamiento (7.38). Como era de esperar, se observa un buen acuerdo con la ecuación (7.49) para velocidades pequeñas y baja disipación (en el límite cuasielástico), empeorando cuando se disminuye  $\alpha$ .

Es posible obtener alguna información sobre la forma asintótica de la solu-

<sup>4</sup>En este sistema, en vez de una pared térmica, se intenta modelar una pared vibrante. Cada vez que una partícula colisiona con la pared vibrante en  $x = L/2$  con una velocidad  $\mathbf{v}$  ( $v_x > 0$ ) es devuelta al sistema con una velocidad  $\mathbf{v}'$  dada por  $v'_x = -(v_x + 2v_w)$  y  $v'_y = v_y$ , siendo  $v_w > 0$  la velocidad característica de la pared.

ción de la ecuación de Boltzmann para velocidades grandes utilizando el mismo método que empleamos en el apartado 5.2.2 para el HCS. A partir de la ecuación (7.43)

$$-W[\varphi] \left( \frac{3}{2} c_x + \frac{1}{2} c_x^2 \frac{\partial}{\partial c_x} \right) \varphi_x(c_x) = I_x^+[c_x|\varphi] - I_x^-[c_x|\varphi], \quad (7.50)$$

donde  $I_x^+[c_x|\varphi]$  y  $I_x^-[c_x|\varphi]$  denotan las contribuciones de los términos de ganancia y de pérdida del operador de colisión de Boltzmann, respectivamente, es decir,

$$I_x^-[c_{1x}|\varphi] = \int dc_{1\perp} \int dc_2 \int_{c_{12} \cdot \hat{c} > 0} d\hat{c} (c_{12} \cdot \hat{c}) \varphi(c_1) \varphi(c_2), \quad (7.51)$$

y análogamente para  $I_x^+[c_x|\varphi]$ . De nuevo, vamos a suponer que  $\alpha > 0$ , de forma que las partículas que llegan a una posición dada con  $c_x > 0$  provienen de regiones más frías. Por tanto, las partículas con una velocidad  $c_x \gg 1$  en una localización dada han adquirido su velocidad principalmente como consecuencia de las colisiones con otras partículas en la misma región. Por otro lado, las partículas con  $|c_x| \gg 1$  pero  $c_x < 0$  pueden venir de regiones de mayor temperatura y la probabilidad de que su velocidad haya sido generada por efecto de las colisiones en esa misma localización es pequeña. Para estas partículas el término de ganancia es despreciable frente al de pérdida. La contribución dominante de la integral de colisión corresponden a colisiones donde la velocidad de la partícula 2 se encuentra típicamente en la región térmica ( $c_2 \sim 1$ ), de manera que podemos reemplazar  $|c_{12}|$  por  $|c_1|$ . Podemos aplicar el mismo tipo de razonamiento a la integral sobre la componente normal  $c_{1\perp}$ , de forma que podemos reemplazar  $|c_1|$  por  $|c_{1x}|$ . De esta manera, la ecuación (7.51) puede ser aproximada como

$$I_x^-[c_{1x}|\varphi] \sim \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} |c_x| \varphi_x(c_x) \quad (|c_x| \rightarrow \infty). \quad (7.52)$$

Esto nos permite escribir la ecuación de Boltzmann (7.50) para la función de distribución marginal  $\varphi_x$  como

$$-W[\varphi] \left( \frac{3}{2} c_x + \frac{1}{2} c_x^2 \frac{\partial}{\partial c_x} \right) \varphi_x(c_x) \sim \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} c_x \varphi_x(c_x). \quad (7.53)$$

La solución de esta ecuación tiene la forma

$$\varphi_x(c_x) \sim \mathcal{A} |c_x|^{-r(\alpha)} \quad (c_x \rightarrow -\infty), \quad (7.54)$$

donde  $A$  es una constante de integración indeterminada y

$$r(\alpha) = \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2}) W} + 3. \quad (7.55)$$

Nótese que para  $a > 0$  se tiene  $W > 0$ . En la aproximación de Navier-Stokes se obtiene

$$W \approx \left[ \frac{32(d-1)\pi^{d-1}(1-\alpha^2)}{d(d+2)^2 \Gamma(\frac{d}{2})^2 (\kappa^* - \mu^*)} \right]^{1/2}. \quad (7.56)$$

De esta manera, hemos obtenido que la cola de alta velocidad de la función de distribución marginal en la dirección opuesta al incremento de la temperatura es algebraica. Existe pues una superpoblación de partículas cuando se compara con la distribución gaussiana, lo que parece ser una característica bastante general de los sistemas de partículas con interacciones disipativas.

Podría argumentarse que el decaimiento algebraico es un artificio resultante de las aproximaciones que hemos tomado en el análisis asintótico (que por otra parte son los mismos que nos llevaron a describir con éxito las colas de alta velocidad en el HCS). Sin embargo, un análisis detallado de los pasos que nos han llevado hasta la ecuación (7.54) muestra que este representa en cualquier caso el decaimiento más rápido posible de la función de distribución marginal en el límite  $c_x \rightarrow -\infty$ . El decaimiento algebraico es compatible con la existencia de los primeros momentos de la función de distribución de velocidades, ya que el exponente de la ley algebraica es mayor que tres, siendo de esperar que crezca rápidamente cuando  $\alpha$  se aproxima a uno (ver ecuación (7.56)). Para la cola de la velocidad en la dirección del gradiente de temperatura,  $c_x \gg 1$ , la parte dominante de la integral de colisión es el término de ganancia  $I_x^+$ , y, por tanto, no se puede aplicar el mismo razonamiento para estudiar su comportamiento asintótico.

## CAPÍTULO 8

# CONCLUSIONES

A lo largo de esta tesis hemos analizado diversos aspectos de la teoría cinética y la hidrodinámica de los flujos granulares diluidos, utilizando como punto de partida un modelo sencillo en el que se considera un sistema constituido por esferas duras inelásticas. A continuación resumimos algunos de los aspectos y consecuencias más relevantes de esta tesis:

1. A partir de la dinámica de las colisiones se ha construido la ecuación de Liouville. Esta es una ecuación exacta que gobierna la evolución temporal de la función de distribución de  $N$  partículas del sistema. Bajo las mismas condiciones que en el caso de colisiones elásticas se obtiene la ecuación de Boltzmann inelástica. Esta ecuación representa un punto de partida adecuado para el estudio de los gases granulares.
2. Se ha estudiado el estado más sencillo que puede presentar un medio granular que evoluciona libremente, el denominado estado de enfriamiento homogéneo. En particular, se ha analizado la forma de la función de distribución, caracterizada por sus primeros momentos y por su comportamiento asintótico en el límite de grandes velocidades. También se ha estudiado la evolución temporal de la temperatura. En todos los casos se han comparado los resultados analíticos con soluciones numéricas de la ecuación de Boltzmann, obteniéndose un acuerdo excelente.
3. Utilizando una generalización del método de Chapman-Enskog se han deducido las ecuaciones hidrodinámicas hasta el segundo orden en los gradientes, tanto para esferas como discos duros, con expresiones explícitas para los coeficientes de transporte que aparecen en ella.
4. A fin de validar la existencia de una descripción hidrodinámica para sistemas granulares, se han comparado numéricamente las predicciones de



- las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas alrededor del estado de enfriamiento homogéneo con soluciones numéricas de la ecuación de Boltzmann. La comparación es satisfactoria sobre un amplio rango de valores de la inelasticidad.
5. Se ha analizado la estabilidad del estado de enfriamiento homogéneo utilizando la descripción hidrodinámica, poniendo de manifiesto el origen hidrodinámico de la formación de agregados de partículas, observada tanto en simulaciones de Dinámica Molecular como en experimentos. Además, un análisis no lineal de los modos ha permitido identificar el acoplo no lineal de la vorticidad como el mecanismo dominante en la formación de dichos agregados, contrariamente a lo mantenido por ciertos autores hasta la fecha.
  6. También se ha estudiado el problema de la autodifusión, que por su sencillez proporciona un contexto ideal para la verificación de hipótesis. Nuevamente, los resultados teóricos obtenidos a partir de la ecuación de Boltzmann-Lorentz han sido consistentes con los resultados numéricos. Además, en este caso ambos han sido a su vez validados comparándolos con resultados obtenidos mediante Dinámica Molecular. Hay que señalar que el análisis se ha llevado a cabo tanto en términos de la función de distribución de una partícula como con la función de correlación de velocidades de dos tiempos.
  7. Como ejemplo de estado estacionario de un medio granular hemos considerado el alcanzado por un sistema confinado entre dos paredes paralelas mantenidas a la misma temperatura. La inelasticidad implica la presencia de fuertes gradientes en el sistema, contrariamente a los que sucede en un sistema elástico. Se ha discutido en detalle la forma de los perfiles hidrodinámicos, así como la existencia de unas leyes de escala consecuencia de las propiedades de simetría de la ecuación de Boltzmann. Ello nos ha permitido identificar la existencia de una solución normal incluso más allá del régimen de validez de las ecuaciones de Navier-Stokes.
  8. Lejos de las paredes y de su centro, el sistema anterior presenta un estado peculiar en que la presión es uniforme y el gradiente de temperatura constante. El cociente entre ambas cantidades es una función dada del grado de inelasticidad en las colisiones. La existencia de este estado ha sido corroborada por simulaciones, tanto de la ecuación de Boltzmann como de Dinámica Molecular.
  9. Se ha comprobado que la ecuación de Boltzmann admite una solución exacta describiendo el estado anterior. Creemos que éste es un resultado

---

relevante, dado que se trata de la primera solución estacionaria conocida de la ecuación de Boltzmann para un flujo granular.

10. Por último, queremos destacar la gran potencia que ha suministrado a nuestro estudio la combinación de técnicas teóricas analíticas y métodos de simulación. La interacción entre los resultados obtenidos con los dos métodos ha permitido en muchas ocasiones identificar el camino en que debía proceder la investigación.

La conclusión general de esta tesis podría ser que la ecuación de Boltzmann y las ecuaciones hidrodinámicas son, en muchos casos, herramientas útiles para la descripción de los fenómenos que ocurren en los flujos granulares rápidos, análogamente a lo que sucede en los fluidos moleculares.

## APÉNDICE A

# CÁLCULO DE LOS OPERADORES DE EVOLUCIÓN Y DE COLISIÓN BINARIA

Todos los operadores que usaremos son lineales y actúan sobre el espacio vectorial de funciones definidas sobre el espacio fásico, es decir, un operador genérico actuando sobre la función  $A(\Gamma)$  la transforma en otra función  $B(\Gamma)$ . Una clase especial de operadores de este tipo, que aparecerán con frecuencia, son las que implican transformaciones sobre  $\Gamma$

$$PA(\Gamma) = A[p(\Gamma)], \quad (\text{A.1})$$

donde  $p(\Gamma)$  es el transformado de  $\Gamma$  (una cierta función de este argumento). Entonces, la composición de dos operadores de este tipo será

$$P_1 P_2 A(\Gamma) = A[p_2(p_1(\Gamma))], \quad (\text{A.2})$$

esto es, el orden en la composición de las transformaciones sobre el argumento de  $A$  es el inverso que el orden de actuación de los operadores.

El operador de evolución libre (sin colisiones)  $S_t^0$  lo podemos calcular fácilmente, ya que es un operador continuo en el tiempo con la propiedad característica de los operadores de evolución:

$$S_{t_1+t_2}^0 = S_{t_1}^0 S_{t_2}^0 = S_{t_2}^0 S_{t_1}^0. \quad (\text{A.3})$$

Entonces, derivando con respecto a  $t_1$  y haciendo  $t_1 = 0$  (análogamente para  $t_2$ ) se obtiene

$$\frac{dS_t^0}{dt} = L^0 S_t^0 = S_t^0 L^0, \quad (\text{A.4})$$

donde  $L^0 = (dS_t^0/dt)(t=0)$  es el generador de la transformación. La solución de la ecuación diferencial (A.4) con la condición inicial  $S_0^0 = I$  es

$$S_t^0 = e^{tL^0} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(tL^0)^n}{n!}. \quad (\text{A.5})$$

Para calcular explícitamente el generador  $L^0$  basta aplicar la definición de  $S_i^0$  actuando sobre una función genérica  $A(\Gamma)$

$$S_i^0 A(\{r_i, v_i\}) = A(\{r_i + tv_i, v_i\}). \quad (\text{A.6})$$

Entonces derivando (A.6) con respecto al tiempo y haciendo  $t = 0$  se obtiene

$$L^0 = \sum_i v_i \cdot \nabla_i. \quad (\text{A.7})$$

Para calcular el adjunto de  $S_i^0$  apliquemos su definición. A partir de dos funciones arbitrarias  $A(\{r_i, v_i\})$  y  $B(\{r_i, v_i\})$

$$\begin{aligned} \int d\Gamma A(\{r_i, v_i\}) S_i^0 B(\{r_i, v_i\}) &= \int d\Gamma A(\{r_i, v_i\}) B(\{r_i + tv_i, v_i\}) \\ &= \int d\Gamma B(\{r_i, v_i\}) S_{-t}^0 A(\{r_i, v_i\}), \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

con el cambio de variables  $r_i \rightarrow r_i + tv_i$ . Así

$$S_i^{0t} = S_{-t}^0. \quad (\text{A.9})$$

Restrinjámonos por ahora al espacio fásico formado exclusivamente por dos partículas. Para calcular  $S_i(12)$  supongamos que hay una colisión en un instante  $t^* < t$ . Entonces, podemos descomponer la trayectoria seguida por las dos partículas en el intervalo  $[0, t]$  como una evolución libre hasta  $t^*$ , una colisión en  $t^*$  y otra evolución libre hasta  $t$ ,

$$S_i(12) = S_{i^*}^0(12) b(12) S_{i^* - t^*}^0(12), \quad (\text{A.10})$$

donde  $b$  es el operador que cambia las velocidades de las partículas según la regla de colisión definida por (3.14). Obsérvese que el orden de los operadores está de acuerdo con (A.2). Podemos incluir fácilmente el caso en el que la colisión no se produzca en el intervalo  $t$  introduciendo la delta de Dirac

$$S_i(12) = S_i^0(12) + \int_0^t d\tau S_i^0(12) \delta(\tau - t^*) (b(12) - 1) S_{i^* - \tau}^0(12). \quad (\text{A.11})$$

Además, a partir de esta expresión podemos definir el operador de colisión binaria como  $T(12) = \delta(\tau - t^*) (b(12) - 1)$ . Para que sea un verdadero operador tiene depender únicamente del argumento  $\{x_1, x_2\}$  de la función sobre la que actúa y no de  $t^*$ . Para ello es conveniente sustituir la delta temporal por una más geométrica, por ejemplo  $\delta(r_{12} - \sigma \hat{\sigma})$ , donde  $\hat{\sigma}$  es un vector unitario que parte del centro de la segunda partícula (figura 3.1), acompañado de una suma para todas las direcciones posibles  $\hat{\sigma}$ . Calculemos entonces esta integral. Teniendo en

cuenta cómo actúa la delta de Dirac  $d$ -dimensional sobre una función continua arbitraria  $f(\mathbf{r})$  y pasando a coordenadas esféricas tendremos

$$\int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \int_0^\infty dr r^{d-1} \int d\hat{\mathbf{r}} f(r\hat{\mathbf{r}}) \delta(r\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_0) = f(\mathbf{r}_0), \quad (\text{A.12})$$

donde  $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$  es un vector unitario y  $d\hat{\mathbf{r}}$  denota el ángulo sólido infinitesimal. Entonces se puede escribir

$$\int d\hat{\mathbf{r}} f(r\hat{\mathbf{r}}) \delta(r\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_0) = \frac{f(\mathbf{r}_0)}{r_0^{d-1}} \delta(r - r_0). \quad (\text{A.13})$$

De esta manera, la delta que aparece en el segundo miembro de esta expresión es la distribución de Dirac unidimensional. Así, para la integral que buscamos se verifica

$$\int d\hat{\sigma} \delta(r_{12}(\tau) - \sigma) = \frac{1}{\sigma^{d-1}} \delta(r_{12}(\tau) - \sigma), \quad (\text{A.14})$$

con  $\sigma = \sigma\hat{\sigma}$ . El valor de  $r_{12}(\tau)$  viene determinado por el operador  $S_\tau^0$  que aparece a la izquierda de  $T(12)$  en (A.11), es decir, por su valor antes de colisionar:

$$r_{12}(\tau) = \sigma\hat{\sigma}_0 + (\tau - t^*)\mathbf{v}_{12}, \quad (\text{A.15})$$

donde  $\hat{\sigma}_0$  es el vector unitario con el que se produce la colisión. Entonces, por la propiedad del cambio de variable de la delta de Dirac:

$$\int d\hat{\sigma} \delta(r_{12}(\tau) - \sigma) = \frac{1}{\sigma^{d-1} |\hat{\sigma}_0 \cdot \mathbf{v}_{12}|} \delta(\tau - t^*). \quad (\text{A.16})$$

Introduciendo el factor  $|\hat{\sigma}_0 \cdot \mathbf{v}_{12}|$  dentro de la integral y restringiendo la sumación para los ángulos tales que  $\hat{\sigma} \cdot \mathbf{v}_{12} < 0$ , pues en caso contrario no se produce la colisión, obtenemos

$$T(12) = \sigma^{d-1} \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} < 0} d\hat{\sigma} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}| \delta(r_{12} - \sigma) (b(12) - 1). \quad (\text{A.17})$$

Hemos suprimido la dependencia explícita de  $r_{12}$  respecto al tiempo en la expresión anterior, ya que  $T(12)$  se interpreta como un verdadero operador que no depende explícitamente del tiempo. Así pues, tanto  $r_{12}$  como  $\mathbf{v}_{12}$  en la ecuación (A.17) dependen del valor de  $\{x_1, x_2\}$  de la función sobre la que actúa. Obsérvese que esta definición del operador de colisión binaria incluye el caso en el que las dos partículas nunca colisionan.

Una importante propiedad de los operadores  $T$  es que

$$T(12)S_i^0(12)T(12) = 0, \quad (\text{A.18})$$

para todo  $t$ , pues las dos partículas no pueden colisionar otra vez tras haber tenido ya una colisión (recuérdese que  $T$  se define en un espacio fásico de dos partículas).

El operador de evolución para dos partículas queda, entonces, de la manera siguiente

$$S_t(12) = S_t^0(12) + \int_0^t d\tau S_\tau^0(12)T(12)S_{t-\tau}^0(12). \quad (\text{A.19})$$

Sin embargo, con esta expresión  $S_t(12)$  no está bien definido para el caso en el que la colisión se produzca justo en el instante 0 ó  $t$ . En esa situación la delta de Dirac no está bien definida matemáticamente. Esto puede obviarse considerando los límites de integración en (A.19) como  $0^+$  y  $t^+$ . De esta forma  $S_t(12)$  sería un operador de evolución completo que verificaría la propiedad (A.3) incluso para el caso en el que la colisión se produjera en un extremo del intervalo. Una forma equivalente de solucionar este problema es incluir el factor  $S_\eta^0$  a la izquierda del operador de colisión, y tomar el límite  $\eta \rightarrow 0^+$  al final de los cálculos. Es decir, considerar

$$T(12) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} S_\eta^0 \sigma^{d-1} \int_{v_{12} \cdot \hat{\sigma} < 0} d\hat{\sigma} |v_{12} \cdot \hat{\sigma}| \delta(r_{12} - \sigma) (b(12) - 1). \quad (\text{A.20})$$

Este camino es más conveniente, pues le confiere sentido a los productos de operadores  $T$ , los cuales, a partir de (A.18) son todos nulos, es decir,  $T(12)T(12) = 0$ . Sin embargo, el límite en la ecuación (A.20) debe realizarse al final de los cálculos. Por simplicidad en la notación, en lo sucesivo no escribiremos este término explícitamente.

Derivando la ecuación (A.19) respecto al tiempo, resulta,

$$\frac{dS_t(12)}{dt} = S_t(12)L^0(12) + S_t^0(12)T(12). \quad (\text{A.21})$$

Si se sustituye  $S_t^0(12)$  en (A.21) por la expresión dada por (A.19) y se aplica la propiedad (A.18) se obtiene

$$\frac{dS_t(12)}{dt} = S_t(12) [L^0(12) + T(12)], \quad (\text{A.22})$$

lo que indica que el generador de  $S_t(12)$  es  $L(12) = L^0(12) + T(12)$ , y por lo tanto

$$S_t(12) = e^{tL^0(12) + tT(12)}. \quad (\text{A.23})$$

Calculemos ahora el adjunto de  $T(12)$ . Por definición, para dos funciones

arbitrarias  $A(12)$  y  $B(12)$

$$\begin{aligned}
 \int dx_1 dx_2 A(12)T(12)B(12) &= \int dr_1 dr_2 dv_1^* dv_2^* \alpha^{-1} A(x_1, x_2) \sigma^{d-1} \\
 &\times \int_{v_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} \frac{v_{12}^* \cdot \hat{\sigma}}{\alpha} \delta(r_{12} - \sigma) b(12) B(x_1, x_2) \\
 &- \int dx_1 dx_2 A(x_1, x_2) \sigma^{d-1} \\
 &\times \int_{v_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (v_{12} \cdot \hat{\sigma}) \delta(r_{12} + \sigma) B(x_1, x_2),
 \end{aligned} \tag{A.24}$$

donde se ha pasado de las velocidades precolisionales  $\{v_1, v_2\}$  a las postcolisionales  $\{v_1^*, v_2^*\}$ , con el jacobiano  $dv_1 dv_2 = dv_1^* dv_2^* / \alpha$ , en el primer sumando del segundo miembro. También se ha transformado  $\hat{\sigma} \rightarrow -\hat{\sigma}$  en el segundo sumando. De esta manera, renombrando las velocidades del primer sumando y utilizando los operadores  $b$  y  $b^{-1}$ , obtenemos

$$\int dx_1 dx_2 A(12)T(12)B(12) = \int dx_1 dx_2 B(12)\bar{T}(12)A(12), \tag{A.25}$$

con el operador  $\bar{T}(12)$  dado por la ecuación (3.15). Obsérvese que la ecuación (A.25) es cierta aún cuando la integración se realizara sólo sobre las velocidades, esto es, si hubiéramos considerado  $dx_1 dx_2 = dv_1 dv_2$ .

Con objeto de generalizar nuestros resultados para el espacio fásico del sistema completo podemos repetir los mismos pasos que hemos seguido para el espacio fásico de dos partículas. El operador de evolución  $S_t$  tendrá la misma forma que  $S_t(12)$  pero sumando para todos los operadores de colisión binaria y moviendo a todas las partículas del sistema

$$S_t = S_t^0 + \int_0^t d\tau S_\tau^0 \sum_{i < j} T(i, j) S_{t-\tau}^0. \tag{A.26}$$

Para demostrar formalmente esta ecuación primero debemos probar que el operador  $S_t$  así definido cumple la propiedad (A.3), es decir,  $S_{t_1+t_2} = S_{t_1} S_{t_2} = S_{t_2} S_{t_1}$ . A partir de (A.26),

$$\begin{aligned}
 S_{t_1} S_{t_2} &= \left( S_{t_1}^0 + \int_0^{t_1} d\tau S_\tau^0 \sum_{i < j} T(i, j) S_{t_1-\tau}^0 \right) \left( S_{t_2}^0 + \int_0^{t_2} d\tau S_\tau^0 \sum_{i < j} T(i, j) S_{t_2-\tau}^0 \right) \\
 &= S_{t_1}^0 S_{t_2}^0 + S_{t_1}^0 \int_0^{t_2} d\tau S_\tau^0 \sum_{i < j} T(i, j) S_{t_2-\tau}^0 + \int_0^{t_1} d\tau S_\tau^0 \sum_{i < j} T(i, j) S_{t_1+t_2-\tau}^0
 \end{aligned} \tag{A.27}$$

más un término que se anula por la propiedad (A.18). Con el cambio de variables  $\tau \rightarrow t_2 - \tau$  en el segundo sumando, se tiene

$$\begin{aligned} S_{t_1}^0 \int_0^{t_2} d\tau S_\tau^0 \sum_{i < j} T(i, j) S_{t_2 - \tau}^0 &= \int_0^{t_2} d\tau S_{t_1 + t_2 - \tau}^0 \sum_{i < j} T(i, j) S_\tau^0 \\ &= \int_{t_1}^{t_1 + t_2} d\tau S_\tau^0 \sum_{i < j} T(i, j) S_{t_1 + t_2 - \tau}^0, \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

donde se ha utilizado el cambio  $\tau \rightarrow t_1 + t_2 - \tau$ . De esta manera,

$$S_{t_1} S_{t_2} = S_{t_1 + t_2}^0 + \int_0^{t_1 + t_2} d\tau S_\tau^0 \sum_{i < j} T(i, j) S_{t_1 + t_2 - \tau}^0 = S_{t_1 + t_2}. \quad (\text{A.29})$$

Apliquemos ahora  $S_t$  a una función arbitraria  $A(\Gamma)$ . Para cada  $\Gamma$  siempre podemos dividir el intervalo  $t$  en subintervalos  $t_k$ , de forma que a lo sumo haya una sola colisión dentro de cada uno. Utilizando la propiedad de factorización que acabamos de probar podemos descomponer el operador  $S_t$  en un producto de operadores que actúan sobre cada uno de estos subintervalos

$$S_t A(\Gamma) = S_{t_1} S_{t_2} \cdots S_{t_n} \cdots A(\Gamma). \quad (\text{A.30})$$

De esta manera,  $S_{t_k}$  debe reducirse al operador  $S_{t_k}(ij)$  para las dos partículas  $i$  y  $j$  que colisionan en el subintervalo  $t_k$ , y mover libremente al resto. Claramente, el operador de evolución  $S_t$  definido por (A.26) cumple esta propiedad, lo que completa la demostración.

Procediendo igual que para  $S_t(12)$  se encuentra

$$S_t = e^{tL}, \quad (\text{A.31})$$

donde

$$L = L^0 + \sum_{i < j} T(i, j). \quad (\text{A.32})$$

El adjunto de  $S_t$  será, a partir de (A.9) y (A.25)

$$S_t^\dagger = e^{tL^\dagger} = \exp \left[ -tL^0 + t \sum_{i < j} \bar{T}(i, j) \right], \quad (\text{A.33})$$

pues en general

$$\begin{aligned} \int d\Gamma A(\Gamma) e^{tL} B(\Gamma) &= \sum_{n \geq 0} \frac{t^n}{n!} \int d\Gamma A(\Gamma) L^n B(\Gamma) \\ &= \sum_{n \geq 0} \frac{t^n}{n!} \int d\Gamma B(\Gamma) (L^\dagger)^n A(\Gamma) \\ &= \int d\Gamma B(\Gamma) e^{tL^\dagger} A(\Gamma). \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$



---

Como antes se mencionó, el operador  $S_t$  y su adjunto están definidos sobre todo el espacio fásico, incluyendo las configuraciones donde hay solapamiento de esferas. Más concretamente, el operador  $S_t$  que estamos utilizando evoluciona libremente las partículas que inicialmente están solapadas, no produciéndose colisión cuando una sale de la otra (debido al límite de integración del ángulo sólido en (A.17)).

## APÉNDICE B

# CÁLCULO DE INTEGRALES MULTI-DIMENSIONALES

En este apéndice se presentan las herramientas matemáticas necesarias para la evaluación de las integrales  $d$ -dimensionales que aparecen en el texto. Estas integrales nos han permitido encontrar expresiones válidas para un sistema físico genérico de dimensión  $d$ , facilitándonos la tarea de la verificación de la teoría (y las aproximaciones llevadas a cabo) con la simulación por ordenador, ya sea de un sistema de discos duros ( $d = 2$ ) o de esferas duras ( $d = 3$ ). Esto es muy ventajoso, ya que en muchos casos es muy difícil simular un sistema tridimensional.

En primer lugar, la función gamma se suele definir como

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} dt t^{x-1} e^{-t}. \quad (\text{B.1})$$

Integrando la ecuación (B.1) por partes se encuentra la propiedad fundamental de la función gamma

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x). \quad (\text{B.2})$$

Por otro lado, a partir de la ecuación (B.1) podemos calcular las siguientes integrales gaussianas unidimensionales,

$$\int_0^{\infty} dx x^d e^{-x^2} = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1+d}{2}\right). \quad (\text{B.3})$$

Calculemos ahora el ángulo sólido total  $\Omega_d$  en un espacio de dimensión  $d$ . A partir de la integral gaussiana, cambiando a coordenadas esféricas

$$\int dv e^{-v^2} = \pi^{d/2} = \int_0^{\infty} dv v^{d-1} e^{-v^2} \int d\hat{\sigma}, \quad (\text{B.4})$$

donde  $d\hat{\sigma}$  es la diferencial de ángulo sólido. Entonces, utilizando (B.3) obtenemos

$$\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}. \quad (\text{B.5})$$

## B.1 INTEGRALES DEL ÁNGULO SÓLIDO

La mayoría de las integrales angulares que aparecen en la memoria se pueden calcular conociendo el valor de la siguiente integral

$$M_{\{l_i\}} = \int d\hat{\sigma} \theta(\hat{\sigma}_1) \hat{\sigma}_1^{l_1} \hat{\sigma}_2^{2l_2} \dots \hat{\sigma}_d^{2l_d}, \quad (\text{B.6})$$

donde  $\theta(x)$  es la función escalón o de Heaviside,  $\hat{\sigma}_i$  son las distintas componentes del vector unitario  $\hat{\sigma}$  y  $l_i$  son números enteros positivos o nulos. Por un lado, podemos calcular fácilmente la siguiente integral gaussiana utilizando (B.3)

$$\begin{aligned} \int d\sigma \theta(\sigma_1) e^{-\sigma^2} \sigma_1^{l_1} \sigma_1^{2l_2} \dots \sigma_d^{2l_d} &= \left( \int_0^\infty d\sigma_1 \sigma_1^{l_1} e^{-\sigma_1^2} \right) \dots \left( \int_{-\infty}^\infty d\sigma_d \sigma_d^{2l_d} e^{-\sigma_d^2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1+l_1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}+l_2\right) \dots \Gamma\left(\frac{1}{2}+l_d\right). \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Por otra parte, podemos relacionar esta integral con  $M_{\{l_i\}}$  sin más que pasar a coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} \int d\sigma \theta(\sigma_1) e^{-\sigma^2} \sigma_1^{l_1} \sigma_1^{2l_2} \dots \sigma_d^{2l_d} &= \int_0^\infty d\sigma \sigma^{d-1} \sigma^{l_1+2(l_2+\dots+l_d)} e^{-\sigma^2} M_{\{l_i\}} \\ &= \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{d+l_1}{2} + l_2 + \dots + l_d\right) M_{\{l_i\}}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Finalmente,

$$M_{\{l_i\}} = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma\left(\frac{d+l_1}{2} + l_2 + \dots + l_d\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{1+l_1}{2}\right) \Gamma(1/2+l_2) \dots \Gamma(1/2+l_d)}{\pi^{1/2} \pi^{1/2} \dots \pi^{1/2}}. \quad (\text{B.9})$$

Hemos escrito esta última expresión introduciendo el número  $\pi$  en el numerador y denominador con objeto de simplificar la solución en el caso de que algún entero  $l_i$  sea nulo, ya que  $\Gamma(1/2) = \pi^{1/2}$ .

## B.2 INTEGRALES GAUSSIANAS

Cuando se aplica el método de Chapman-Enskog con frecuencia aparecen integrales gaussianas del tipo

$$I_{l_i, \{l_i\}} = \int dv e^{-v^2} v^l v_1^{2l_1} \dots v_d^{2l_d}. \quad (\text{B.10})$$

Las integrales con  $l = 0$  son fáciles de calcular usando la ecuación (B.3). Las integrales con un  $l$  distinto de cero se pueden relacionar con las primeras pasando a coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned}
 I_{l, \{l_i\}} &= \int_0^\infty dv v^{d-1+l+2(l_1+\dots+l_d)} e^{-v^2} \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma}_1^{2l_1} \dots \hat{\sigma}_d^{2l_d} \\
 &= \frac{\Gamma(\frac{d+l}{2} + l_1 + \dots + l_d)}{\Gamma(\frac{d}{2} + l_1 + \dots + l_d)} \int dv e^{-v^2} v^{2l_1} \dots v_d^{2l_d},
 \end{aligned}
 \tag{B.11}$$

donde se ha multiplicado y dividido por

$$\int_0^\infty dv v^{d-1+2(l_1+\dots+l_d)} e^{-v^2} = \frac{1}{2} \Gamma(d/2 + l_1 + \dots + l_d).
 \tag{B.12}$$

De esta forma,

$$I_{l, \{l_i\}} = \frac{\pi^{d/2} \Gamma(\frac{d+l}{2} + l_1 + \dots + l_d)}{\Gamma(\frac{d}{2} + l_1 + \dots + l_d)} \frac{\Gamma(1/2 + l_1)}{\pi^{1/2}} \dots \frac{\Gamma(1/2 + l_d)}{\pi^{1/2}}.
 \tag{B.13}$$

### B.3 INTEGRALES DOBLES GAUSSIANAS

Seguidamente veamos cómo se pueden resolver las integrales gaussianas dobles que aparecen en el texto. El primer paso que hay que efectuar para calcular estas integrales, como la que aparece en la ecuación (C.44), es cambiar a las variables relativas y de centro de masas,  $g = v_1 - v_2$  y  $G = (v_1 + v_2)/2$ . De esta forma se obtiene una integral del tipo

$$J_{n, \{n_i\}, m, \{m_i\}, k} = \int dg \int dG e^{-g^2 - G^2} (g \cdot G)^k G^n G_1^{n_1} \dots G_d^{n_d} g^m g_1^{m_1} \dots g_d^{m_d},
 \tag{B.14}$$

donde  $n, n_1, \dots, n_d, m, m_1, \dots, m_d$  y  $k$  son enteros positivos o nulos. Al igual que con las integrales gaussianas (B.10), se puede relacionar  $J_{n, \{n_i\}, m, \{m_i\}, k}$  con una integral análoga donde no aparece ningún factor  $G^n$ . Procediendo de la misma forma que antes se obtiene

$$J_{n, \{n_i\}, m, \{m_i\}, k} = \frac{\Gamma(\frac{d+n+n_1+\dots+n_d+k}{2})}{\Gamma(\frac{d+n_1+\dots+n_d+k}{2})} J_{0, \{n_i\}, m, \{m_i\}, k}.
 \tag{B.15}$$

Por otro lado, esta última integral se puede expresar de una forma más conveniente de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
 J_{0, \{n_i\}, m, \{m_i\}, k} &= 2^{-k} \frac{\partial}{\partial \lambda^k} \left[ \int dg \int dG e^{-g^2 - G^2 + 2\lambda g \cdot G} \right. \\
 &\quad \left. \times G_1^{n_1} \dots G_d^{n_d} g^m g_1^{m_1} \dots g_d^{m_d} \right]_{\lambda=0}.
 \end{aligned}
 \tag{B.16}$$

La ventaja de esta forma es que el argumento de la exponencial en (B.16) se puede escribir como

$$-g^2 - G^2 + 2\lambda g \cdot G = -(G - \lambda g)^2 - (1 - \lambda^2)g^2, \quad (\text{B.17})$$

y entonces, haciendo un cambio de variables se llega a

$$\begin{aligned} J_{0, \{n_i\}, m, \{m_i\}, k} &= 2^{-k} \frac{\partial}{\partial \lambda^k} \left[ (1 - \lambda^2)^{\frac{d+m+m_1+\dots+m_d}{2}} \int dg \int dG e^{-g^2 - G^2} \right. \\ &\quad \times g^m g_1^{m_1} \dots g_d^{m_d} \left( G_1 + \frac{\lambda}{\sqrt{1 - \lambda^2}} g_1 \right)^{n_1} \dots \\ &\quad \left. \times \left( G_d + \frac{\lambda}{\sqrt{1 - \lambda^2}} g_d \right)^{n_d} \right]_{\lambda=0}. \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Desarrollando los binomios podemos calcular esta integral utilizando la expresión general que hemos obtenido para las integrales gaussianas simples (B.13). Esta forma de proceder parece a primera vista un poco laboriosa. Sin embargo, estas expresiones son muy fáciles de programar en ordenador mediante cálculo simbólico. Utilizando el programa informático *Mathematica* [128] se pueden obtener en varios minutos todas las integrales que aparecen en el texto.

## APÉNDICE C

# CÁLCULO DE LOS COEFICIENTES DE TRANSPORTE

En este apéndice vamos a encontrar una solución, y los coeficientes de transporte asociados, de la ecuación de Boltzmann en un estado cercano al HCS utilizando el método de Chapman-Enskog.

### C.1 SOLUCIÓN DE CHAPMAN-ENSKOG

Se busca una solución normal, esto es, que tenga la forma

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f[\mathbf{v} | n, u, T]. \quad (\text{C.1})$$

Esto significa que toda la dependencia espacial y temporal ocurre a través de los campos hidrodinámicos. Esta dependencia funcional puede ser local en el espacio y el tiempo a través del desarrollo en gradientes de estos campos en estados donde las variaciones espaciales son pequeñas. En este caso, la función de distribución se representa como un desarrollo en serie en un parámetro de "uniformidad" formal  $\epsilon$ ,

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots \quad (\text{C.2})$$

Como lo que queremos hacer es un desarrollo en los gradientes espaciales, asignaremos un factor  $\epsilon$  a cada operador gradiente. El parámetro pequeño adimensional que hay detrás de  $\epsilon$  es el número de Knudsen, que se define como el cociente del recorrido libre medio entre colisiones por el tamaño típico del gradiente macroscópico. Sin embargo, utilizando el parámetro formal  $\epsilon$ , que igualamos a la unidad al final de los cálculos, nos evitamos tener que adimensionalizar todas las ecuaciones.

Seguidamente, el método de Chapman-Enskog utiliza el formalismo de escalas múltiples [88], que consiste en introducir varias variables temporales (una por cada escala física del problema), de forma que cada orden del desarrollo de la función de distribución  $f^{(k)}(t)$  pasa a ser  $f^{(k)}(t_1, t_2, \dots)$ . En nuestro problema cada variable se va a corresponder con una escala de tiempo cada vez más fina, que a su vez será más sensible a los gradientes espaciales presentes en el sistema. Con esta idea, matemáticamente se obtiene un sistema de ecuaciones para cada orden reemplazando el operador  $\partial/\partial t$  por

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \dots \quad (\text{C.3})$$

Sin embargo, ahora tenemos una cierta arbitrariedad en las condiciones iniciales, pues al pasar a un problema con mayor número de variables, el espacio de soluciones es más grande. En el método de Chapman-Enskog esta arbitrariedad se resuelve exigiendo que el orden cero reproduzca exactamente, en todo instante de tiempo, los campos hidrodinámicos. De esta manera, los demás órdenes no pueden proporcionar contribuciones a los campos, luego debe cumplirse

$$\int d\mathbf{v} f^{(k)} = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f^{(k)} = \int d\mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f^{(k)} = 0 \quad (\text{C.4})$$

para todo  $k \geq 1$ . Obsérvese que no estamos desarrollando los campos hidrodinámicos (pues vienen dados por el orden cero), sino las derivadas de éstos. Una vez que hemos resuelto el problema, no tenemos más que sustituir  $t_* = \varepsilon^k t$  en la solución que hemos obtenido para recuperar la variable temporal original (lo cual es consistente con (C.3) y la idea de que cada variable se corresponde con una escala temporal más fina).

Como estamos interesados en los coeficientes de transporte, además de calcular los distintos órdenes que van saliendo de la ecuación cinética, debemos calcular las ecuaciones de balance en cada orden, que al fin y al cabo se deducen de la ecuación cinética por integración. En el método usual de Chapman-Enskog se obtienen las ecuaciones de Euler en el primer orden, las de Navier-Stokes en el segundo orden y las de Burnett en el tercero. Nuestro problema es más complejo que el caso  $\alpha = 1$ , porque el estado de referencia alrededor del cual se consideran los gradientes no es estacionario.

En el orden cero en los gradientes se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t_0} f^{(0)} = J_B[f^{(0)}, f^{(0)}], \quad (\text{C.5})$$

donde  $J_B$  es el operador de colisiones de Boltzmann, ecuación (3.30), y donde hemos hecho explícito su dependencia funcional de dos funciones, análogamente

a lo que hicimos con el término fuente  $w$  en la ecuación (3.40). En este orden, las ecuaciones de balance que se obtienen son

$$\frac{\partial n}{\partial t_0} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t_0} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial t_0} = -T\zeta^{(0)}, \quad (\text{C.6})$$

donde  $\zeta^{(0)}$  viene dado por

$$\zeta^{(0)} = (1 - \alpha^2) \frac{2w[f^{(0)}, f^{(0)}]}{dnk_B T}. \quad (\text{C.7})$$

Ya conocemos una solución normal de la ecuación (C.5): la función de distribución del HCS discutida en la sección 5.2. Así, la solución que estamos buscando será

$$f^{(0)} = n \left[ \frac{m}{2k_B T} \right]^{d/2} \phi(c), \quad (\text{C.8})$$

donde ahora

$$c = \left[ \frac{m}{2k_B T} \right]^{1/2} \mathbf{V}, \quad (\text{C.9})$$

siendo  $\mathbf{V} \equiv \mathbf{v} - \mathbf{u}$  la velocidad peculiar. A partir de esta solución podemos escribir el primer miembro de la ecuación (C.5) de varias maneras

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t_0} = -\zeta^{(0)} T \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} = \frac{1}{2} \zeta^{(0)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\mathbf{V} f^{(0)}), \quad (\text{C.10})$$

expresiones que usaremos más adelante. Como esta solución sólo depende del módulo de  $\mathbf{V}$ , las contribuciones en este orden al tensor de presiones y al flujo de calor son

$$P_{ij}^{(0)} = p \delta_{ij}, \quad q_i^{(0)} = 0, \quad (\text{C.11})$$

donde  $p = nk_B T$  es la presión hidrostática.

En el primer orden en los gradientes la ecuación de Boltzmann nos lleva a la siguiente ecuación para  $f^{(1)}$

$$\left( \frac{\partial}{\partial t_0} + L \right) f^{(1)} = - \left( \frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) f^{(0)} = - \left( \frac{D}{Dt_1} + \mathbf{V} \cdot \nabla \right) f^{(0)}, \quad (\text{C.12})$$

donde  $D/Dt_1 \equiv \partial/\partial t_1 + \mathbf{u} \cdot \nabla$  es la derivada substancial y  $L$  es un operador lineal definido por

$$L f^{(1)} = -J_B[f^{(0)}, f^{(1)}] - J_B[f^{(1)}, f^{(0)}]. \quad (\text{C.13})$$



Las ecuaciones de balance macroscópicas que se obtienen son

$$\begin{aligned} \frac{Dn}{Dt_1} &= -n \nabla \cdot \mathbf{u}, & \frac{D\mathbf{u}}{Dt_1} &= -(mn)^{-1} \nabla p, \\ \frac{DT}{Dt_1} &= -\frac{2T}{d} \nabla \cdot \mathbf{u} - \zeta^{(1)} T, \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

donde

$$\zeta^{(1)} = (1 - \alpha^2) \frac{4w[f^{(0)}, f^{(1)}]}{d n k_B T}. \quad (\text{C.15})$$

Podemos utilizar estas ecuaciones junto con (C.10) para reescribir la ecuación (C.12)<sup>1</sup>

$$\left( \frac{\partial}{\partial t_0} + L \right) f^{(1)} = \zeta^{(1)} T \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} + \mathbf{A} \cdot \nabla \ln T + \mathbf{B} \cdot \nabla \ln n + C_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad (\text{C.16})$$

siendo los coeficientes de los gradientes de los campos en el segundo miembro funciones de  $\mathbf{V}$  y de los campos hidrodinámicos

$$\mathbf{A}(\mathbf{V}, n, T) = \frac{\mathbf{V}}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\mathbf{V} f^{(0)}) - \frac{k_B T}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{V}}, \quad (\text{C.17})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{V}, n, T) = -\mathbf{V} f^{(0)} - \frac{k_B T}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{V}}, \quad (\text{C.18})$$

$$C_{ij}(\mathbf{V}, n, T) = \frac{\delta}{\partial V_i} (V_j f^{(0)}) - \frac{1}{d} \delta_{ij} \frac{\delta}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\mathbf{V} f^{(0)}). \quad (\text{C.19})$$

La solución a la ecuación (C.16) se puede escribir como

$$f^{(1)} = \mathcal{A} \cdot \nabla \ln T + \mathcal{B} \cdot \nabla \ln n + C_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}. \quad (\text{C.20})$$

La ecuación (C.16) se puede simplificar notando que  $C_{ij}$  es de traza nula, lo cual implica que también debe serlo  $C_{ij}$ . Como  $\zeta^{(1)}$  es un escalar, se sigue directamente de consideraciones de simetría que  $\zeta^{(1)} = 0$ . Las funciones  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$  y  $C_{ij}$  vienen dadas por las ecuaciones que se obtienen al igualar los coeficientes de los gradientes en (C.16). Al igual que antes, no estamos interesados en todas las soluciones posibles de estas ecuaciones, sino en una solución normal. Esta se obtiene buscando una solución en el que  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$  y  $C_{ij}$  son funciones del tiempo y el espacio a través de los campos  $n$ ,  $T$  y  $\mathbf{V}$ . De esta manera, la derivada temporal

<sup>1</sup>En la ecuación (C.16) y las sucesivas estamos utilizando la notación de Einstein de la suma sobre los subíndices repetidos.

se puede expresar en términos de los gradientes utilizando la regla de la cadena. Además, a partir de las ecuaciones (C.6) y del hecho que  $\zeta^{(0)}$  es proporcional a  $nT^{1/2}$ ,

$$\frac{\partial}{\partial t_0} \nabla \ln T = -\zeta^{(0)} (\nabla \ln n + \frac{1}{2} \nabla \ln T). \quad (\text{C.21})$$

Así se obtiene

$$\left( -\zeta^{(0)} T \frac{\partial}{\partial T} + L - \frac{\zeta^{(0)}}{2} \right) \mathcal{A} = \mathcal{A}, \quad (\text{C.22})$$

$$\left( -\zeta^{(0)} T \frac{\partial}{\partial T} + L \right) \mathcal{B} = \mathcal{B} + \zeta^{(0)} \mathcal{A}, \quad (\text{C.23})$$

$$\left( -\zeta^{(0)} T \frac{\partial}{\partial T} + L \right) C_{ij} = C_{ij}. \quad (\text{C.24})$$

Consideremos primero la viscosidad. La contribución a la presión en el primer orden se puede escribir como

$$P_{ij}^{(1)} = \int d\mathbf{V} D_{ij}(\mathbf{V}) f^{(1)}(\mathbf{V}), \quad (\text{C.25})$$

donde

$$D_{ij}(\mathbf{V}) \equiv m(V_i V_j - \frac{1}{d} V^2 \delta_{ij}), \quad (\text{C.26})$$

ya que en este orden se deben cumplir las condiciones (C.4). De esta forma, utilizando (C.20), la isotropía de los tensores y el hecho de que  $D_{ij}$  es un tensor de traza nula,

$$\begin{aligned} P_{ij}^{(1)} &= \int d\mathbf{V} D_{ij}(\mathbf{V}) C_{kl}(\mathbf{V}) \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \\ &= -\eta \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{d} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u} \right), \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

donde

$$\eta = -\frac{1}{d^2 + d - 2} \int d\mathbf{V} D_{ij}(\mathbf{V}) C_{ij}(\mathbf{V}). \quad (\text{C.28})$$

Utilizando la ecuación (C.24) obtenemos una ecuación para  $\eta$ ,

$$\begin{aligned} -\zeta^{(0)} T \frac{\partial \eta}{\partial T} - \frac{1}{d^2 + d - 2} \int d\mathbf{V} D_{ij}(\mathbf{V}) L C_{ij}(\mathbf{V}) \\ = -\frac{1}{d^2 + d - 2} \int d\mathbf{V} D_{ij}(\mathbf{V}) C_{ij}(\mathbf{V}). \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

Sea

$$\nu_{\eta} = \frac{\int dV D_{ij}(\mathbf{V}) L C_{ij}(\mathbf{V})}{\int dV D_{ij}(\mathbf{V}) C_{ij}(\mathbf{V})}, \quad (\text{C.30})$$

entonces

$$\left(-\zeta^{(0)} T \frac{\partial}{\partial T} + \nu_{\eta}\right) \eta = -\frac{1}{d^2 + d - 2} \int dV D_{ij}(\mathbf{V}) C_{ij}(\mathbf{V}). \quad (\text{C.31})$$

Análisis dimensional requiere que  $\zeta^{(0)}$  y  $\nu_{\eta}$  sean proporcionales a  $T^{1/2}$ , mientras que la integral del segundo miembro es proporcional a  $T$ . Entonces la viscosidad es proporcional a  $T^{1/2}$ , y a partir de la ecuación (C.31)

$$\begin{aligned} \eta &= -\frac{1}{(d^2 + d - 2)(\nu_{\eta} - \zeta^{(0)}/2)} \int dV D_{ij}(\mathbf{V}) \frac{\partial}{\partial V_i} (V_j f^{(0)}) \\ &= \frac{1}{d(\nu_{\eta} - \zeta^{(0)}/2)} \int dV m V^2 f^{(0)} = p(\nu_{\eta} - \zeta^{(0)}/2)^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

De esta manera, hemos conseguido expresar la viscosidad tangencial en función de  $\nu_{\eta}$ , que viene dado por la ecuación (C.30). En la sección siguiente calcularemos  $\nu_{\eta}$  en la primera aproximación de Sonine. Podemos hacer lo mismo con los otros coeficientes de transporte.

El flujo de calor en este orden es

$$\mathbf{q}^{(1)} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n. \quad (\text{C.33})$$

Los coeficientes de transporte en esta expresión vienen dados por

$$\kappa = -\frac{1}{dT} \int dV \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{V}), \quad (\text{C.34})$$

$$\mu = -\frac{1}{dn} \int dV \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{V}), \quad (\text{C.35})$$

donde

$$\mathbf{S}(\mathbf{V}) \equiv \left( \frac{mV^2}{2} - \frac{d+2}{2} k_B T \right) \mathbf{V}. \quad (\text{C.36})$$

El análisis es similar al seguido para la viscosidad, con los resultados

$$\kappa = -\frac{1}{dT(\nu_{\kappa} - 2\zeta^{(0)})} \int dV \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{V}), \quad (\text{C.37})$$

$$\mu = \frac{2}{2\nu_{\mu} - 3\zeta^{(0)}} \left[ \zeta^{(0)} \frac{\kappa T}{n} - \frac{1}{dn} \int dV \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{V}) \right], \quad (\text{C.38})$$

donde

$$\nu_\kappa = \frac{\int dV S(V) \cdot LA(V)}{\int dV S(V) \cdot A(V)}, \quad \nu_\mu = \frac{\int dV S(V) \cdot LB(V)}{\int dV S(V) \cdot B(V)}. \quad (C.39)$$

Utilizando las ecuaciones (C.17)–(C.18) podemos simplificar estas expresiones,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{dT} \int dV S(V) \cdot A(V) \\ &= -\frac{m}{2dT} \int dV V^2 V \cdot \left[ VT \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} + \frac{k_B T}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial V} \right] \\ &= -\frac{(d+2)n k_B^2 T}{2m} [1 + 2a_2(\alpha)], \end{aligned} \quad (C.40)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{dn} \int dV S(V) \cdot B(V) \\ &= -\frac{m}{2dn} \int dV V^2 V \cdot \left[ V f^{(0)} + \frac{k_B T}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial V} \right] \\ &= -\frac{(d+2)(k_B T)^2}{2m} a_2(\alpha), \end{aligned} \quad (C.41)$$

donde hemos hecho uso de la aproximación de Sonine hasta el orden dos de  $f^{(0)}$  (sección 5.2.1). Con estos resultados, finalmente,

$$\kappa = (\nu_\kappa - 2\zeta^{(0)})^{-1} \frac{(d+2)n k_B^2 T}{2m} (1 + 2a_2), \quad (C.42)$$

$$\mu = \frac{2}{2\nu_\mu - 3\zeta^{(0)}} \left[ \zeta^{(0)} \frac{\kappa T}{n} + \frac{d+2}{2m} (k_B T)^2 a_2 \right]. \quad (C.43)$$

## C.2 CÁLCULO DE $\zeta^{(0)}$ , $\nu_\eta$ , $\nu_\kappa$ Y $\nu_\mu$

A partir de las ecuaciones (C.7) y (3.40), el término sumidero relacionado con la disipación de la energía puede escribirse como

$$\zeta^{(0)} = (1 - \alpha^2) \frac{m\pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma^{d-1}}{4d\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right) n k_B T} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|^3 f^{(0)}(\mathbf{V}_1) f^{(0)}(\mathbf{V}_2). \quad (C.44)$$

Como sabemos que  $f^{(0)}$  es la función de distribución en el HCS, podemos calcular  $\zeta^{(0)}$  con la expresión en la segunda aproximación de Sonine que obtuvimos en la sección 5.2.1. De esta manera, cambiando a las variables relativas y de

centro de masas,  $\mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 = \mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2$  y  $\mathbf{G} = (\mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_2)/2$ , y despreciando los términos no lineales en  $\alpha_2$  (pues ya es bastante pequeño)

$$\zeta^{(0)} = (1 - \alpha^2) \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{d\Gamma(\frac{d}{2})} n \sigma^{d-1} \left(\frac{k_B T}{m}\right)^{d/2} \left[1 + \frac{3}{16} \alpha_2(\alpha)\right]. \quad (\text{C.45})$$

Vamos a calcular las funciones  $\nu_\eta$ ,  $\nu_\kappa$  y  $\nu_\mu$  utilizando los polinomios de Sonine. Como el operador de colisión conmuta con el operador de las rotaciones, por la forma de las ecuaciones (C.24), necesariamente  $\mathcal{A}(\mathbf{V})$  y  $\mathcal{B}(\mathbf{V})$  deben factorizar como el producto de una función isótropa (función del módulo de  $\mathbf{V}$ ) por  $\mathbf{S}(\mathbf{V})$ . Análogamente  $C_{ij}(\mathbf{V})$  debe ser el producto de otra función isótropa por  $D_{ij}(\mathbf{V})$ . Entonces podemos desarrollar estas funciones isótropas en los polinomios de Sonine. Así, la dependencia con respecto a la velocidad en el orden más bajo será

$$\mathcal{A}(\mathbf{V}) \propto f_M(V) \mathbf{S}(\mathbf{V}), \quad \mathcal{B}(\mathbf{V}) \propto f_M(V) \mathbf{S}(\mathbf{V}), \quad C_{ij}(\mathbf{V}) \propto f_M(V) D_{ij}(\mathbf{V}), \quad (\text{C.46})$$

donde  $f_M(V)$  es la distribución de Maxwell-Boltzmann

$$f_M(V) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{d/2} \exp\left(-\frac{mV^2}{2k_B T}\right). \quad (\text{C.47})$$

Con esta aproximación

$$\begin{aligned} \nu_\eta &= \frac{\int d\mathbf{V} D_{ij}(\mathbf{V}) L[f_M(V) D_{ij}(\mathbf{V})]}{\int d\mathbf{V} f_M(V) D_{ij}(\mathbf{V}) D_{ij}(\mathbf{V})} \\ &= \frac{\int d\mathbf{V} D_{ij}(\mathbf{V}) L[f_M(V) D_{ij}(\mathbf{V})]}{(d-1)(d+2)n(k_B T)^2}, \end{aligned} \quad (\text{C.48})$$

$$\begin{aligned} \nu_\kappa = \nu_\mu &= \frac{\int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot L[f_M(V) \mathbf{S}(\mathbf{V})]}{\int d\mathbf{V} f_M(V) \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{V})} \\ &= \frac{2m \int d\mathbf{V} \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot L[f_M(V) \mathbf{S}(\mathbf{V})]}{d(d+2)n(k_B T)^3}. \end{aligned} \quad (\text{C.49})$$

Se puede escribir el operador de colisión lineal  $L$ , definido en la ecuación (C.13), como

$$\begin{aligned} L[X(\mathbf{V}_1) f_M(V_1)] &= -\sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_2 \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) (\alpha^{-2} b^{-1} - 1) \\ &\times \left[ f^{(0)}(V_2) f_M(V_1) X(\mathbf{V}_1) + f^{(0)}(V_1) f_M(V_2) X(\mathbf{V}_2) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.50})$$

donde  $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$  y  $b$  es el operador introducido en el capítulo 3. Podemos calcular las integrales de la forma  $\int d\mathbf{v} Y L[f_M X]$  mediante un cambio de variables análogo al efectuado en el capítulo 3 para llegar a la ecuación (3.27),

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{v}_1 Y(\mathbf{v}_1) L[X(\mathbf{V}_1) f_M(V_1)] &= -\sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}| Y(\mathbf{v}_1) \\ &\quad \times (\alpha^{-2} b^{-1} - 1) \left[ f^{(0)}(V_2) f_M(V_1) X(\mathbf{V}_1) \right. \\ &\quad \left. + f^{(0)}(V_1) f_M(V_2) X(\mathbf{V}_2) \right] \\ &= \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 f^{(0)}(V_1) f_M(V_2) X(\mathbf{V}_2) \\ &\quad \times \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} < 0} d\hat{\sigma} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}| (b-1) [Y(\mathbf{v}_1) + Y(\mathbf{v}_2)]. \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

Ahora el cálculo de (C.48) y (C.49) es un problema bien definido. Resolver las integrales con la ayuda de las tablas del apéndice B es un problema directo, aunque muy lento, facilitado enormemente con el uso de programas informáticos de cálculo simbólico. Por este motivo, a continuación presentaremos sólo algunos de los pasos intermedios. Consideremos primero  $\nu_\eta$ . Utilizando la ecuación (C.51) en (C.48) se llega a

$$\begin{aligned} \nu_\eta &= -\frac{\sigma^{d-1}}{(d-1)(d+2)n(k_B T)^2} \int d\mathbf{V}_1 \int d\mathbf{V}_2 f^{(0)}(V_1) f_M(V_2) D_{ij}(\mathbf{V}_2) \\ &\quad \times \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} < 0} d\hat{\sigma} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}| (b-1) [D_{ij}(\mathbf{V}_1) + D_{ij}(\mathbf{V}_2)] \end{aligned} \quad (\text{C.52})$$

Se puede realizar la integración del ángulo sólido sobre  $\hat{\sigma}$ , con el resultado

$$\begin{aligned} \nu_\eta &= \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}} (2d+3-3\alpha)(1+\alpha)m\sigma^{d-1}}{2(d-1)(d+2)(d+3)\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right)n(k_B T)^2} \int d\mathbf{V}_1 \int d\mathbf{V}_2 f^{(0)}(V_1) \\ &\quad \times f_M(V_2) D_{ij}(\mathbf{V}_2) g_i g_j. \end{aligned} \quad (\text{C.53})$$

El paso siguiente consiste en cambiar a las variables relativas y de centro de masas,  $\mathbf{g} = \mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2$  y  $\mathbf{G} = (\mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_2)/2$ , aunque primero es conveniente darse cuenta que se puede escribir

$$D_{ij}(\mathbf{V}_2) g_i g_j = m \left[ (\mathbf{G} \cdot \mathbf{g})^2 - \frac{1}{d} G^2 g^2 - \frac{d-1}{d} (\mathbf{G} \cdot \mathbf{g}) g^2 + \frac{d-1}{4d} g^4 \right]. \quad (\text{C.54})$$

Finalmente, utilizando el método descrito en el apéndice B para resolver las integrales multidimensionales, se obtiene

$$\nu_\eta = \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}} n \sigma^{d-1}}{d(d+2)\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{k_B T}{m}\right)^{1/2} (3 - 3\alpha + 2d)(1 + \alpha) \left(1 - \frac{1}{32} a_2\right). \quad (\text{C.55})$$

Podemos utilizar el mismo procedimiento para calcular  $\nu_\kappa = \nu_\mu$ , con el resultado

$$\begin{aligned} \nu_\kappa = \nu_\mu &= -\frac{2m\sigma^{d-1}}{d(d+2)n(k_B T)^3} \int d\mathbf{V}_1 \int d\mathbf{V}_2 f^{(0)}(\mathbf{V}_1) f_M(\mathbf{V}_2) \\ &\quad \times \mathbf{S}(\mathbf{V}_2) \cdot \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} < 0} d\hat{\sigma} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}| (b-1) [\mathbf{S}(\mathbf{V}_1) + \mathbf{S}(\mathbf{V}_2)] \\ &= \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}} (1 + \alpha) m^2 \sigma^{d-1}}{d(d+2)(d+3)\Gamma(\frac{d+3}{2}) n(k_B T)^3} \int d\mathbf{V}_1 \int d\mathbf{V}_2 f^{(0)}(\mathbf{V}_1) f_M(\mathbf{V}_2) \\ &\quad \times \mathbf{S}(\mathbf{V}_2) \cdot \left[ \frac{d+1 - (d+5)\alpha}{2} g^3 \mathbf{G} + (2d+3 - 3\alpha) g(\mathbf{G} \cdot \mathbf{g}) \mathbf{g} \right] \\ &= \frac{8\pi^{\frac{d-1}{2}} n \sigma^{d-1}}{d(d+2)\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{k_B T}{m}\right)^{1/2} (1 + \alpha) \left[ \frac{d-1}{2} + \frac{3}{16} (8+d)(1-\alpha) \right. \\ &\quad \left. + \frac{4+5d-3(4-d)\alpha}{512} a_2(\alpha) \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.56})$$

### C.3 LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN $f^{(1)}$

En la primera aproximación de Sonine descrita en la sección C.2, la función de distribución en el orden de Navier-Stokes tiene la forma

$$f^{(1)}(\mathbf{V}) = \left[ \mathbf{S}(\mathbf{V}) \cdot (c_T \nabla \ln T + c_n \nabla \ln n) + c_u D_{ij}(\mathbf{V}) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] f_M(\mathbf{V}). \quad (\text{C.57})$$

Se pueden expresar los coeficientes  $c_T$ ,  $c_n$  y  $c_u$  en términos de los coeficientes de transporte utilizando las ecuaciones (C.28), (C.34) y (C.35),

$$\begin{aligned} \eta &= -\frac{1}{d^2 + d - 2} \int d\mathbf{V} D_{ij}(\mathbf{V}) C_{ij}(\mathbf{V}) \\ &= -\frac{c_u}{d^2 + d - 2} \int d\mathbf{v} f_M(\mathbf{V}) D_{ij}(\mathbf{V}) D_{ij}(\mathbf{V}) \\ &= -c_u n (k_B T)^2, \end{aligned} \quad (\text{C.58})$$

$$\begin{aligned}
\kappa &= -\frac{1}{dT} \int dV S(V) \cdot \mathcal{A}(V) \\
&= -\frac{c_T}{dT} \int dV f_M(V) S(V) \cdot S(V) \\
&= -c_T \frac{d+2}{2} \frac{n k_B}{m} (k_B T)^2,
\end{aligned} \tag{C.59}$$

$$\begin{aligned}
\mu &= -\frac{1}{dn} \int dV S(V) \cdot \mathcal{B}(V) \\
&= -\frac{c_n}{dn} \int dV f_M(V) S(V) \cdot S(V) \\
&= -c_n \frac{d+2}{2m} (k_B T)^3.
\end{aligned} \tag{C.60}$$

De esta manera podemos escribir la función  $f^{(1)}$  como

$$\begin{aligned}
f^{(1)}(V) &= -\frac{1}{n(k_B T)^3} \left[ \frac{2m}{d+2} S(V) \cdot (\kappa \nabla T + \mu \nabla n) \right. \\
&\quad \left. + (k_B T) \eta D_{ij}(V) \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] f_M(V),
\end{aligned} \tag{C.61}$$

donde  $S(V)$  y  $D_{ij}(V)$  están definidos en las ecuaciones (C.36) y (C.26), respectivamente.

## C.4 EXPRESIONES PARA $\zeta^{(2)}$

Las ecuaciones de balance macroscópicas dependen de los gradientes del tensor de presiones y del flujo de calor. Por consiguiente, determinar estos últimos en el primer orden en los gradientes (Navier-Stokes) conlleva contribuciones de segundo orden. Por consistencia, el término fuente en la ecuación de la temperatura debe ser calculado en el segundo orden en los gradientes, esto es, debemos calcular  $\zeta^{(2)}$ . Sin embargo, en esta memoria sólo estamos interesados en las contribuciones de  $\zeta^{(2)}$  que son lineales en los gradientes, pues sólo ellos contribuyen al análisis de estabilidad lineal. Ello requiere calcular la parte  $f_L^{(2)}$  de  $f^{(2)}$  que es lineal en los gradientes. Aún así, no todos los sumandos que constituyen  $f_L^{(2)}$  contribuyen a  $\zeta_L^{(2)}$ , pues muchos contienen vectores o tensores de traza nula que al integrar se anulan. Los detalles del cálculo en dimensión  $d = 3$  se pueden encontrar en la referencia [59]. En dimensión  $d$  el procedimiento es muy similar, y al fin y al cabo no es más que seguir aplicando el método de Chapman-Enskog en el orden dos quedándose en el orden más bajo en Sonine.



Los resultados son

$$\zeta_L^{(2)} = \zeta_1 \nabla^2 T + \zeta_2 \nabla^2 n, \quad (\text{C.62})$$

donde

$$\zeta_1 = \zeta_1^* \frac{2\kappa_0}{dn k_B T}, \quad \zeta_2 = \zeta_2^* \frac{2\kappa_0}{dn^2 k_B}, \quad (\text{C.63})$$

y

$$\begin{aligned} \zeta_1^* &= \kappa^* 3(1 - \alpha^2)(64 + 6a_2) [4 - 2(2 + d)a_2] \left[ -420(2 + d)a_2 - 36(2 + d)a_2^2 \right. \\ &\quad \left. + 3\alpha^2(128 + 140a_2 + 12a_2^2)(2 + d) + 128(-6 - 3d + 32d\nu_3^* - 80d\zeta^*) \right]^{-1} \\ &\simeq \kappa^* 6(1 - \alpha^2) [32 - a_2(29 + 16d)] [96(d + 2)\alpha^2 \\ &\quad - 105(d + 2)(1 - \alpha^2)a_2 + 32(-6 - 3d + 32d\nu_3^* - 80d\zeta^*)]^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{C.64})$$

$$\begin{aligned} \zeta_2^* &= 4 [3(1 - \alpha^2)(32 + 3a_2)(2 - (d + 2)a_2)\mu^* + 1024d\zeta_1^*\zeta^*] \\ &\quad \times \left[ -420(d + 2)a_2 - 36(d + 2)a_2^2 + 3\alpha^2(d + 2)(128 + 140a_2 + 12a_2^2) \right. \\ &\quad \left. + 128(-6 - 3d + 32d\nu_3^* - 64d\zeta^*) \right]^{-1} \\ &\simeq 2 [512d\zeta_1^*\zeta^* + 3\mu^*(1 - \alpha^2)[32 - (29 + 16d)a_2]] [96(d + 2)\alpha^2 \\ &\quad - 105(1 - \alpha^2)(d + 2)a_2 - 32(6 + 3d) + 32d(32\nu_3^* - 64\zeta^*)]^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{C.65})$$

En las dos últimas transformaciones hemos despreciado consistentemente las contribuciones que no son lineales en  $a_2$ . Las funciones adimensionales  $\zeta^*$ ,  $\kappa^*$  y  $\mu^*$  están definidas en la sección 5.3.1, mientras que  $\nu_3^*$  es

$$\begin{aligned} \nu_3^* &= \frac{1 + \alpha}{2048d} [2720 + 1984d - 96(39 + 10d)\alpha + 960\alpha^2 - 960\alpha^3 \\ &\quad + a_2(35 + 34d - 3(33 - 10d)\alpha - 30\alpha^2 + 30\alpha^3)]. \end{aligned} \quad (\text{C.66})$$

## APÉNDICE D

### CÁLCULO DE $\nu_D$ Y $f_s^{(1)}$

En este apéndice detallaremos algunos de los cálculos necesarios para obtener la expresión (6.28) del coeficiente de autodifusión en la primera aproximación de Sonine. También calcularemos la función de distribución en el primer orden del desarrollo de Chapman-Enskog en función del coeficiente de autodifusión y del gradiente de densidad.

Con objeto de evaluar las integrales que involucran el operador de colisión lineal  $\Lambda$  es conveniente utilizar la relación

$$\begin{aligned}
 & \int d\mathbf{v}_1 Y(\mathbf{v}_1) \Lambda[X(\mathbf{v}_1) f_M(\mathbf{v}_1)] \\
 &= \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) Y(\mathbf{v}_1) \\
 & \quad \times \left[ \frac{1}{\alpha^2} X(\mathbf{v}_1^{**}) f_M(\mathbf{v}_1^{**}) f_H(\mathbf{v}_2^{**}) - X(\mathbf{v}_1) f_M(\mathbf{v}_1) f_H(\mathbf{v}_2) \right] \quad (\text{D.1}) \\
 &= \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) X(\mathbf{v}_1) \\
 & \quad \times f_M(\mathbf{v}_1) f_H(\mathbf{v}_2) [Y(\mathbf{v}_1^*) - Y(\mathbf{v}_1)],
 \end{aligned}$$

donde  $\mathbf{v}_1^*$  es la velocidad de la partícula marcada después de la colisión,

$$\mathbf{v}_1^* = \mathbf{v}_1 - \frac{1 + \alpha}{2} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}. \quad (\text{D.2})$$

La ecuación (D.1) no es más que un caso particular de la ecuación (3.27). Haciendo uso de esta relación en la ecuación (6.26) después de aproximar  $B(\mathbf{v})$  por el primer término en el desarrollo en polinomios de Sonine,

$$B(\mathbf{v}) \propto \mathbf{v} f_M(\mathbf{v}), \quad (\text{D.3})$$

se llega a

$$\nu_D = \frac{m\sigma^{d-1}}{nk_B T_H} \frac{1+\alpha}{2d} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 f_M(\mathbf{v}_1) f_H(\mathbf{v}_2) \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma})^2 \hat{\sigma} \cdot \mathbf{v}_1. \quad (\text{D.4})$$

Se puede llevar a cabo fácilmente la integración angular sobre  $\hat{\sigma}$  utilizando el método descrito en el apéndice B:

$$\nu_D = \frac{m\sigma^{d-1}}{nk_B T_H} \frac{1+\alpha}{2d} \frac{\pi^{(d-1)/2}}{\Gamma(\frac{d+3}{2})} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 f_M(\mathbf{v}_1) f_H(\mathbf{v}_2) v_{12} (\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{v}_1). \quad (\text{D.5})$$

Utilizando la expresión (6.7) para  $f_H$ , las integrales que quedan pueden ser transformadas en un producto de integrales gaussianas cambiando a las variables  $\mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$  y  $\mathbf{G} = (\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2)/2$ . En el apéndice B se explica cómo resolver estas integrales. El procedimiento es lento pero directo, con el resultado final

$$\nu_D = \frac{2(1+\alpha)\pi^{(d-1)/2}}{d\Gamma(d/2)} \left(\frac{k_B T_H}{m}\right)^{1/2} n\sigma^{d-1} \left(1 - \frac{\alpha_2(\alpha)}{3^2}\right). \quad (\text{D.6})$$

Sustituyendo esta expresión junto con la ecuación (6.10) en la ecuación (6.27) se obtiene directamente (6.28) y (6.29).

En el primer orden en los gradientes la función de distribución viene dada por la ecuación (6.21), que en la primera aproximación de Sonine toma la forma

$$f_s^{(1)} = c_D f_M(\mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot \nabla n_s. \quad (\text{D.7})$$

El coeficiente  $c_D$  se puede expresar en términos del coeficiente de autodifusión utilizando esta misma ecuación en (6.24),

$$D = -\frac{c_D}{d} \int d\mathbf{v} v^2 f_M(\mathbf{v}) = -\frac{c_D n k_B T_H}{m}. \quad (\text{D.8})$$

Por tanto, la función de distribución en el primer orden en los gradientes es

$$f_s^{(1)} = -\frac{Dm}{nk_B T_H} f_M(\mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot \nabla n_s. \quad (\text{D.9})$$

## APÉNDICE E

### CÁLCULO DE LAS CONDICIONES DE CONTORNO CINÉTICAS

En este apéndice se calcula la condición de contorno que supone una pared para la función de distribución de una partícula  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ .

Consideremos una pared infinita en  $x = L/2$  definida de forma que toda partícula que la atraviesa con velocidad  $\mathbf{v}'$  (por tanto, con  $v'_x > 0$ ) es reintroducida en el sistema con una velocidad  $\mathbf{v}$  (con  $v_x < 0$ ). En general  $\mathbf{v}$  es una velocidad aleatoria que viene dada por una cierta densidad de probabilidad  $P(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ , que también será función de la velocidad incidente  $\mathbf{v}'$ . Esta densidad de probabilidad debe estar normalizada de acuerdo con

$$\int d\mathbf{v} \theta(-v_x) P(\mathbf{v}, \mathbf{v}') = 1, \quad (\text{E.1})$$

donde  $\theta(x)$  es la función escalón.

El número medio de partículas con velocidad  $\mathbf{v}'$  que salen del sistema atravesando un elemento de superficie  $dS$  de la pared durante un intervalo de tiempo  $dt$  será igual a  $dr_{\text{cil}} dv' f(x = L/2, \mathbf{v}', t)$ , donde  $dr_{\text{cil}}$  es el volumen del cilindro formado por las partículas que salen del sistema en ese  $dt$ , esto es,  $dr_{\text{cil}} = dS v'_x dt$ . Por otro lado, estas partículas son reintroducidas en el sistema con la distribución de velocidades  $P(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ ; de forma que el número medio de partículas con velocidad  $\mathbf{v}$  que entran en el sistema a través del mismo  $dS$  durante ese  $dt$ , habiendo salido previamente con velocidad  $\mathbf{v}'$ , será

$$\left( dv' f(x = L/2, \mathbf{v}', t) dS v'_x dt \right) dv P(\mathbf{v}, \mathbf{v}'), \quad \text{con } v_x < 0 \text{ y } v'_x > 0. \quad (\text{E.2})$$

De la misma manera, el número total de partículas con velocidad  $\mathbf{v}$  que entran en el sistema por  $dS$  durante  $dt$  será igual a  $f(x = L/2, \mathbf{v}, t) dv dS |v_x| dt$ . Este número debe coincidir con la expresión que acabamos de calcular (E.2) integrada

sobre todas las velocidades de salida  $v'$  posibles. Despejando se obtiene la condición de contorno cinética que representa la pared en  $x = L/2$ :

$$f(x = L/2, v, t) = \int dv' \vartheta(v'_x) f(x = L/2, v', t) \frac{v'_x}{|v_x|} P(v, v') \quad (v_x < 0). \quad (\text{E.3})$$

En una pared térmica o difusiva se busca que las partículas que entran en el sistema posean la misma distribución de velocidades que tendrían si vinieran de un sistema en equilibrio a una temperatura dada  $T_w$ . Es decir, se busca que la función de distribución sea de Maxwell-Boltzmann en las inmediaciones de la pared:

$$f(x = L/2, v, t) \propto e^{-\frac{mv^2}{2k_B T_w}} \quad \text{para } v_x < 0. \quad (\text{E.4})$$

Si suponemos que la velocidad de entrada no está correlacionada con de la velocidad que tenía la partícula cuando colisionó con la pared, entonces, a partir de la ecuación (E.3),  $P(v, v') \propto |v_x| \exp(-mv^2/2k_B T_w)$ ; y por normalización se obtiene

$$P(v, v') = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d-1}{2}}} \left( \frac{m}{k_B T_w} \right)^{\frac{d+1}{2}} |v_x| e^{-\frac{mv^2}{2k_B T_w}}, \quad (\text{E.5})$$

que es la densidad de probabilidad correspondiente a una pared térmica a la temperatura  $T_w$ .

Consideremos una pared reflectante o elástica. En este caso todas las partículas que colisionan con la pared solamente cambian el signo de la componente  $x$  de su velocidad, es decir,  $v_x = -v'_x$ ,  $v_y = v'_y$  y  $v_z = v'_z$ . De esta manera, la distribución de rebote  $P$  viene dada por

$$P(v, v') = \delta(v_x + v'_x) \delta(v_y - v'_y) \delta(v_z - v'_z). \quad (\text{E.6})$$

Utilizando la ecuación (E.3) se obtiene la condición cinética que supone una pared reflectante en  $x = L/2$ :

$$f(x = L/2, v_x, v_y, v_z) = f(x = L/2, -v_x, v_y, v_z). \quad (\text{E.7})$$

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] H. M. Jaeger y S. R. Nagel, *Science* 255, 1523 (1992).
- [2] C. H. Liu *et al.*, *Science* 269, 513 (1995).
- [3] J. B. Knight *et al.*, *Phys. Rev. E* 51, 3957 (1995).
- [4] E. R. Nowak *et al.*, *Phys. Rev. E* 57, 1971 (1998).
- [5] G. W. Scherer, *Relaxation in Glass and Composites* (Wiley, New York, 1986).
- [6] G. W. Scherer, *J. Non-Cryst. Solids* 123, 75 (1990).
- [7] J. V. Álvarez y F. Ritort, *J. Phys. A* 29, 7355 (1996).
- [8] G. Parisi, M. Picco y F. Ritort, *Phys. Rev. E* 60, 58 (1999).
- [9] J. J. Brey y A. Prados, *Phys. Rev. B* 49, 984 (1994).
- [10] M. Nicodemi y A. Coniglio, *Phys. Rev. Lett.* 82, 916 (1999).
- [11] A. Prados, J. J. Brey y B. Sánchez-Rey, *Physica A* 284, 277 (2000).
- [12] S. F. Edwards y R. B. S. Oakeshott, *Physica A* 157, 1080 (1989).
- [13] S. F. Edwards y D. V. Grinev, *Phys. Rev. E* 58, 4758 (1998).
- [14] J. J. Brey, A. Prados y B. Sánchez-Rey, *Physica A* 275, 277 (2000).
- [15] A. Mehta y S. F. Edwards, *Physica A* 157, 1091 (1989).
- [16] J. B. Knight, H. M. Jaeger y S. R. Nagel, *Phys. Rev. Lett.* 70, 3728 (1993).
- [17] H. M. Jaeger, S. R. Nagel y R. P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* 68, 1259 (1996).



- [18] M. Ammi, D. Bideau y J. P. Troadec, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 20, 424 (1987).
- [19] C. Coulomb, *Mémoires de Mathématique et de Physique présentés à l'Académie Royale des Sciences* 343 (1773).
- [20] J.-P. Bouchaud, M. E. Cates, J. R. Prakash y S. F. Edwards, *Phys. Rev. Lett.* 74, 1982 (1995).
- [21] P. Bak, C. Tang y K. Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* 59, 381 (1987).
- [22] P. Bak, *How nature works: the science of self-organized criticality* (Oxford University Press, Oxford, 1997).
- [23] V. Fette *et al.*, *Nature* 379, 49 (1996).
- [24] M. Kardar, *Nature* 379, 22 (1996).
- [25] O. Reynolds, *Philos. Mag.* 20, 469 (1885).
- [26] *The New Encyclopaedia Britannica*, 15th ed. (Encyclopaedia Britannica, Inc., Chicago, 1994).
- [27] W. Goldsmith, *Impact: the theory and physical behavior of colliding solids* (Edward Arnold Publishers LTD, London, 1960).
- [28] K. L. Johnson, *Contact Mechanics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1989).
- [29] F. G. Bridges, A. Hatzes y D.Ñ. C. Lin, *Nature* 309, 333 (1984).
- [30] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J. Hertzsch y T. Pöschel, *Phys. Rev. E* 53, 5382 (1996).
- [31] T. Schwager y T. Pöschel, en *Friction, Arching, Contact Dynamics*, editado por D. E. Wolf y P. Grassberger (World Scientific, Singapore, 1997), p. 293.
- [32] B. Bernu y R. Mazighi, *J. Phys. A* 4, 5745 (1990).
- [33] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Fluids A* 5, 496 (1992).
- [34] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Rev. E* 50, R23 (1994).
- [35] A. Hatzes, F. G. Bridges, D.Ñ. C. Lin y S. Sachtjen, *Icarus* 89, 113 (1991).
- [36] S. Luding y S. McNamara, *Granular Matter* 1, 113 (1998).

- [37] S. Warr, J. M. Huntley y G. T. H. Jacques, *Phys. Rev. E* **52**, 5583 (1995).
- [38] A. Kudrolli, M. Wolpert y J. P. Gollub, *Phys. Rev. Lett* **78**, 1383 (1997).
- [39] J. S. Olafsen y J. S. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4369 (1998).
- [40] W. Losert *et al.*, *Chaos* **9**, 682 (1999).
- [41] B. Umbanhowar, F. Melo y H. L. Swinney, *Nature* **382**, 793 (1996).
- [42] F. Melo, P. B. Umbanhowar y H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 172 (1994).
- [43] F. Melo, P. B. Umbanhowar y H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3838 (1995).
- [44] M. Faraday, *Philos. Trans. R. Soc. London* **52**, 319 (1831).
- [45] M. Cross y P. C. Hohenberg, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851 (1993).
- [46] C. Bizon *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 57 (1998).
- [47] A. Brahic, en *Granular Gases, Lecture Notes in Physics*, editado por S. Luding y T. Pöschel (Springer, Berlin, 2000).
- [48] H. Salo, en *Granular Gases, Lecture Notes in Physics*, editado por S. Luding y T. Pöschel (Springer, Berlin, 2000).
- [49] B. W. Carroll y D. A. Ostlie, *An Introduction to Modern Astrophysics* (Addison-Wesley, Massachusetts, 1996).
- [50] L. Goldhirsch y G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1619 (1993).
- [51] M. H. Ernst, J. R. Dorfman, W. R. Hoegy y J. M. J. van Leeuwen, *Physica* **45**, 127 (1969).
- [52] J. J. Brey, J. W. Dufty y A. Santos, *J. Stat. Phys.* **87**, 1051 (1997).
- [53] P. Resibois y M. de Leener, *Classical Kinetic Theory of Fluids* (Wiley, New York, 1977).
- [54] R. Evans, *Adv. Phys.* **28**, 143 (1979).
- [55] J. W. Dufty, en *Lectures on Thermodynamics and Statistical Mechanics*, editado por M. L. de Haro y C. Varea (World Scientific, Singapore, 1990), pp. 166-181.
- [56] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross y M. Krook, *Phys. Rev. A* **94**, 511 (1954).



- [57] J. J. Brey, F. Moreno y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* 54, 445 (1996).
- [58] J. W. Dufty, J. J. Brey y A. Santos, *Physica A* 240, 212 (1997).
- [59] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim y A. Santos, *Phys. Rev. E* 58, 4638 (1998).
- [60] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y F. Moreno, *Phys. Rev. E* 55, 1 (1997).
- [61] J. J. Brey y D. Cubero, *Phys. Rev. E* 57, 2019 (1998).
- [62] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y F. Moreno, *Phys. Fluids*, 10, 2976 (1998).
- [63] M. Tij *et al.*, cond-mat/0003374 (sin publicar).
- [64] M. P. Allen y D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids* (Oxford Science, Bristol, 1994).
- [65] G. Bird, *Molecular Gas Dynamics* (Oxford University press, New York, 1976).
- [66] G. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Clarendon press, Oxford, 1994).
- [67] M. Mareschal, U. Krebs y M. M. Mazur, en *Rarefied Gas Dynamics*, editado por J. Harvey y G. Lord (Oxford University Press, Oxford, 1995).
- [68] K. Nanbu, en *Rarefied Gas Dynamics 15*, editado por V. Boffi y C. Cercignani (B. G. Teubner, Stuttgart, 1986), pp. 369–383.
- [69] J. M. Montanero y A. Santos, en *Rarefied Gas Dynamics 19*, editado por J. Harvey y G. Lord (Oxford University Press, Oxford, 1995), pp. 899–905, vol. 2.
- [70] C. Cercignani y S. Cortese, *J. Stat. Phys.* 75, 817 (1994).
- [71] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Phys. Rev. E* 54, 3664 (1996).
- [72] J. J. Brey, D. Cubero y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* 59, 1256 (1999).
- [73] J. J. Brey y D. Cubero, en *Granular Gases, Lecture Notes in Physics*, editado por S. Luding y T. Pöschel (Springer, Berlin, 2000), pp. 59–78.
- [74] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Europhys. Lett.* 48, 359 (1999).
- [75] J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Phys. Rev. E* 60, 3150 (1999).

- [76] J. Ferziger y H. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases* (North-Holland, Amsterdam, 1972).
- [77] A. Goldshtein y M. Shapiro, *J. Fluid Mech.* 282, 75 (1995).
- [78] P. K. Haff, *J. Fluid Mech.* 134, 401 (1983).
- [79] T. P. C. van Noije y M. H. Ernst, *Granular Matter* 1, 57 (1998).
- [80] M. Huthmann, J. A. G. Orza y R. Brito, (2000), cond-mat/0004079, enviado al *Granular Matter*.
- [81] S. E. Esipov y T. Pöschel, *J. Stat. Phys.* 86, 1385 (1997).
- [82] T. P. C. van Noije, Tesis Doctoral, Universiteit Utrecht, Utrecht, 1999.
- [83] M. Krook y T. T. Wu, *Phys. Rev. Lett* 36, 1107 (1976).
- [84] C. S. Campbell, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 22, 57 (1990).
- [85] C. K. W. Lun, S. B. Savage, D. J. Jeffrey y Chepurnyi, *J. Fluid Mech.* 140, 223 (1984).
- [86] J. T. Jenkins y M. W. Richman, *Phys. Fluids* 28, 3485 (1985).
- [87] N. Sela y I. Goldhirsch, *J. Fluid Mech.* 361, 41 (1998).
- [88] P. P. J. M. Schram, en *Kinetic Theory of Gases and Plasmas*, editado por A. V. D. Merwe (Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands, 1991).
- [89] V. Garzó y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* 59, 5895 (1999).
- [90] S. McNamara, *Phys. Fluids A* 5, 3056 (1993).
- [91] L. P. Kadanoff, *Rev. Mod. Phys.* 71, 435 (1999).
- [92] M. L. Tan y I. Goldhirsch, *Phys. Rev. Lett.* 81, 3022 (1998).
- [93] D. M. Gass, *J. Chem. Phys.* 54, 1898 (1971).
- [94] P. Deltour y J. L. Barrat, *J. Phys. I* 7, 137 (1997).
- [95] R. Brito y M. H. Ernst, *Europhys. Lett.* 43, 497 (1998).
- [96] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Rev. E* 53, 5089 (1996).
- [97] B. J. Alder y T. E. Wainwright, *Phys. Rev. Lett.* 18, 988 (1967).
- [98] B. J. Alder y T. R. Wainwright, *Phys. Rev. A* 1, 18 (1970).

- [99] E. J. Alder y W. E. Alley, *Phys. Today* 37, 56 (1984).
- [100] Y. Pomeau y P. Resibois, *Phys. Rep.* 19C, 63 (1975).
- [101] M. H. Ernst, E. H. Hauge y J. M. J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* 25, 1254 (1970).
- [102] J. R. Dorfman y E. G. D. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* 25, 1257 (1970).
- [103] J. R. Dorfman y E. G. D. Cohen, *Phys. Rev. A* 6, 776 (1972).
- [104] W. W. Wood, en *Fundamental Problems in Statistical Mechanics III*, editado por E. G. D. Cohen (North-Holland, Amsterdam, 1975).
- [105] J. J. Brey, *J. Chem. Phys.* 79, 4585 (1983).
- [106] M. A. van der Hoef y D. Frenkel, *Phys. Rev. Lett.* 66, 1591 (1991).
- [107] J. A. Leegwater y G. Szamel, *Phys. Rev. A* 45, 1270 (1992).
- [108] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, D. Cubero y R. Garcia-Rojo, *Phys. Fluids* 12, 876 (2000).
- [109] V. V. R. Natarajan, M. L. Hunt y E. D. Taylor, *J. Fluid Mech.* 304, 1 (1995).
- [110] O. Zik y J. Stavans, *Europhys. Lett.* 16, 255 (1991).
- [111] C. S. Campbell, *J. Fluid Mech.* 348, 85 (1997).
- [112] J. A. McLennan, *Introduction to Non-Equilibrium Statistical Mechanics* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989).
- [113] S. S. Hsiau y M. L. Hunt, *Trans. ASME: J. Heat Transfer* 115, 541 (1993).
- [114] S. B. Savage y R. Dai, *Mech. Mater.* 16, 225 (1993).
- [115] S. Luding *et al.*, *Phys. Rev. E* 50, 4113 (1994).
- [116] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth y A. H. Teller, *J. Chem. Phys.* 21, 1087 (1953).
- [117] N. G. van Kampen, *Stochastic processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, The Netherlands, 1992).
- [118] M. S. Green, *J. Chem. Phys.* 20, 1281 (1952).
- [119] R. Kubo, *Can. J. Phys.* 34, 1274 (1956).

- [120] R. Kubo, M. Toda y N. Hashitsume, *Statistical Physics II* (Springer, Berlin, 1985).
- [121] Y. Du, H. Li y L. P. Kadanoff, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1268 (1994).
- [122] E. L. Grossman, T. Zhou y E. Ben-Naim, *Phys. Rev. E* **55**, 4200 (1997).
- [123] J. J. Brey, D. Cubero, F. Moreno y M. J. Ruiz-Montero, (2000), enviado al *Europhys. Lett.*
- [124] A. Santos, J. J. Brey, C. S. Kim y J. W. Dufty, *Phys. Rev. A* **39**, 320 (1989).
- [125] E. Asmolov, N. Makarev y V. Nosik, *Akad. Nauk. SSSR* **249**, 577 (1979), [*Sov. Phys.-Dokl.* **24**, 892 (1979)].
- [126] J. T. Jenkins y M. W. Richman, *J. Fluid Mech.* **192**, 313 (1988).
- [127] A. Goldshtein y M. Shapiro, *J. Fluid Mech.* **282**, 75 (1996).
- [128] S. Wolfram, *Mathematica, a system for doing mathematics by computer*, second ed. (Addison-Wesley, New York, 1991).

## LISTA DE PUBLICACIONES

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

*Homogeneous cooling state of a low-density granular flow*, J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Phys. Rev. E* 54, 3664 (1996).

*Steady state of a fluidized granular medium between two walls at the same temperature*, J. J. Brey y D. Cubero, *Phys. Rev. E* 57, 2019 (1998).

*High energy tail in the velocity distribution of a granular gas*, J. J. Brey, D. Cubero y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* 59, 1256 (1999).

*On the Validity of Linear Hydrodynamics for Low Density Granular Flows described by the Boltzmann Equation*, J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Europhys. Lett.* 48, 359 (1999).

*Origin of density clustering in a freely evolving granular gas*, J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Phys. Rev. E* 60, 3150 (1999).

*Self-diffusion in freely evolving granular gases*, J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, D. Cubero y R. García-Rojo, *Phys. Fluids* 12, 876 (2000).

*Fourier state of a fluidized granular gas*, J. J. Brey, D. Cubero, F. Moreno y M. J. Ruiz-Montero, enviado al *Europhys. Lett.* (2000)

*Hydrodynamic transport coefficients of granular gases*, J. J. Brey y D. Cubero, en *"Granular Gases, Lecture Notes in Physics"*, editado por S. Luding y T. Pöschel (Springer, Berlin, 2000).

## ÍNDICE ANALÍTICO

- adjunto de un operador, 19  
ángulo sólido, 30, *véase* también  
vector  $\hat{\sigma}$   
total, 139-140  
anillos de Saturno, 12, 14-15  
arcos, *véase* redes de tensiones  
astrofísica, aplicaciones en, 13-15  
autocorrelación de velocidades, función de, 77, 91-97  
autodifusión en el HCS, *véase* HCS,  
autodifusión en el  
autodifusión, coeficiente de, 77, 83,  
84, 89, 90, *véase* también  
autodifusión en el HCS  
autodifusión, ecuación de, 84, 97  
avalanchas, 9  
ángulo de estabilidad marginal  
en las, 9  
ángulo de reposo en las, 9  
balance, ecuaciones de, 24, 36, 51  
BBGKY, jerarquía de ecuaciones,  
22  
Bird, G., 3, 29  
Bird, método de, *véase* método  
DSMC  
Boltzmann, constante de, 11, 22, 33  
Boltzmann, ecuación de, 2, 23-25,  
27, 29, 33  
probabilidad de colisión en el  
marco de la, 29-31  
simulación de la, *véase* método  
DSMC  
Boltzmann, Ludwig E., 2  
Boltzmann-Lorentz, ecuación de,  
79-80  
Burnett, orden de, 2, 52, 53  
en el estado estacionario sin flujos convectivos, 115-120  
Chapman-Enskog, método de, 3, 26  
alrededor del HCS, 52-54, 143-154  
en la autodifusión, 79-84, 155-156  
en el estado estacionario sin flujos convectivos, 117  
*clustering*, *véase* origen de la formación de agregados en el HCS  
coeficiente  $\mu$ , 52  
coeficiente  $a_2$ , 40, 41, 43  
coeficiente de restitución normal, 11  
dependiente de la velocidad, 12  
independiente de la velocidad,  
12, 13, 18  
coeficiente de restitución tangencial, 11

- coeficientes de transporte, 2, 27, 51, 77  
 de Boltzmann, 50-63, 83  
 de Enskog, 54, 89  
 divergencia de los, 77-78
- colapso inelástico, 12-13
- colas de alta velocidad, 47  
 en el HCS, 46-50  
 en el estado estacionario sin flujos convectivos, 123-125
- colisiones binarias, 11, 19
- colisiones inelásticas, 17  
 cambio de energía cinética, 18
- compactación, fenómenos de, 6-8
- condiciones cinéticas de contorno, 100-102, 157-158
- condiciones periódicas de contorno, 59, 66, 88, 89, 106
- conductividad térmica, coeficiente de, 27, 52-53, 103
- contracción diádica, 24
- Coulomb, C., 9
- criticalidad autoorganizada, 9
- Cubero, D., 167
- decaimiento exponencial, *véase* colas de alta velocidad en el HCS
- densidad de probabilidad de  $N$  partículas, 19-21
- densidad numérica de partículas, 22
- densidad numérica de partículas marcadas, 80
- densidad numérica media, 33
- descripción hidrodinámica, validez de la, 2, 3, 58-59, 63, 77, 99-100, 127-129
- desplazamiento cuadrático medio, 78, 84, 86
- dilatación, efecto de, 9-10
- dimensión  $d$  del sistema, 17, 139
- Dinámica Molecular, simulaciones de, 3, 89  
 en el HCS, 44  
 en el régimen lineal alrededor del HCS, 63  
 en la autodifusión, 88-91  
 en la formación de agregados, 64, 65  
 en el estado estacionario sin flujos convectivos, 99, 102, 106, 120
- DSMC, método, 3, 29-33  
 descripción del, 31-32  
 unidades reducidas en el, 33  
 en el HCS, 37-45, 47-50  
 en el régimen lineal alrededor del HCS, 59-63  
 en la autodifusión, 85-88  
 en la formación de agregados, 64-75  
 en el estado estacionario sin flujos convectivos, 99, 101, 106-110, 112-119, 123
- ecuaciones hidrodinámicas, *véase* ecuaciones de Navier-Stokes y orden de Burnett
- Edward, S. F., 7
- Edward, teoría de, 7-8
- efectos de volumen excluido, 24, 33, 112
- Enskog, ecuación de, 24, 37
- Enskog-Lorentz, ecuación de, 89
- escalón, función, *véase* función de Heaviside
- escalas múltiples, método de, 81, 91, 144
- esferas duras, 2, 11-13, 17, 119, 127  
 ley de colisión entre, *véase* colisiones inelásticas

- sección eficaz de, *véase* sección eficaz
- espacio fásico, 18, 19
- contracción del, 21
- estado de enfriamiento homogéneo, *véase* HCS
- estado estacionario sin flujos convectivos, 99-125
- descripción del sistema utilizado en el, 100-102
- aproximación de Navier-Stokes en el, 102-110
- escalamientos en el, 110-112
- identificación de la región normal en el, 112-115
- hidrodinámica más allá de Navier-Stokes en el, 115-120
- región de presión constante en el, 106, 118, 120-125
- ley de Fourier en el, *véase* ley de Fourier
- event driven*, algoritmo, 89
- experimentos, 6-9, 11-14, 50, 75, 78, 100
- Faraday, estructuras de, 13
- Faraday, M., 13
- Fick, ley de, 80, *véase* también ecuación de autodifusión
- fluido granular, *véase* régimen de flujo rápido
- fluidos moleculares, 1, 10, 11, 13, 26, 29, 47, 50, 58, 63, 78, 80, 100, 107, 129
- flujo de calor, 24-25
- en el orden de Navier-Stokes, 52
- flujo de partículas marcadas, 80
- formación de agregados, 15, *véase* también origen de la formación de agregados en el HCS
- Fourier, ley de, 100, 121-122
- Fourier, transformada de, 55
- con una geometría unidimensional, 59
- frecuencia de colisión, 25, 30, 54, 85, 102
- función de distribución, 22
- de equilibrio local, 26
- en el HCS, *véase* la función de distribución en el HCS
- en el orden de Navier-Stokes, 152-153
- en la autodifusión, 79, 156
- en el estado estacionario sin flujos convectivos, 107, 120-125
- función de distribución de  $N$  partículas, *véase* densidad de probabilidad de  $N$  partículas
- función de distribución monoparticular, *véase* función de distribución
- funciones de distribución reducidas, 21
- gamma, función, 139
- Gibbs, colectivo de, 19
- Green-Kubo, fórmula de, 96
- Haff, ley de, 37, 38, 41, 54
- HCS, 3, 26, 35
- la función de distribución en el, 36-50, 80
- cuarto cumulante en el, *véase* coeficiente  $a_2$
- la marginal en el rango de velocidades térmicas, 40, 44-45



- la marginal en el rango de velocidades térmicas, 39
- colas de alta velocidad en él, *véase* colas de alta velocidad
- estabilidad del, 54-58
- validez de la hidrodinámica lineal alrededor del, 58-63
- origen de la formación de agregados en él, 63-75
- autodifusión en él, 77-97, 155-156
- autocorrelación de velocidades en él, *véase* función de autocorrelación de velocidades
- Heaviside, función de, 30, 101, 140, 157
- hipótesis de caos molecular, 3, 23, 24, 30, 37, 77, 78
- inestabilidad en densidad, 58, 63, *véase* también origen de la formación de agregados en el HCS
- integrales gaussianas, 140-142
- Kadanoff, L., 99
- Kepler, conjetura de, 6
- Kepler, J., 6
- Knudsen, capa de, 107, 115
- Knudsen, número de, 143
- límite cuasielástico, 19, 51, 108, 123
- Laguerre, polinomios generalizados de, 40
- Liouville, ecuación de pseudo, 21
- Markov, proceso de, 91
- materiales granulares
- aplicaciones de los, 1, 7, 9, 13
- definición de los, 5
- efectos térmicos en los, 10
- experimentos de, *véase* experimentos
- histéresis en los, 6, 13
- interacciones en los, 5, 10, 11, 13, 15, 17
- secos, no cohesivos, 5
- Maxwell, moléculas de, 2-3, 119, 122
- Maxwell-Boltzmann, distribución de, 81, 150, 158
- modelo BGK, *véase* modelos cinéticos
- modelos cinéticos, 25-27, 103, 117, 119
- modos hidrodinámicos, *véase* estabilidad del HCS
- Monte Carlo, simulaciones de, *véase* método DSMC
- Navier-Stokes, ecuaciones de, 1, 50-52, *véase* también coeficientes de transporte
- linealizadas alrededor del HCS, 55
- en el estado estacionario sin flujos convectivos, 102-106
- Navier-Stokes, orden de, 52, *véase* también ecuaciones de Navier Stokes
- operador de colisión binaria, 20, 21, 132-135
- operador de colisión de Boltzmann, 23
- operador de evolución libre, 131-132
- operador de evolución temporal, 19-21, 132-137

- parámetro de uniformidad, 81, 143  
 parámetro de impacto, 18, 31  
 pared reflectante, 101, 102, 113, 158  
 pared térmica difusiva, 99, 100, 158  
 pared vibrante, 100, 123  
 planetesimales, 15  
 Poincaré, H., 13
- régimen de flujos rápidos, 1, 10-15,  
 50, 129
- recorrido libre medio efectivo, 33
- redes de tensiones, 8-9
- región normal, 111-112, *véase tam-*  
*bién* identificación de la re-  
 gión normal
- retos matemáticos del milenio, 1
- Reynolds, O., 9
- salto de temperatura en las cerca-  
 ñas de las paredes, 105
- sección eficaz, 31, 33
- segregación, fenómeno de, 7-8
- separación de escalas, 2, 58, 79, 96-  
 97
- simulaciones por ordenador, *véase*  
 método DSMC y simula-  
 ciones de Dinámica Mole-  
 cular
- sistema solar, 15
- solapamiento, función de, 20
- solución normal, 38, 43, 52, 58, 78,  
 80, 95, 100, 105, 107, 111,  
 112, 115, 119, 120
- Sonine, polinomios de, 40
- Sonine, primera aproximación de,  
 54, 61, 83, 93
- sumidero, término de, 25, 51, 53  
 en el orden de Burnett, 53,  
 153-154
- temperatura granular, 10-11, 22
- tensor de presiones, 24  
 en el orden de Navier-Stokes,  
 52  
 en el estado estacionario sin flu-  
 jos convectivos, 117  
 anisotropía del, 100, 107, 117
- teoría cinética, 2, 29, 51, 127
- tiempo medio entre colisiones, 32,  
 36
- variables espaciales adimensionales,  
 54, 85, 102, 106, 109, 119
- variables hidrodinámicas, 1, 22
- variables temporales adimensiona-  
 les, 54, 57, 85, 94
- vector  $\hat{\sigma}$ , 17-18, 30  
 integrales sobre el, 140
- velocidad de enfriamiento, 51, *véase*  
*también* término de sumi-  
 dero
- velocidad macroscópica, 11, 22
- velocidad térmica, 36
- vidrios, analogías con, 7
- viscosidad tangencial, coeficiente  
 de, 52-53, 61
- vorticidad, 56  
 crecimiento de la, 55-56, 64-  
 65, 73

COMITÉ DE INVESTIGACIÓN DE LA ESCUELA

Resolución de 27 de marzo de 1968, en virtud de la cual se constituye el Comité de Investigación de la Escuela de Ingeniería Industrial.

DAVID CUBERO GOMEZ

ÁREA: HIDRODINAMICA DE LOS MEDIOS GRANULARES  
DILUIDOS

(POR UNANIMIDAD) SOBRESALIENTE ACUMULADO

Fecha: 30 de MARZO

~~Richard Brito~~  
RICHARDO BRITO  
El Presidente

~~El Secretario~~  
El Secretario

El Vocal  
El Vocal

DAVID JOV

M<sup>a</sup> JOSÉ RUIZ

DAVID USIBO S