

TS-210

Q.12.394

**Hidrodinámica y ruptura espontánea de simetría  
en fluidos granulares**

R. 12.394

## TESIS DOCTORAL

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



UNIVERSIDAD DE SEVILLA



600066032

por

Ramón García Rojo

12537592

Dirigida por:

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

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

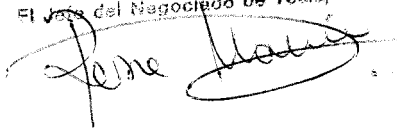


UNIVERSIDAD DE SEVILLA  
SECRETARIA GENERAL

Queda registrada esta Tesis Doctoral  
al folio 063 número 205 del libro  
Correspondiente.

Sevilla, 20-12-2002

El Jefe del Negociado de Tesis,



TS-210

Q.12.394

**Hidrodinámica y ruptura espontánea de simetría  
en fluidos granulares**

---

Impreso en Sevilla en Noviembre del año 2002.

Este trabajo ha sido posible gracias a una beca de Formación del Personal Investigador del Ministerio de Educación y Cultura, en la convocatoria de 1997, además de las contribuciones económicas de los proyectos de la DGICYT PB95-0534 y PB98-1124.

A Lidia.

# Índice General

Agradecimientos	1
<b>1 Introducción y objetivos</b>	<b>3</b>
1.1 Los medios granulares . . . . .	3
1.2 Breve fenomenología de los medios granulares . . . . .	4
1.3 Hidrodinámica de los medios granulares . . . . .	7
1.4 Otros ejemplos de la no-linealidad . . . . .	11
1.5 Utilidad de la simulación por ordenador . . . . .	12
1.6 Objetivos . . . . .	13
<b>2 Descripción hidrodinámica</b>	<b>15</b>
2.1 El modelo de esferas duras inelásticas . . . . .	16
2.2 Ecuaciones hidrodinámicas . . . . .	18
<b>3 Estudio de una partícula marcada</b>	<b>25</b>
3.1 Autodifusión en el HCS . . . . .	26
3.1.1 Solución de Chapman-Enskog . . . . .	26
3.1.2 Resultados de Dinámica Molecular . . . . .	33
3.2 Movimiento browniano . . . . .	37
3.2.1 Descripción del movimiento de la partícula browniana en un gas granular . . . . .	38
3.2.2 Ecuación de Fokker-Planck escalada . . . . .	42
3.2.3 Simulación de una partícula browniana inmersa en un gas granular . . . . .	46

3.3	Conclusiones . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Medios vibrados en ausencia de gravedad</b>	<b>55</b>
4.1	Descripción hidrodinámica . . . . .	58
4.2	Condiciones de contorno . . . . .	63
4.3	Conclusión . . . . .	65
<b>5</b>	<b>Ruptura espontánea de simetría</b>	<b>67</b>
5.1	Mecanismos de la asimetría . . . . .	71
5.2	Resultados de simulación . . . . .	73
5.3	Descripción hidrodinámica . . . . .	75
5.4	Sistema con tres compartimentos . . . . .	79
5.5	Conclusión . . . . .	86
<b>6</b>	<b>Inestabilidades transversales</b>	<b>87</b>
6.1	El estado de referencia . . . . .	88
6.2	Análisis de estabilidad marginal . . . . .	90
6.2.1	Curva de estabilidad . . . . .	96
6.3	Resultados de simulación . . . . .	99
6.4	Comparación con resultados precedentes . . . . .	106
6.5	Conclusión . . . . .	107
<b>7</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>109</b>
<b>A</b>	<b>Algoritmos de simulación</b>	<b>111</b>
A.1	¿Por qué simulamos mediante ordenador? . . . . .	112
A.2	Dinámica Molecular de esferas duras . . . . .	113
A.3	Algoritmo de Allen-Tiendesley . . . . .	116
A.3.1	Operaciones básicas . . . . .	116
A.3.2	Condiciones de contorno . . . . .	119
A.3.3	Limitación del algoritmo . . . . .	120



A.4	Algoritmo de Lubachevsky . . . . .	121
A.4.1	Organización de los datos . . . . .	124
A.4.2	Operaciones básicas . . . . .	126
A.4.3	Reticulado . . . . .	128
A.4.4	Colisiones triples . . . . .	130
A.4.5	Descripción del programa . . . . .	131
A.5	Comparación de los algoritmos de simulación empleados . . . . .	134
<b>B</b>	<b>El gas de discos duros inelásticos</b>	<b>137</b>
B.1	Fenomenología . . . . .	139
B.1.1	Control de las inestabilidades en el gas . . . . .	140
B.1.2	Régimen Cinético: Estado de enfriamiento homogéneo (HCS) . . . . .	142
B.1.3	Región de flujo tangencial . . . . .	147
B.1.4	Formación de agregados . . . . .	148
B.1.5	Colapso inelástico . . . . .	150
<b>C</b>	<b>Ecuación de Boltzmann-Enskog-Lorentz</b>	<b>151</b>
C.1	Término de colisión . . . . .	153
<b>D</b>	<b>Cálculo de <math>\nu_D</math> y <math>f_s^{(1)}</math></b>	<b>157</b>
<b>E</b>	<b>Partícula browniana en un gas granular</b>	<b>159</b>
E.1	Derivación de la ecuación de Fokker-Planck . . . . .	159
E.1.1	Expansión del operador de Boltzmann-Lorentz . . . . .	159
E.1.2	Estado de enfriamiento homogéneo . . . . .	160
E.1.3	Límite de validez de la ecuación . . . . .	162
E.2	HCS de la browniana . . . . .	163
E.3	Ecuaciones de evolución de los campos hidrodinámicos . . . . .	164
E.3.1	Velocidad . . . . .	164
E.3.2	Temperatura . . . . .	165

E.3.3 Campos hidrodinámicos . . . . .	166
<b>F Intercambio energético con la pared vibrante</b>	<b>169</b>
F.1 Cálculo de la potencia suministrada por la pared . . . . .	169
F.2 Potencia disipada en el fluido granular . . . . .	170
F.2.1 Sistema con dos compartimentos . . . . .	171
F.2.2 Sistema con tres compartimentos . . . . .	173
<b>G Aproximación WKB</b>	<b>175</b>
G.1 Fórmulas de conexión . . . . .	177
G.2 Resolución de la ecuación (6.28) . . . . .	180
G.2.1 Solución oscilatoria . . . . .	180
G.2.2 Solución exponencial . . . . .	181
G.2.3 Cambio de signo. . . . .	183

# Índice de Figuras

1.1	Distribución de esfuerzos en un montón de arena en reposo . . . . .	5
1.2	Diagrama de fase granular . . . . .	11
2.1	Variación de la velocidad relativa en la colisión. . . . .	17
3.1	Enfriamiento de un gas granular en el HCS . . . . .	34
3.2	Medidas de la pendiente reducida del recorrido cuadrático medio	35
3.3	Comparación de la predicción teórica con los resultados de simulación . . . . .	36
3.4	Evolución temporal del recorrido cuadrático medio de la browniana . . . . .	47
3.5	Evolución temporal de la temperatura de la browniana frente a la del gas . . . . .	48
3.6	Valor asintótico del cociente de temperaturas . . . . .	50
3.7	Carácter gaussiano del estado de la browniana . . . . .	51
3.8	Variación del coeficiente de difusión con la inelasticidad . . . . .	51
4.1	Esquema del sistema vibrado . . . . .	57
4.2	Temperatura en la variable escalada . . . . .	61
4.3	Movimiento de la pared vibrante . . . . .	63
4.4	Instantánea de la simulación del sistema descrito . . . . .	66
5.1	Experimento de Schlichting y otros [1] . . . . .	68
5.2	Esquema del modelo monodimensional . . . . .	69
5.3	Simulación del modelo simplificado . . . . .	71

5.4	Experimento de Eggers . . . . .	72
5.5	Geometría del experimento sin gravedad . . . . .	73
5.6	Diagrama de bifurcación . . . . .	75
5.7	Variación de la presión con $\xi_m$ . . . . .	77
5.8	Perfiles hidrodinámicos en un medio granular vibrado sin campo . . . . .	78
5.9	Geometría del sistema con tres compartimentos . . . . .	80
5.10	Sistema con 900 partículas . . . . .	81
5.11	Sistema con 500 partículas . . . . .	82
5.12	Diagrama de bifurcación . . . . .	85
6.1	Esquema del dispositivo experimental . . . . .	89
6.2	Curva de estabilidad marginal . . . . .	98
6.3	Condición estacionaria de $\rho_x(y)$ . . . . .	101
6.4	Estado estacionario transversalmente homogéneo . . . . .	102
6.5	Detalles del perfil de densidad en el estado homogéneo . . . . .	102
6.6	Aparición de la inestabilidad transversal . . . . .	103
6.7	Detalles del perfil de densidad inhomogéneo . . . . .	103
6.8	Formación de un agregado . . . . .	104
6.9	Transición al estado inhomogéneo . . . . .	105
6.10	Parámetro de orden $ f_1 $ . . . . .	105
A.1	Radio de corte para la creación de una lista de vecinos . . . . .	115
A.2	Condiciones periódicas de contorno. . . . .	119
A.3	Limitación de las condiciones periódicas de contorno. . . . .	120
A.4	División de la celda unidad en subceldas . . . . .	123
A.5	Diagrama de flujo del algoritmo . . . . .	132
A.6	Variación de la duración con la densidad . . . . .	134
A.7	Variación de la duración con el número de partículas . . . . .	135
B.1	Ejemplo de configuración inicial . . . . .	140
B.2	Cuarto momento de la distribución . . . . .	145

B.3	Desarrollo de inestabilidades en un gas libre . . . . .	147
B.4	Régimen de flujos tangenciales . . . . .	148
B.5	Formación de agregados en el gas . . . . .	149
F.1	Dependencia funcional de la potencia disipada . . . . .	173

# Agradecimientos

Me resultaría imposible en este momento no recordar a los que, de una otra forma, han hecho posible la realización de este trabajo. Pero, puesto que el espacio disponible es ciertamente finito, sólo podré mencionar a algunos de ellos, en los que concentraré sin embargo mi más sincera y pura gratitud.

Si hubiese de elegir algún personaje clave en mi formación como científico, ése sería sin duda alguna Don José Javier Brey Abalo, al que quiero agradecer muy particularmente su apoyo, comprensión y dedicación; no me cabe la menor duda de que sin él no habría sido posible la realización de este trabajo. Es justo reconocer la gran labor que realiza como investigador y docente. En este sentido, estoy convencido de no ser el único en sentirme orgulloso de ser alumno suyo. También quiero dar especialmente las gracias a Doña María José Ruiz Montero por el esfuerzo dedicado y por el tiempo que me ha prestado. Sus indicaciones y consejos han sido siempre una estupenda guía para mi trabajo.

Imposible dejar de mencionar en este apartado a mis compañeros Antonio Prados y David Cubero. Ni tampoco a mi amigo Paco Moreno al que tantas tardes le he tenido que dar la espalda (y espero que me perdone por ello), pero al que guardaré siempre no sólo en el recuerdo sino sobre todo en el corazón.

Al Profesor Stephan Luding quiero agradecer sinceramente su permanente apoyo, su aprecio y el haberme enseñado más de un truco que ha resultado de suma utilidad en la realización de este trabajo.

A mi familia debo todo lo que soy. A mi hermana Lidia quiero agradecerle el haberme enseñado a luchar; luchar contra el destino cuando no es el que nos merecemos. Me ha ayudado a mirar la vida cara a cara y a aprender a ser un poco más libre. Marcial ha sido desde mi niñez el mejor modelo a seguir. Carmen, la mejor hermana del mundo. Y Remedios, la amiga confidente que todos deseamos tener. Sobre todo estoy en deuda con mis padres, Marcial y Lidia, que me dan cada día un ejemplo y una lección de entereza, inteligencia, sentido común y honestidad. Valores que han sabido marcar en nosotros de forma sutil pero vigorosa. El cariño y la comprensión que me brindan es ciertamente un tesoro que quiero guardar con todas mis fuerzas. A todos ellos, descendencia incluida, quiero agradecerles su apoyo y el tiempo que les he robado con mis agobios, malos humores y desplantes. Espero poder compensarlo de la mejor manera posible.

A los que han pasado a mi lado en estos años y que ahora revolotean en mi recuerdo (especialmente a Kate y a Santi, a los que tantas veces les he dado la lata últimamente): Gracias de todo corazón por los momentos compartidos.

# Capítulo 1

## Introducción y objetivos

### 1.1 Los medios granulares

Un material granular es una colección de partículas macroscópicas (es decir, de tamaño superior a una micra) cuyas interacciones son típicamente disipativas. Existen muchos tipos de medios granulares, siendo posible una caracterización de los mismos de acuerdo con el medio que los acoge, el tamaño del grano o su naturaleza. Podemos distinguir entre sistemas granulares cohesivos y no cohesivos, según que los granos tiendan a permanecer unidos entre sí o se muevan libremente entre las colisiones. Por otro lado, si el medio intersticial que lo rodea es un líquido, se dice que se trata de un medio granular mojado, mientras que se denomina seco cuando dicho medio es el aire o el vacío. En el caso de los medios no-cohesivos, las únicas fuerzas internas en el material son las repulsivas entre los granos, y su forma viene impuesta por la del contenedor en el que se alojan, análogamente a lo que ocurre con los fluidos. Existen abundantes ejemplos de este tipo de sistemas en la vida cotidiana: el detergente en polvo, la arena de playa, los cereales, la grava, muchos productos farmacéuticos, etc ...

Nuestro entorno más cercano está repleto de materiales granulares, por lo que no es de extrañar que sean profusamente estudiados desde diversos campos del conocimiento, que van desde la física teórica a la ingeniería, pasando por la geología o la geofísica, sin olvidar sus diversas aplicaciones en la industria reprográfica, la farmacéutica o la alimenticia. La necesidad de transportar granos, crear nuevos materiales de construcción, nuevos productos de consumo, o simplemente de construir contenedores seguros para los materiales granulares, ha dado lugar a la aparición de una verdadera *tecnología de polvos* [2], basada casi exclusivamente, hasta hace bien poco tiempo, en el método de prueba y error.

Si bien todos estos materiales le han planteado desde su origen problemas cotidianos de todo tipo a la Humanidad, la intervención de los físicos ha sido relativamente tardía. Aunque nombres sobresalientes en la Historia de la Ciencia, como Newton, Coulomb, Faraday o Reynolds, estén relacionados con el estudio de la arena o los granos y su caracterización, ha sido en las pasadas dos décadas cuando el interés por problemas relacionados con los medios granulares ha resurgido con un empuje enorme, siendo en estos momentos la física teórica un nuevo foco de actividad en el campo. A ello han contribuido enormemente la aparición de modelos simples muy efectivos, y susceptibles de ser comprobados y mejorados gracias a la realización de simulaciones con ordenador. Resulta particularmente atractivo el estudio de estos sistemas debido a que los ejemplos más sencillos de materiales granulares muestran comportamientos singulares que, a criterio de diversos autores, la sitúan en una región intermedia entre el estado sólido y el líquido, según que los granos se encuentren en reposo o en movimiento rápido. El campo de estudio es vasto y está repleto de gran cantidad de fenómenos tan sorprendentes como complejos, así como faltos, en la mayoría de las ocasiones, de una explicación satisfactoria. A continuación presentaremos algunos ejemplos de estos fenómenos y acotaremos la parte del problema que se pretende estudiar en esta memoria: los medios granulares secos diluidos no cohesivos. Presentaremos de igual modo las herramientas empleadas para su estudio. Por un lado, la hidrodinámica granular, cuya eficacia para la descripción de gran número de los fenómenos que acontecen en estos medios la convierten en la construcción teórica más adecuada. Por otro, la simulación mediante ordenador de modelos sencillos de medios granulares. Ambas serán aplicadas conjuntamente a lo largo de este trabajo, primero a un ejemplo sencillo de difusión en un fluido granular, para posteriormente abordar fenómenos más complejos en sistemas vibrados que llevan asociados una ruptura espontánea de simetría.

### 1.2 Breve fenomenología de los medios granulares

Bajo la, en principio, sencilla apariencia de un medio granular estático existen gran cantidad de fenómenos y comportamientos ciertamente singulares. Como primer ejemplo básico de ello podemos citar el hecho de que en un silo la distribución de presión no sigue una ley de tipo hidrostático. En un silo de 20 metros de alto y 2 de diámetro, la hidrostática predice una presión en el fondo del orden de dos atmósferas (si consideramos la densidad de los granos similar a la del agua, lo que no es muy descabellado). El valor que se obtiene al medirla es, sin embargo, unas diez veces menor. Este fenómeno fue analizado por Janssen [3], quien se dio cuenta de que el peso es transmitido por las paredes



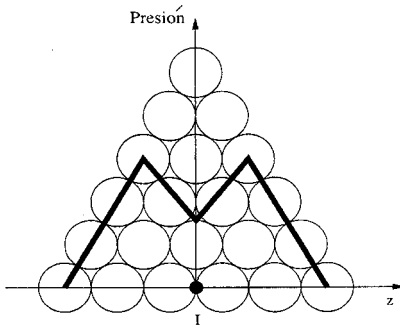


Figura 1.1: La explicación más sencilla a esta distribución de carga asume la relación de las presiones propuesta por Janssen en cada punto del montón de arena. Esto implica que la carga no se transmite verticalmente, sino en direcciones privilegiadas. Superponiendo de esta forma las contribuciones de los granos, se llega a un perfil que no es máximo en el centro (punto I), como cabría pensar, sino que tiene la forma indicada con la línea gruesa.

laterales del silo, con la consecuente disminución de presión en el fondo. En base a ello, propuso un modelo sencillo, según el cual la tensión promedio en el plano horizontal es proporcional a la tensión vertical. En lo que se refiere al contacto con las paredes, asumió una fricción estática. Con ello llegó al resultado de que la presión alcanza un valor de saturación en el fondo del silo, de modo que al ir descendiendo en el grano almacenado, el peso que deben aguantar las capas inferiores aumenta hasta un valor dado de la distancia a la superficie, a partir del cual la presión permanece prácticamente constante. Ideas similares, basadas en razonamientos *ad hoc* se pueden emplear para tratar de explicar por qué la distribución de peso en un montón de arena en reposo sobre una superficie plana no es máxima en su parte central, como cabría pensar en un principio [4], sino que presenta una distribución más compleja, como se muestra esquemáticamente en la Figura 1.1.

Los resultados experimentales parecen indicar que los esfuerzos en un medio granular se distribuyen de manera muy heterogénea, formando cadenas a lo largo de las cuales la tensión parece ser particularmente intensa [5, 6, 7]. Esto puede comprobarse de manera sencilla, sin más que disponer un trozo de papel de carbocillo en el fondo del contenedor con los granos y medir el área de la marca dejada por las fuerzas ejercidas sobre él [8]. Estas redes de tensiones desempeñan un importante papel en las propiedades mecánicas y, sobre todo, en la manera en que estos medios transmiten las vibraciones sonoras. Los movimientos se transmiten por contacto entre granos y esta propagación del

movimiento está estrechamente ligada a la red de tensiones. Cuando se hace vibrar al material con una amplitud suficientemente débil los movimientos se propagan en forma de una leve señal acústica, como ocurre en la mayoría de los sólidos y líquidos, sin modificación de la estructura del medio. Pero en un medio granular, el sonido se propaga mejor a través de las líneas que unen las partículas en contacto, que constituyen pistas por las que la excitación viaja mucho más eficazmente. Si los granos apenas se tocan, la transmisión del movimiento resulta difícil y la velocidad del sonido es baja. En cambio, cuando los granos están comprimidos, esta velocidad aumenta. Veamos una llamativa consecuencia de este reparto de tensiones. En un recipiente lleno de granos, lejos de los bordes y del fondo (es decir, lejos de la zona de saturación de la presión), donde los rozamientos son importantes, la presión debida al peso es mayor al aumentar la profundidad. La velocidad del sonido aumenta, por lo tanto, con la profundidad. Si se emite una onda acústica en la dirección horizontal, ésta se propagará más rápidamente en la parte inferior, por lo que la onda emitida no tardará en girarse para propagarse verticalmente, creando un sorprendente efecto de espejismo sonoro [9].

Otro aspecto fundamental de la estática de un medio granular es su grado de compactación o empaquetamiento. Dependiendo del procedimiento que se use para llenar un recipiente de esferas, podemos obtener diversos grados de empaquetamiento [10]. Por la naturaleza del sistema, el paso del sistema de un estado de compactación a otro sólo puede ocurrir por perturbaciones producidas por una fuerza externa, por ejemplo sometiendo al sistema a vibraciones. Para describir el estado de compactación del sistema, se ha propuesto un formalismo que trata de hacer una descripción en cierta medida paralela a la termodinámica convencional [11, 12]. Se desprecia la energía de los granos (ya que los granos no interactúan entre sí, más allá del no solapamiento) y se sustituye el Hamiltoniano por una funcional del volumen. La entropía se define mediante el logaritmo del número de estados accesibles al sistema a volumen fijo y se introducen otras magnitudes termodinámicas de manera análoga a como se hace en la termodinámica ordinaria. En particular, en lugar de  $k_B T$ , se introduce una temperatura efectiva dada por la compacidad del material. En estas ideas se fundamenta la denominada termodinámica granular, cuya justificación es difícil más allá de proporcionar un tratamiento formal del sistema, especialmente para sistemas reales como un plano inclinado o un sistema vibrado, en los que el volumen no es sencillo de determinar (sobre todo en las capas superiores). Si bien el formalismo parece más o menos intuitivamente correcto para sistemas densos, es claramente no aplicable en el límite de sistemas diluidos, en los que, por otro lado y como veremos posteriormente, es posible un tratamiento del tipo de la teoría cinética.

Las características físicas del medio intersticial que rodea a los granos pueden variar las propiedades del material granular de manera drástica. En

los medios granulares mojados [13] aparecen fenómenos tales como la licuefacción, de los que las arenas movedizas son un ejemplo muy llamativo, o la dilatación, como ocurre al pisar a la orilla del mar la arena mojada: la presión del pie deforma la arena, que se dilata para que el agua escape. La más mínima presencia de humedad en un montón de arena, permite medir cambios cuantitativos en el ángulo de reposo de un montoncillo de arena que lo hacen cualitativamente diferente del mismo montoncillo al sol, unas horas más tarde [14].

Un sistema aparentemente tan sencillo como un montoncillo de arena, del tipo del que se forma en un reloj de arena al ir cayendo por el orificio, ha sido propuesta como paradigma de sistema presentando el fenómeno de criticalidad auto-organizada [15]. Bak y otros autores, trataron de establecer un paralelismo entre lo que sucede para un ángulo próximo al ángulo de reposo en un montón de arena y lo que ocurre en una transición de fase de segundo orden, cerca de la temperatura crítica. Para un ángulo muy pequeño, las avalanchas o fluctuaciones en la forma del montoncillo son microscópicas, de la misma manera que las influencias entre los momentos magnéticos tienen un alcance muy corto en un material ferromagnético a alta temperatura. Cuando el ángulo aumenta, las avalanchas son cada vez más extensas, similarmente al aumento del alcance de las correlaciones en el sistema magnético al reducirse la temperatura. El término auto-organizada, hace referencia al hecho de que el montón de arena adquiere su ángulo de reposo espontáneamente; situación que escapa a la analogía con el sistema magnético, que no se sitúa por sí solo en la temperatura crítica. Se han realizado diversos experimentos para comprobar la validez de esta analogía, de los que se desprende que el tamaño de las avalanchas es siempre del mismo orden de magnitud [16]. Esto parece indicar la existencia no de uno, sino de dos ángulos característicos entre los cuales oscila la pendiente de la superficie de los granos. El montón es efectivamente estable hasta un cierto ángulo máximo  $\Theta_m$ . En cuanto la pendiente rebasa este valor, bien porque se añade más material o por algún otro mecanismo, se produce una avalancha que reduce el ángulo a un valor menor, el ángulo de reposo  $\Theta_r$ . Por ello, el comportamiento de un apilamiento de arena no parece ajustarse a las características de un sistema crítico y resulta poseer unas propiedades más complejas que reducen considerablemente la generalidad esperada inicialmente para el concepto de criticalidad auto-organizada.

### 1.3 Hidrodinámica de los medios granulares

Si consideramos ahora los medios granulares en movimiento, su comportamiento es nuevamente profuso en fenómenos y situaciones que los distinguen claramente de cualquier fluido o sólido convencional. Si la diversidad de

fenómenos granulares mencionados hasta ahora a modo de ejemplo pudiera parecer abrumadora, no son menos el número de los que están asociados al flujo de granos [17]. En esta situación, se producen fenómenos tales como el transporte de sedimentos en ríos, la formación de dunas, la caída de grano en las tolvas y molinos, fenómenos superficiales y movimientos convectivos en medios vibrados y, por supuesto, la segregación de sus elementos.

El estudio sistemático de los medios granulares vibrados arranca con el análisis de los movimientos convectivos hecho por Faraday [18] en 1831, no habiendo decrecido el interés en ese problema desde entonces. Existen evidencias experimentales y resultados de simulación para un medio granular agitado que muestran que en la zona de frontera entre el medio y el contenedor se forma una fina capa de granos que se mueve rápidamente, dando lugar a un flujo convectivo [19, 20, 21]. Esto es muy diferente de lo que ocurre en un fluido convencional, en el que se puede aplicar con éxito la condición de no deslizamiento como condición de contorno en la frontera. Surge entonces la cuestión de cuál es la condición de contorno conveniente para un medio granular confinado [22, 23].

Cuando el material se agita verticalmente, aparecen movimientos convectivos y, lo que es más sorprendente, de ruptura espontánea de la simetría o de segregación, en sistemas polidispersos. Esto es fácil comprobar sin más que tomar un recipiente lleno de canicas o bolas de diferentes tamaños. Tras una agitación del recipiente, podremos comprobar cómo, al contrario de lo que nuestra intuición espera, obtenemos un sistema perfectamente ordenado, en el sentido de que sus componentes se distribuyen por tamaños. Este increíble comportamiento, que pudiera parecer curioso pero sin relevancia práctica, es razón cada día de multitud de problemas para profesionales de empresas en todo el mundo que deben adaptar sus procesos productivos o la presentación de sus productos al caprichoso comportamiento del material con el que tratan [2, 24]. No es de extrañar por ello que el número de trabajos científicos referentes a los medios granulares vibrados se haya disparado en los últimos años y no sólo en cuanto a la realización de experimentos [25, 1, 26] sino en la formulación de teorías y modelos que tratan de capturar la esencia conceptual de los fenómenos observados [27, 28, 29, 30]. La similitud de muchos de estos comportamientos con los de los fluidos, han propiciado el desarrollo en los últimos años de una teoría hidrodinámica granular. Se trata de formulaciones de tipo continuo expresadas mediante ecuaciones diferenciales, similares a las de Navier-Stokes para los fluidos Newtonianos [31, 32, 33, 34, 35]. Estas expresiones presentan sin embargo la dificultad conceptual inicial de que en el medio granular no existe una separación de escalas tan clara como ocurre en los gases moleculares [36]. Por eso, conocer las escalas de tiempo y espacio relevantes es uno de los puntos clave del estudio hidrodinámico de los medios granulares. Esta problemática se identifica claramente, si la aproximación a la

hidrodinámica se hace desde una teoría cinética.

Es bastante claro que un flujo granular denso y compacto no parece ser ergódico. Pero también los flujos rápidos diluidos, susceptibles en principio de una descripción hidrodinámica, pueden presentar, bajo ciertas condiciones, inestabilidades tales como la formación de agregados que dificultan la aplicación de teorías de campo medio. Por si esto fuera poco, los sistemas reales muestran a menudo ambos tipos de regímenes (compacto y diluido) en distintos dominios espaciales [37], de modo que una de las cuestiones abiertas es cómo modelar la transición de uno a otro estado. Los modelos cinéticos funcionan razonablemente bien para describir medios granulares diluidos que se mantienen en un estado de movimiento gracias a que se les suministra externamente energía, por ejemplo, vibrándolos. Todas las magnitudes hidrodinámicas se consideran compuestas de una parte hidrodinámica que varía lentamente y otra fluctuante. Esto se traduce en los modelos teóricos en la llamada hipótesis de equilibrio local, por la cual el sistema, aunque globalmente fuera del equilibrio, admite una descripción de equilibrio si se considera localmente.

Si bien existen evidencias experimentales sobre la importancia del tipo de grano en la forma en que el material granular se comporta [38, 39], en muchos de los fenómenos relacionados con el flujo de material granular, el modelo teórico más extendido es el de un sistema de esferas duras (o discos duros, si el modelo es bidimensional), entre los cuales la única interacción son las sucesivas colisiones instantáneas inelásticas que experimentan al evolucionar en el tiempo, y en el que se identifican los granos con las esferas. Se intenta con ello recoger las características definitorias del sistema real, como son la pérdida de energía en las colisiones y la forma atomística del sistema. Las colisiones entre los granos crean fluctuaciones en sus velocidades que son las responsables del transporte de momento y energía en el sistema. El modelado de la colisión puede naturalmente modificarse para refinar el modelo aunque, como es de esperar, un modelo muy realista suele no ser susceptible de tratamiento analítico.

La validez de un tratamiento cinético de los medios granulares fluidizados no es aceptada por todos los autores [40]. Una fuente para este escepticismo surgió a partir del descubrimiento del fenómeno de colapso inelástico en simulaciones conducidas por sucesos de material granular [41, 42, 43]. Es éste un fenómeno propio del modelo de esferas rígidas inelásticas, por el cual se pueden llegar a suceder infinitas colisiones en un intervalo de tiempo finito, de forma similar a lo que acontece con un balón ideal e inelástico que botase contra el suelo: La amplitud de sus rebotes se va atenuando, mientras aumenta la frecuencia con la que éstos ocurren. El revuelo creado por esta curiosa singularidad que, aunque de carácter unidimensional, es observable en sistemas bi- y tri-dimensionales [44, 45, 46], ha decrecido mucho en los últimos años, dado

que se ha probado que desaparece para modelos de la colisión más realistas [47]. Es opinión aceptada, que el interés físico del colapso inelástico es poco y que se trata de un fenómeno propio del modelo. Desde un punto de vista práctico, sin embargo, la aparición de este fenómeno en la simulación es muy incómoda, ya que se consume gran cantidad de tiempo en unas colisiones que carecen de interés físico. Por ello se suele tratar de evitar su aparición, bien estudiando sistemas suficientemente diluidos, bien por algún otro mecanismo [48].

Otras objeciones a una teoría hidrodinámica granular, apuntan a su incapacidad para describir comportamientos singulares que presentan algunos sistemas teóricos disipativos. La validez de la hidrodinámica, sin embargo, ha sido sólidamente probada en los últimos años y ha servido para explicar no sólo fenómenos observados en la simulación de sistemas ideales [49, 50] sino resultados experimentales [22, 51, 28]. Será una importante parte de nuestro trabajo demostrar que los métodos de mecánica estadística son muy útiles para los medios granulares, aunque existen claras restricciones de aplicabilidad y deben ser tratados con el máximo cuidado, intentando en todo momento tener en mente las diferencias fundamentales existentes con los sistemas moleculares. Presentaremos evidencias de su validez, comparando las predicciones teóricas convenientemente obtenidas con resultados de simulación de sistemas de esferas duras inelásticas.

En base al estudio de la función de distribución de la energía cinética del medio, modelado por un sistema de esferas duras inelásticas, Esipov y Pöschel [52] construyen un diagrama de fase para los medios granulares en el que la región de validez de la hidrodinámica está claramente discriminada de las regiones de inestabilidad (bien por aparición de agregados o del colapso inelástico). Como es natural, la "fase" del medio granular dependerá de la inelasticidad de las colisiones (caracterizado por el denominado coeficiente de restitución,  $\alpha$ ), pero también de la densidad de partículas  $\rho$ , del diámetro de éstas  $a$ , del tamaño del sistema  $L$  y del tiempo de observación. La energía de agitación o cualquier otra característica del movimiento de los granos no aparece en el diagrama, ya que no existe ninguna escala energética característica para la interacción de esferas duras. La combinación de parámetros  $\rho La^{d-1}$ , que representa el número medio de partículas dentro de un tubo imaginario de longitud  $L$  y sección perpendicular  $a^{d-1}$ , desempeña el papel principal. Como se puede observar en la Figura 1.2, existen al menos tres fases posibles. En la región  $1 - \alpha \ll (\rho La^{d-1})^{-2}$ , el sistema se presenta en forma de un gas granular, para el que se puede proponer una descripción hidrodinámica. En la región  $(\rho La^{d-1})^{-2} \ll 1 - \alpha \ll (\rho La^{d-1})^{-1}$ , el sistema, aunque se manifiesta de manera compacta no experimenta el fenómeno del colapso inelástico. Por último, para  $1 - \alpha \gg (\rho La^{d-1})^{-1}$ , el sistema presenta cadenas de partículas que colisionan inelásticamente con un tiempo prácticamente nulo entre colisiones,

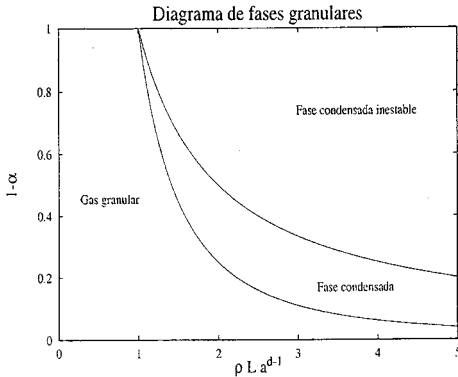


Figura 1.2: Diagrama de fase de un medio granular. La combinación de parámetros determina que el sistema considerado sea un gas granular, un sistema condensado o un sistema inestable en el que agregados y, eventualmente, colapso inelástico pueden estar presentes.

junto con regiones en las que no se produce colapso [43].

En lo que concierne a nuestro estudio, nos moveremos siempre en la región correspondiente al gas granular de la Figura 1.2. Ello implica, como muestra el diagrama y como veremos más adelante con mayor detalle, un compromiso entre el tamaño de sistema y la inelasticidad de las colisiones, así como la necesidad de controlar la evolución del sistema, a fin de asegurar que no aparecen inestabilidades.

## 1.4 Otros ejemplos de la no-linealidad

Como hemos visto, la riqueza en fenómenos y comportamientos tan distintos que presentan los medios granulares es ciertamente abrumadora y su estudio se muestra interesante y necesario en sí mismo. Pero es que, además, con frecuencia estos sistemas han sido (y son) tomados como modelos para problemas generales, es decir, presentes también en otros tipos de sistemas. El primer ejemplo de ello ya ha sido mencionado: la criticalidad auto-organizada. Y si bien parece que las expectativas en la generalidad del fenómeno no han sido del todo cubiertas, de modo que el interés por ella ha decrecido en los últimos tiempos, es abundante la literatura dedicada al fenómeno [53, 54, 55, 56].

Más reciente es el interés en los medios granulares vibrados como fuen-

te de estudio para la formulación de una teoría general para la formación de estructuras [57], surgido tras el descubrimiento del *oscilón*, la excitación fundamental a partir de la cual es posible componer estructuras más complejas.

El desarrollo de la hidrodinámica de los medios granulares ha sido de gran ayuda en la explicación de algunos fenómenos astrofísicos, como el origen de los discos que circundan algunos planetas [58, 59]. Su aplicación a la simulación de nubes de gases parece dar resultados que mejoran los obtenidos por métodos más tradicionales entre los astrofísicos.

No faltan tampoco estudios de la dinámica de sistemas granulares [60, 61]. No hay que olvidar que existe una amplia gama de fenómenos en los que el comportamiento no lineal de las leyes que por las que se rigen estos medios se manifiesta de manera clara, siendo un campo aún por explotar el estudio dinámico de sistemas granulares.

Por todas estas razones rápidamente enumeradas hasta aquí de manera directa o indirecta, no es de extrañar el creciente interés por esta parte de nuestro mundo con la que nos encontramos cada día. Numerosas son las publicaciones que cada mes aparecen relativas al tema, reflejo de la enorme producción y competitividad del campo. Como muestra, basta referirse a los últimos grandes encuentros en los que los medios granulares han sido el tema preferente [23, 62, 63]. En todas y cada una de estas referencias, encontramos una muestra clara de la gran cantidad de esfuerzo empeñado en el estudio de estos sistemas y del colosal trabajo que aún queda por hacer.

## 1.5 Utilidad de la simulación por ordenador

Previo a la comprobación de una teoría, enfrentando sus predicciones a las consecuencias de un experimento de un flujo granular, por ejemplo, en una tolva o a la salida de un silo, es esencial verificar que los coeficientes que modelan el impacto entre granos en la teoría describen adecuadamente la realidad. Desafortunadamente, dado que la medida de tales parámetros requiere el control preciso de trayectorias de los pequeños granos, estos coeficientes son raramente especificados cuando se publican los resultados de un experimento [64]. Por ello, las comparaciones con la teoría se suelen basar en valores presupuestos de los coeficientes.

En relación a esto, encontramos una explicación a por qué la simulación mediante ordenador es preferida por los físicos a la hora de verificar predicciones teóricas: convenientemente provistas de las mismas leyes de colisión que la teoría, dan posibilidad de medida detallada de muchos parámetros del flujo que son difíciles de observar en el experimento. Sin embargo, al igual que



la teoría, la simulación produce resultados que se basan en la exactitud del modelo empleado para la colisión. Los experimentos físicos, sin embargo involucran todas las complejidades del flujo, que incluyen por supuesto los detalles exactos de las interacciones entre granos. A pesar de ello, los resultados experimentales, en su complejidad, son difíciles de interpretar sin el conocimiento de las colisiones básicas.

A esto se debe añadir que el aumento de la capacidad de cálculo de los ordenadores producido en los últimos años, así como la aparición de algoritmos cada vez más eficientes, no ha hecho sino fomentar el uso de la simulación de sistemas de todo tipo. En lo que respecta a la Dinámica Molecular, tremendamente dependiente de la capacidad de cálculo, se ha conseguido la simulación de sistemas con millones de partículas [65], cifra que si bien lejana aún del número de moléculas en un gas molecular, que es del orden del número de Avogadro, representa indudablemente un gran paso. Máxime cuando se sabe que el número de partículas en un sistema granular es considerablemente menor que en el caso de los fluidos moleculares.

## 1.6 Objetivos

Este trabajo está dedicado al estudio de los medios granulares no-cohesivos secos y fluidizados. La existencia de un estado fluidizado de un medio granular vibrado ha sido probada experimentalmente. La fluidización se consigue mediante la agitación mecánica continua del material [66], tal y como se hace en multitud de aplicaciones industriales para el transporte de grano. Es posible la medida de un campo de densidades y velocidades en el experimento y ha quedado establecido que el sistema real alcanza un estado de agitación conectado con una atomización del material en el cual la distribución de velocidades se aproxima, en mayor o menor medida, a una Maxwelliana [66, 67].

El problema de la autodifusión ha sido tratado en numerosas ocasiones como paradigma de los fenómenos de transporte. Siguiendo ese esquema, plantearemos un estudio de la autodifusión en un gas granular libre y, con un método similar, abordaremos el problema de una partícula browniana en un medio granular. Estos dos problemas nos servirán para validar la descripción hidrodinámica de los medios granulares en casos particularmente sencillos, que será aplicada en la parte final de esta memoria a estados particulares de medios granulares vibrados.

A continuación exponemos sucintamente las motivaciones que han conducido a la realización de esta tesis doctoral, así como su contenido:

- En primer lugar, se estudiará el problema de la difusión en un medio

granular libre, como paradigma de los fenómenos de transporte. Para este problema será posible obtener resultados analíticos relevantes, que podremos contrastar con los resultados de la simulación del sistema.

- La caracterización de los medios granulares vibrados fluidizados exentos de gravedad será también parte esencial de nuestro trabajo. Una vez que contemos con un tratamiento hidrodinámico válido en los medios libres, cabe plantearse su extensión a los medios granulares vibrados, con la esperanza de obtener el mismo nivel de éxito.
- En los fluidos granulares vibrados bajo la acción de la gravedad, existen evidencias experimentales de la existencia de estados estacionarios que presentan una ruptura espontánea de simetría [1]. Cabe entonces plantearse la existencia de estados análogos en sistemas exentos de gravedad. Nos planteamos la aplicación de la descripción hidrodinámica a tales estados asimétricos y la posibilidad de encontrar un mecanismo hidrodinámico que dé lugar a tales situaciones. De nuevo, la posibilidad de contrastar los resultados teóricos con la simulación será de gran valor.
- Un punto esencial de este trabajo es la validación del tratamiento hidrodinámico del gas granular. Esto se consigue haciendo uso de los resultados obtenidos en la simulación de diferentes fluidos granulares tanto libres como vibrados. Será necesario, para ello, el desarrollo de un algoritmo eficiente de Dinámica Molecular que permita reproducir exactamente la dinámica del sistema. La concordancia de los resultados teóricos con los obtenidos de la simulación será la mejor prueba de la validez del tratamiento hidrodinámico.

La estructura con la que se presenta este trabajo es la que sigue. Hemos comenzado con una introducción general de los medios granulares. A continuación, introduciremos la descripción hidrodinámica de los medios granulares fluidizados libres. Ésta se aplica en el Capítulo 3 a dos problemas de tipo difusivo, concretamente la autodifusión y la difusión de una partícula browniana. En ambos casos, se determinará una expresión teórica del coeficiente de transporte correspondiente y se comparará con resultados de simulación mediante un algoritmo de Dinámica Molecular. En el Capítulo 4 se particulariza la descripción hidrodinámica a un sistema granular vibrado en ausencia de gravedad, para poder, en los dos últimos capítulos, estudiar la ruptura de simetría en estos sistemas. Se presentará en este contexto un estudio analítico de la estabilidad de las soluciones hidrodinámicas que nos permita identificar el parámetro adimensional que controla una de tales asimetrías. Finalmente, en el Capítulo 7 resumimos los principales resultados y las conclusiones a las que se ha llegado en esta memoria.

## Capítulo 2

# Descripción hidrodinámica de un medio granular

Existen diversas formas de abordar el problema de la descripción teórica de la dinámica de un sistema granular, que van desde los intentos de formulación de una termodinámica granular hasta el desarrollo de ecuaciones continuas de movimiento, pasando por la extensión de los conceptos de la teoría cinética. La gran mayoría de estos intentos parten de modelos sencillos, susceptibles de ser resueltos al menos en parte, pero que no incorporan todos los aspectos del problema. Ello es debido a la gran dificultad que supone incluir en estas teorías algunas características bien conocidas de los medios granulares, como son la fricción estática, las rotaciones locales u otros mecanismos microscópicos relevantes. En este sentido, la simulación mediante ordenador de estos sistemas se presenta como una herramienta extremadamente útil para conseguir una comprensión más completa de, por ejemplo, los efectos reológicos (como se ha puesto de manifiesto en una gran cantidad de fenómenos) [68].

La inelasticidad de las interacciones entre las partículas es la característica esencial de los flujos granulares, y la que los hace diferentes de los fluidos moleculares, con los cuales presentan, sin embargo, numerosas similitudes. Estas analogías precisamente sugieren la conveniencia de describir los sistemas granulares en ciertas circunstancias mediante ecuaciones hidrodinámicas continuas, tal y como se hace con los fluidos normales. Para llegar a ellas, sin embargo, no es posible hacer uso de los métodos de la Mecánica Estadística de equilibrio o de la Termodinámica, ya que no existen en los medios granulares estados de equilibrio estacionarios más allá del trivial, en el que todos los granos permanecen en reposo. La justificación de una descripción hidrodinámica, la forma de las ecuaciones hidrodinámicas, las expresiones explícitas para los coeficientes de transporte que en ellas aparecen, así como el rango de validez de la teoría, requieren un desarrollo detallado y cuidadoso

que parta de una base microscópica más fundamental. Como en los fluidos moleculares, la teoría cinética en su extensión a la dinámica disipativa ofrece el marco teórico adecuado para abordar esta tarea.

Las características del modelo teórico elegido para representar las interacciones en un medio granular dependerá de la naturaleza de éste, de las condiciones en que se encuentre y de las propiedades que se quieran estudiar. En medios densos y estáticos, la fricción es crucial, mientras que en sistemas diluidos y en movimiento predominan las propiedades colisionales. En el primer caso, el uso de modelos continuos puede resultar ventajoso [19], mientras que en el segundo hay que definir claramente las colisiones relevantes y caracterizarlas. Si el medio que pretendemos describir es seco, podremos despreciar las interacciones de los granos con el medio. En el caso de considerar sistemas granulares no cohesivos, es posible introducir una simplificación adicional, restringiendo las interacciones entre los granos a las contribuciones de colisiones sucesivas. La velocidad de las partículas cambia cuando interactúan, mientras que en el intervalo de tiempo entre dos colisiones, el sistema evoluciona libremente (en ausencia de campos externos). Este modelo requiere, por tanto, la definición de una matriz de colisión que relacione las velocidades antes y después de la colisión. En general, para un medio diluido seco en el que las interacciones predominantes son las colisiones, se suele hacer la idealización de considerar los granos como cuerpos rígidos. El modelo más sencillo de este tipo es el de cuerpos inelásticos lisos y esféricos, en el que los granos interactúan perdiendo una fracción de su energía en cada colisión. La forma en que se parametriza esta pérdida de energía hace que el modelo sea más o menos realista y, consiguientemente, más o menos difícil de resolver analíticamente. En el caso más sencillo, las colisiones se consideran binarias e instantáneas, lo que implica limitarse a situaciones suficientemente diluidas como para que las contribuciones de las colisiones que involucran más de dos partículas sea despreciable.

## 2.1 El modelo de esferas duras inelásticas

Este modelo ha sido una herramienta esencial para el estudio de líquidos moleculares, puesto que permite obtener soluciones analíticas aproximadas basadas en la ecuación de Boltzmann o en la de Enskog. Tiene la ventaja adicional de que es particularmente adecuado para simulaciones conducidas por sucesos [69]. De hecho, muchos de los resultados relevantes obtenidos para líquidos densos, como el descubrimiento de las colas largas de la distribución de velocidades o la existencia de sólidos bidimensionales, se han producido gracias a este tipo de simulaciones. No es de extrañar, por ello, que el modelo se haya hecho popular también en el contexto del estudio de medios granulares,

convirtiéndose en el “banco de pruebas” de muchas teorías.

En el caso más general, son necesarios tres parámetros para fijar las leyes de colisión entre dos cuerpos esféricos rugosos: el coeficiente de restitución normal  $\alpha$ , el de restitución tangencial  $\beta$  y el coeficiente de fricción  $\mu$  [70]. Este modelo, aunque es una simplificación de la teoría de Hertz del impacto (que no es aplicable directamente a los modelos cinéticos), parece modelar de manera muy efectiva las colisiones binarias entre granos reales [64]. En este trabajo, además, se considera que no hay deslizamiento en la superficie de contacto, es decir, que la esfera es totalmente lisa, de modo que no hay fricción ni rugosidad. En este caso, la colisión inelástica queda caracterizada por un sólo coeficiente de restitución: el coeficiente de restitución normal,  $\alpha$ . Para definir este coeficiente, considérese la colisión de dos partículas lisas, tal y como se muestra en la Figura 2.1 Llamamos  $\hat{\sigma}$  a un vector unitario en la

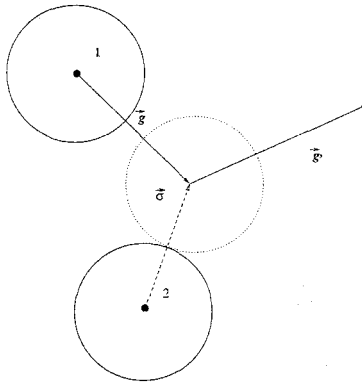


Figura 2.1: Velocidad relativa antes y después de la colisión, según ecuación (2.2)

dirección que une los centros de las partículas 2 y 1, en contacto. Por otro lado, la velocidad relativa  $\vec{g}$  es  $\vec{v}_1 - \vec{v}_2$  y  $\Theta$  la función escalón de Heaviside. Las velocidades  $\vec{v}_1^r$ ,  $\vec{v}_2^r$  tras la colisión, dan lugar a  $\vec{v}_1$  y  $\vec{v}_2$ . Como se discute en el Apéndice B, vienen dadas por las expresiones:

$$\vec{v}_1^r = \vec{v}_1 - \frac{1 + \alpha}{2} (\hat{\sigma} \cdot \vec{g}) \hat{\sigma} \quad y \quad \vec{v}_2^r = \vec{v}_2 + \frac{1 + \alpha}{2} (\hat{\sigma} \cdot \vec{g}) \hat{\sigma}. \quad (2.1)$$

El coeficiente de restitución normal,  $\alpha$ , se define como la tasa de velocidad relativa normal  $g_n$  que pierden las partículas en la colisión. El rango de definición del parámetro en las colisiones inelásticas es  $0 < \alpha \leq 1$ , correspondiendo el límite  $\alpha = 1$  de las ecuaciones que obtengamos al caso elástico, en el que no

hay pérdida de energía durante la colisión. Si llamamos  $g'_n$  a la componente normal de la velocidad relativa de las partículas tras la colisión, por definición:

$$g'_n = -\alpha g_n. \quad (2.2)$$

Si bien existen evidencias de la variación de  $\alpha$  con la velocidad relativa  $g$  [64, 71], ésta no es relevante en los fenómenos en los que vamos a estar interesados, como tampoco lo es para gran cantidad de tipos de granos. Considerar al parámetro  $\alpha$  libre de esta dependencia, además, nos permitirá alcanzar expresiones teóricas analíticas que podremos usar para contrastar con los resultados experimentales y validar de esta forma la aproximación. Un ejemplo claro de la utilidad de ésta es la extensión de la ecuación de Boltzmann para esferas duras al caso inelástico y su aplicación a diversos problemas para obtener expresiones de los campos hidrodinámicos que pueden ser contrastados con resultados experimentales o de simulación.

Dado un sistema tal de discos ( $d = 2$ ) o esferas ( $d = 3$ ) lisas duras de diámetro  $\sigma$  y masa  $m$  con un coeficiente de restitución conocido  $\alpha$ . Al despreciar la rugosidad de las esferas, podemos prescindir de los grados de libertad rotacionales. En el límite de baja densidad, la evolución temporal de la función de distribución de una partícula  $f(\vec{r}, \vec{v}|t)$  está bien descrita por la ecuación de Boltzmann inelástica [34, 72]

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \nabla \right) f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) = J_B[\vec{r}, \vec{v}_1|f(t)], \quad (2.3)$$

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

$$J_B[\vec{r}, \vec{v}_1|f(t)] = \sigma^{d-1} \int d\vec{v}_2 \times \int d\hat{\sigma} \Theta(\hat{\sigma} \cdot \vec{g})(\hat{\sigma} \cdot \vec{g}) [\alpha^{-2} f(\vec{r}, \vec{v}_1^*, t) f(\vec{r}, \vec{v}_2^*, t) - f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) f(\vec{r}, \vec{v}_2, t)]. \quad (2.4)$$

Las velocidades  $\vec{v}_1^*$  y  $\vec{v}_2^*$  se relacionan con  $\vec{v}_1$  y  $\vec{v}_2$ , según se indica en las Ecs.(B.2).

## 2.2 Ecuaciones hidrodinámicas y coeficientes de transporte

La descripción hidrodinámica de un sistema permite caracterizarlo con un número reducido de campos macroscópicos, concretamente la densidad, temperatura y la velocidad. Es una descripción continua, en la que los átomos que componen el fluido no desempeñan ningún papel. La evolución de los campos viene gobernada por las ecuaciones hidrodinámicas, en las que aparecen

los flujos hidrodinámicos y, en la expresión de los mismos, los coeficientes de transporte.

El formalismo general para un sistema de esferas (o discos) duros, basado en una ecuación de Liouville es adaptable al caso inelástico, incluso para situaciones alejadas del límite cuasielástico  $\alpha \rightarrow 1$  [73, 74, 75]. El conocimiento exacto de los coeficientes de transporte abre las puertas a la resolución de una amplia gama de situaciones y problemas que se pueden abordar mediante las ecuaciones hidrodinámicas y las condiciones de contorno apropiadas. Veremos a continuación cómo se derivan los coeficientes de transporte en un fluido granular. Las ecuaciones hidrodinámicas pueden obtenerse a partir de la propia ecuación de Boltzmann. Multiplicándola por 1,  $m\vec{v}_1$  y  $mv_1^2$  e integrando sobre  $\vec{v}_1$ , se obtienen las siguientes ecuaciones macroscópicas de balance,

$$\partial_t n + \nabla \cdot (n\vec{u}) = 0, \quad (2.5)$$

$$\partial_t \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} + (nm)^{-1} \nabla \cdot P = \vec{0}, \quad (2.6)$$

$$\partial_t T + \vec{u} \cdot \nabla T + 2(dnk_B)^{-1} (P : \nabla \vec{u} + \nabla \cdot \vec{q}) + T\zeta = 0, \quad (2.7)$$

donde se ha definido la densidad numérica de partículas local  $n$ , la velocidad del flujo  $\vec{u}$  y la temperatura  $T$  de la forma usual,

$$n(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (2.8)$$

$$n(\vec{r}, t) \vec{u}(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} \vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (2.9)$$

$$\frac{d}{2} n(\vec{r}, t) k_B T(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} \frac{mV^2}{2} f(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (2.10)$$

siendo  $k_B$  la constante de Boltzmann y  $V(\vec{r}, t) = \vec{v} - \vec{u}(\vec{r}, t)$  la denominada velocidad peculiar del fluido en el punto  $\vec{r}$ . En las ecuaciones anteriores, el tensor de presiones y el flujo de calor vienen dados por

$$P(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} m \vec{V} \vec{V} f(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (2.11)$$

y

$$\vec{q}(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} \frac{mV^2}{2} \vec{V} f(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (2.12)$$

respectivamente.

Finalmente, la velocidad de enfriamiento,  $\zeta$ , que aparece en la ecuación para la temperatura, Ec.(2.7), incluye el efecto de la disipación en las colisiones, siendo una funcional no lineal de la función de distribución:

$$\zeta(\vec{r}, t) = \frac{(1 - \alpha^2) m \pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma^{d-1}}{4d \Gamma(\frac{d+3}{2}) n k_B T} \int d\vec{v}_1 \int d\vec{v}_2 g^3 f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) f(\vec{r}, \vec{v}_2, t). \quad (2.13)$$

En la bibliografía nos encontramos múltiples propuestas de ecuaciones macroscópicas de balance similares a (2.5)-(2.7) [76, 77, 78]. Expresando el tensor de presiones, el flujo de calor y la velocidad de enfriamiento como funcionales de los campos macroscópicos, se puede obtener un conjunto cerrado de ecuaciones. Una forma ordenada de conseguirlo es mediante el desarrollo de Chapman-Enskog [79], análogamente a como se hace para los gases moleculares. Recientemente que se han obtenido expresiones explícitas para los flujos en el primer orden de los gradientes [73]. En ellas el tensor de presiones involucra el coeficiente de viscosidad tangencial  $\eta$ :

$$P_{ij} = nk_B T \delta_{ij} - \eta (\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{d} \delta_{ij} \nabla \cdot \vec{u}), \quad (2.14)$$

mientras que el flujo de calor depende de la conductividad térmica  $\kappa$ , así como de un coeficiente de transporte adicional,  $\mu$ :

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n. \quad (2.15)$$

Este nuevo coeficiente de transporte no tiene análogo en los gases elásticos y acopla el flujo de calor y el gradiente de densidad. Las expresiones de todos estos coeficientes de transporte son [80]:

$$\eta \equiv \eta^*(\alpha) \eta_0, \quad (2.16)$$

$$\kappa \equiv \kappa^*(\alpha) \kappa_0 \quad (2.17)$$

$$\mu \equiv \frac{T \kappa_0}{n} \mu(\alpha) \quad (2.18)$$

donde los coeficientes adimensionales  $\eta^*$ ,  $\kappa^*$  y  $\mu^*$  son funciones sólo de la inelasticidad y se pueden escribir:

$$\eta^*(\alpha) = \left[ \nu_1^*(\alpha) - \frac{\zeta^*(\alpha)}{2} \right]^{-1}, \quad (2.19)$$

$$\kappa^*(\alpha) = \left[ \nu_2^*(\alpha) - \frac{2d}{d-1} \zeta^*(\alpha) \right]^{-1} [1 + c^*(\alpha)] \quad (2.20)$$

$$(2.21)$$

y

$$\mu^*(\alpha) = 2\zeta^*(\alpha) \left[ \kappa^*(\alpha) + \frac{(d-1)c^*(\alpha)}{2d\zeta^*(\alpha)} \right] \left[ \frac{2(d-1)}{d} \nu_2^*(\alpha) - 3\zeta^*(\alpha) \right]^{-1}. \quad (2.22)$$

En las fórmulas anteriores  $\eta_0$  y  $\kappa_0$  son la viscosidad y conductividad de un fluido molecular elástico, cuyas respectivas definiciones son:

$$\eta_0 = \frac{2+d}{8} \Gamma(d/2) \pi^{-\frac{d-1}{2}} (mk_B T)^{1/2} \sigma^{-(d-1)} \quad (2.23)$$



y

$$\kappa_0 = \frac{d(d+2)^2}{16(d-1)} \Gamma(d/2) \pi^{-\frac{d-1}{2}} k_B \left( \frac{k_B T}{m} \right)^{1/2} \sigma^{-(d-1)}. \quad (2.24)$$

Por último, las funciones adimensionales del coeficiente de restitución, presentes en las ecuaciones anteriores, vienen dadas por:

$$\zeta^*(\alpha) = \frac{2+d}{4d} (1-\alpha^2) \left[ 1 + \frac{3}{32} c^*(\alpha) \right], \quad (2.25)$$

$$\nu_1^*(\alpha) = \frac{(3-3\alpha+2d)(1+\alpha)}{4d} \left[ 1 - \frac{1}{64} c^*(\alpha) \right], \quad (2.26)$$

$$\nu_2^* = \frac{1+\alpha}{d-1} \left[ \frac{d-1}{2} + \frac{3(d+8)(1-\alpha)}{16} + \frac{4+5d-3(4-d)\alpha}{1024} c^*(\alpha) \right] \quad (2.27)$$

y

$$c^*(\alpha) = \frac{32(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{9+24d+(8d-41)\alpha+30\alpha^2(1-\alpha)}. \quad (2.28)$$

El término sumidero que da cuenta del enfriamiento del sistema como consecuencia de las colisiones inelásticas (Ec.(2.13)) se puede descomponer en  $\zeta = \zeta^{(0)} + \zeta^{(2)}$ , donde  $\zeta^{(0)}$  denota la contribución de orden cero en los gradientes,

$$\zeta^{(0)} = \zeta^* \frac{n k_B T}{\eta_0}, \quad (2.29)$$

mientras que  $\zeta^{(2)}$ , es de segundo orden en ellos. Este término da lugar a contribuciones que pueden ser despreciadas en comparación con las que provienen del flujo de calor y del tensor de presiones [73].

Las ecuaciones hidrodinámicas (2.5) – (2.7) admiten una solución que describe el enfriamiento homogéneo del sistema, con campos uniformes y una temperatura que disminuye en el tiempo según una ley algebraica. A este estado, que conocemos como estado de enfriamiento homogéneo (HCS de *homogeneous cooling state*), le hemos dedicado gran parte del Apéndice B. Es un estado inestable frente a perturbaciones de vector de onda pequeño, de forma que si el sistema es suficientemente grande permanece en él solo transitoriamente. Al evolucionar se desarrollan inhomogeneidades que terminan por provocar la aparición de agregados de partículas en el sistema, acompañados de fuertes gradientes espaciales.

Es necesario mencionar que las expresiones anteriores de los coeficientes de transporte han sido obtenidas en la denominada primera aproximación de Sonine, en la que la función de distribución del gas se expande en polinomios de Laguerre, también conocidos en el ámbito de la Mecánica Estadística como polinomios de Sonine (ver Ec.B.18). En la primera aproximación de Sonine se

mantienen tan sólo las primeras correcciones no nulas a la forma Gaussiana. Esta expansión es bien conocida en el estudio de los gases moleculares, ámbito en el que ha resultado de gran utilidad. Es de esperar que sea también válida para fluidos granulares, ya que el estado de referencia es aproximadamente Gaussiano [73, 72, 81]. Conviene resaltar que el desarrollo en polinomios de Sonine no es en general convergente. A pesar de ello, confiamos en que, en tanto en cuanto la desviación del estado del gas respecto a la Gaussiana no sea muy grande, el desarrollo en las primeras aproximaciones de Sonine sea válido, en el sentido de que las contribuciones de orden superior sean despreciables.

Es bien sabido que no existen estados de equilibrio en los medios granulares: dada su inherente inelasticidad, es necesario un suministro constante de energía para que el sistema pueda alcanzar un estado estacionario, puesto que, de no existir este aporte, el sistema se enfriaría hasta terminar en un estado de absoluto reposo. El más simple de todos los estados posibles de un flujo granular es el estado de enfriamiento homogéneo. Corresponde a un medio granular que se enfría en el tiempo y que evoluciona libre de campos externos. Por su sencillez, el estado de enfriamiento homogéneo de un medio granular desempeña para los medios granulares un papel análogo al estado de equilibrio para los fluidos normales en el sentido de que es el estado de referencia.

En este estado, la autodifusión y el movimiento browniano son dos procesos de transporte particularmente sencillos que admiten la posibilidad de un estudio detallado [79]. Ambos pueden resolverse en el límite de baja densidad, en el que es posible un tratamiento basado en la ecuación de Boltzmann-Lorentz. Su estudio ha atraído mucha atención en gases moleculares por su simplicidad, su proximidad a situaciones experimentales y la posibilidad de contrastar resultados teóricos con simulaciones en ordenador. Puesto que del estudio de estos problemas ha surgido una gran cantidad de información sobre procesos dinámicos en gases moleculares, cabe la esperanza de que lo mismo ocurra en el campo de los fluidos granulares. En este contexto, el conocimiento explícito del coeficiente de difusión será una herramienta muy valiosa para el cálculo de la temperatura en un flujo tridimensional, cuando se usen técnicas que no ofrezcan la resolución necesaria para medir la distribución de temperaturas directamente. En cualquier caso, lo que más nos interesa de estas descripciones es que demuestran la validez del tratamiento hidrodinámico de ambos procesos y que los resultados de éste son muy satisfactorios, como se desprende de la comparación con la resolución numérica de la ecuación cinética y de la simulación del propio sistema mediante técnicas de Dinámica Molecular.

Otro estado de referencia de los medios granulares es el que alcanza un medio granular vibrado en ausencia de gravedad. Se trata del estado estacionario granular más sencillo posible. El modelo más simple es, de nuevo, un

gas de discos duros (o esferas duras) al que se le suministra energía a través de una pared con la que colisionan las partículas del gas. En el caso real, se hace vibrar la pared mediante algún dispositivo mecánico. El tratamiento teórico y la simulación admite el uso de diferentes mecanismos para el modelado de la pared. Los más populares son el uso de una pared térmica o el de una pared vibrante [82, 83]. Es de destacar el hecho de que incluso en modelos de un medio granular vibrado tan simples como éste aparezcan algunas de las características más sorprendentes de estos sistemas, como son la aparición de inhomogeneidades y la ruptura espontánea de simetría. Veremos que la hidrodinámica proporciona una explicación satisfactoria en estos fenómenos.

Mencionemos también que la extensión del análisis presentado a la teoría cinética revisada de Enskog para esferas duras [34, 84], proporciona una descripción hidrodinámica válida a densidades más altas [74]. En cualquier caso, ambas descripciones asumen que es válida la generalización del método de Chapmann-Enskog para obtener una solución normal de la ecuación cinética. Esto presupone una clara separación entre las escalas temporales que gobiernan los fenómenos cinéticos y la mucho mayor en que evolucionan los campos hidrodinámicos. En el caso granular, al contrario de lo que ocurre para los gases moleculares, la evolución temporal de los campos hidrodinámicos no está determinada sólo por sus gradientes espaciales. La inelasticidad introduce una escala temporal adicional asociada a la disminución de la energía del sistema. El punto esencial, sin embargo, no es si estas dos escalas de tiempo están o no separadas entre sí lo suficiente, sino si ambas son mucho mayores que la asociada a las excitaciones cinéticas.

A este respecto, una forma de comprobar la validez de las ecuaciones cinéticas es contrastar los resultados teóricos con las soluciones numéricas de las propias ecuaciones cinéticas, obtenidas mediante el método de simulación directa de Monte Carlo [85]. Otra posibilidad consiste en comparar los resultados teóricos con los de la simulación de Dinámica Molecular. Este uso conjunto del tratamiento teórico, resolución numérica y simulación se va a aplicar a continuación a dos ejemplos de transporte de materia en un medio granular en el estado de enfriamiento homogéneo: la autodifusión y el movimiento browniano.



## Capítulo 3

# Estudio de una partícula marcada en un gas granular uniforme

Las ecuaciones hidrodinámicas presentadas en el capítulo anterior, pueden ser aplicadas directamente al estudio del transporte de masa, cantidad de movimiento y energía en un fluido granular en muy distintas situaciones. El ejemplo más sencillo de fenómeno de transporte es el de una partícula marcada que evoluciona en el seno de un fluido compuesto por partículas mecánicamente idénticas a ella. Este es el conocido problema de la autodifusión. La situación se complica si la partícula marcada deja de ser idéntica a las del fluido. En ese caso, un tratamiento cinético del problema basado en la ecuación de Boltzmann no es en general resoluble. Existe, si embargo, una situación que sí es susceptible de ser abordada analíticamente. Si, por alguna causa propia de su naturaleza, la partícula marcada tiene una frecuencia de colisión con el resto de granos mucho mayor que las del fluido granular entre sí, es posible derivar una ecuación de Fokker-Planck que describa la evolución dinámica de la función de distribución de la partícula marcada. Obsérvese que con esto hemos definido el problema de una partícula browniana en el seno de un fluido granular, ya que el límite de que hablamos se produce cuando la partícula marcada tiene una sección eficaz mucho mayor que las del gas, bien porque sea de mayor tamaño o tenga mucha más masa.

La resolución de ambos problemas, el de la autodifusión y el de la partícula browniana, a partir de la ecuación cinética apropiada y la posterior comparación de los resultados con los obtenidos mediante la simulación numérica del sistema, nos van a permitir verificar la validez del tratamiento hidrodinámico propuesto en el capítulo anterior. Hay que reseñar, por último, que aquí entendemos por gas granular un medio granular fluidizado a baja densidad, de

forma que el tratamiento cinético, basado en las correspondientes ecuaciones, sea válido. Dado que el sistema se considera libre de agentes externos, se estará enfriando constantemente. El tratamiento cinético que pasamos a aplicar requiere que el gas granular permanezca en todo momento en un estado de enfriamiento homogéneo, lo que en principio no tenemos garantizado en un sistema de discos duros inelásticos debido a la conocida inestabilidad de dicho estado. Esto último es un asunto que debe ser tratado cuidadosamente y que se discute en el Apéndice B.

### 3.1 Autodifusión en gases granulares libres diluidos

El punto inicial para el estudio cinético de la autodifusión es la ecuación de Boltzmann-Lorentz para un gas diluido de discos inelásticos, cuya deducción se discute en el Apéndice C. En ella, la disipación de energía que ocurre en las colisiones entre granos se caracteriza mediante un coeficiente de restitución que tomaremos constante por simplicidad. En el desarrollo que proponemos, la ecuación cinética se concreta para un gas en el HCS y se resuelve por medio de un procedimiento de Chapman-Enskog [86]. El resultado principal de todas estas operaciones es una ecuación de difusión con un coeficiente de transporte que depende explícitamente de la disipación a través del coeficiente de restitución, e implícitamente a través de la temperatura del sistema.

#### 3.1.1 Solución de Chapman-Enskog de la ecuación de Boltzmann-Lorentz

Sea un gas diluido de discos duros ( $d = 2$ ) o esferas duras ( $d = 3$ ) de masa  $m$  y diámetro  $\sigma$ . Las colisiones entre las partículas de este gas son inelásticas y se caracterizan mediante un coeficiente de restitución normal constante  $\alpha$ . Las leyes de colisión son las definidas en la Ecuación (2.1). A fin de estudiar la autodifusión marcamos algunas de las partículas del sistema, pero no rompemos la equivalencia mecánica con el resto de las que lo componen. A partir de este momento habrá que diferenciar, sin embargo, entre la función de distribución monoparticular de las partículas marcadas  $f_s(\vec{r}, \vec{v}, t)$  y la del sistema completo  $f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t)$ . La evolución temporal de  $f_s(\vec{r}, \vec{v}, t)$  es la que predice la extensión de la ecuación de Boltzmann-Lorentz al caso inelástico:

$$(\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla) f_s(\vec{r}, \vec{v}, t) = \Lambda(\vec{r}, \vec{v}, t) f_s(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (3.1)$$

siendo  $\Lambda$  el operador de Boltzmann-Lorentz (Ec. (C.17)).

Puesto que la función  $f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t)$  se rige por una ecuación independiente (la ecuación inelástica de Boltzmann, Ec.(2.3)), el operador de Boltzmann-Lorentz y, por tanto la ecuación (3.1), son lineales en  $f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t)$ . Nótese que las partículas marcadas tienen la posibilidad de intercambiar momento y energía con el resto del fluido, por lo que estas dos magnitudes no son invariantes del operador de colisión  $J_c[\vec{r}, \vec{v}, t | f_s, f]$ . Solamente el número de partículas marcadas se conserva. Más concretamente, la densidad de éstas,

$$n_s(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} f_s(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (3.2)$$

obedece la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial n_s(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_s(\vec{r}, t) = 0, \quad (3.3)$$

siendo el flujo de partículas marcadas

$$\vec{J}_s(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} \vec{v} f_s(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (3.4)$$

Si pudiésemos expresar el flujo  $\vec{J}_s$  como una funcional de la densidad de partículas marcadas  $n_s(\vec{r}, t)$  (y eventualmente también de los campos macroscópicos que definen el estado del gas), obtendríamos de la ecuación de conservación (3.3) una relación hidrodinámica cerrada para la densidad susceptible de ser resuelta. Con esto en mente vamos a buscar  $\vec{J}_s$  en el orden más bajo en los gradientes, aplicando el método de Chapman-Enskog para resolver la ecuación de Boltzmann-Lorentz. Admitimos pues que, en el límite de tiempos largos, existe una solución normal de la ecuación cinética (C.16) del tipo:

$$f_s(\vec{r}, \vec{v}, t) = f_s[\vec{v} | n_s(\vec{r}, t), B_i]. \quad (3.5)$$

El conjunto  $\{B_i\}$  representa aquí los campos hidrodinámicos que definen el estado macroscópico asociado a  $f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t)$ . Supongamos que el fluido se encuentra en un estado de enfriamiento uniforme. Este estado se describe mediante una solución homogénea de la ecuación de Boltzmann  $f_H(\vec{v}_1, t)$ , en la cual toda la dependencia temporal aparece a través de la temperatura del gas  $T_H(t)$  (ver Apéndice B). Resulta entonces que  $f_H$  obedece la ecuación:

$$\frac{\partial T_H}{\partial t} \frac{\partial}{\partial T_H} f_H(\vec{v}, t) = J_B[\vec{v}_1, t | f_H, f_H], \quad (3.6)$$

siendo  $J_B$  el operador inelástico de Boltzmann.

Es posible encontrar en este estado una ecuación para la temperatura a partir de la propia ecuación de Boltzmann (Ec.(B.15)). Como la forma explícita de  $f_H(\vec{v}_1, t)$  es conocida en la primera aproximación de Sonine, Ec.(D.6).

podemos sustituir esta expresión en la ecuación (2.13), de lo que se obtiene:

$$\zeta_H = \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}(1-\alpha^2)}{d\Gamma(\frac{d}{2})} n_H \sigma^{d-1} \sqrt{\frac{k_B T_H}{m}} \left[ 1 + \frac{3c^*(\alpha)}{32} \right]. \quad (3.7)$$

A continuación procedemos a aplicar el algoritmo de Chapman-Enskog en la ecuación (3.3). La función de distribución se escribe como una serie en un parámetro  $\epsilon$  que mide la uniformidad del sistema.

$$f_s = f_s^{(0)} + \epsilon f_s^{(1)} + \epsilon^2 f_s^{(2)} + \dots \quad (3.8)$$

Dado que de aparecer alguna inhomogeneidad en el sistema propuesto lo haría en la densidad, consideraremos que cada factor  $\epsilon$  en la expansión implica un  $\nabla n_s$ . En consecuencia, la ecuación de balance para la densidad se desarrolla según

$$\frac{\partial n_s(\vec{r}, t)}{\partial t} = \sum_{j=0}^{\infty} \epsilon^{j+1} \delta^{(j)} n_s(\vec{r}, t). \quad (3.9)$$

Comparando (3.9) con la ecuación presentada en (3.3), podemos identificar los siguientes términos:

$$\delta_t^{(j)} n_s(\vec{r}, t) = -\nabla \cdot \vec{J}_s^{(j)}(\vec{r}, t), \quad (3.10)$$

siendo

$$\vec{J}_s^{(j)}(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} \vec{v} f_s^{(j)}(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (3.11)$$

La ecuación correspondiente al término de orden cero del desarrollo en el parámetro  $\epsilon$  es:

$$\frac{\partial T_H}{\partial t} \frac{\partial}{\partial T_H} f_s^{(0)} = J_B[\vec{v}_1, t | f_s^{(0)}, f_H]. \quad (3.12)$$

Donde hemos tenido en cuenta que, como se desprende de ecuación (3.5), existe una dependencia temporal sólo a través de la temperatura del sistema  $T_H(t)$ . Es importante resaltar que, no estando ésta asociada a ningún gradiente en el sistema, debe ser considerada de orden cero en  $\epsilon$ . Comparando las ecuaciones (3.6) y (3.12), concluimos que  $f_s^{(0)}(\vec{r}, \vec{v}, t)$  ha de ser proporcional a  $f_H(\vec{v}, t)$ . Mas aún, habida cuenta de la normalización de las densidades de probabilidad, la relación entre ambas es,

$$f_s^{(0)}(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{n_s(\vec{r}, t)}{n_H} f_H(\vec{v}, t). \quad (3.13)$$

Esta relación entre  $f_s^{(0)}$  y  $f_H$  conduce directamente a que el flujo de partículas marcadas es nulo en el orden más bajo de su expansión en  $\epsilon$ , es decir  $\bar{J}_s^{(0)} = 0$ , sin más que sustituir en la Ec.(3.11) e integrar.

Considerando en la ecuación (3.3) el primer orden en los gradientes de densidad o, lo que es lo mismo, quedándonos en el primer término del desarrollo en  $\epsilon$ , se establece la siguiente relación que debe cumplir  $f_s^{(1)}$ ,

$$\frac{\partial^{(0)} n_s}{\partial t} \frac{\partial}{\partial n_s} f_s^{(0)} + \frac{\partial T_H}{\partial t} \frac{\partial}{\partial T_H} f_s^{(1)} + (\vec{v} \cdot \nabla n_s) \frac{\partial}{\partial n_s} f_s^{(0)} = J_c [\vec{v}_1, t | f_s^{(1)}, f_H]. \quad (3.14)$$

Esta ecuación puede simplificarse usando el resultado obtenido en el orden más bajo, ya que de las ecuaciones (3.10) y (3.13) se desprenden los siguientes resultados, directamente aplicables a la Ec.(3.14):

$$\frac{\partial^{(0)} n_s}{\partial t} = 0, \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial n_s} f_s^{(0)} = \frac{1}{n_H} f_H. \quad (3.16)$$

Haciendo uso de estos resultados en la ecuación (3.14), ésta toma la forma:

$$\left[ \zeta_H(T_H) T_H(t) \frac{\partial}{\partial T_H} + \Lambda \right] f_s^{(1)} = \frac{1}{n_H} (\vec{v} \cdot \nabla n_s) f_H. \quad (3.17)$$

Cohientemente con la expresión del término independiente de esta ecuación, que es proporcional a  $\nabla n_s$ , proponemos

$$f_s^{(1)}(\vec{r}, \vec{v}, t) = \vec{B}(\vec{v}) \cdot \nabla n_s(\vec{r}, t). \quad (3.18)$$

El nuevo vector introducido,  $\vec{B}(\vec{v})$ , dependerá también del tiempo a través de  $T_H(t)$ , pero no lo indicamos explícitamente para no complicar la notación. Al sustituir la forma (3.18) en la ecuación (3.17), se tiene:

$$\left[ \zeta_H(T_H) T_H(t) \frac{\partial}{\partial T_H} + \Lambda \right] \vec{B}(\vec{v}) = \frac{1}{n_H} \vec{v} f_H. \quad (3.19)$$

Por otro lado, cuando se considera la Ec.(3.18) en la expresión del flujo de partículas se obtiene, en el primer orden del desarrollo en el gradiente de densidad,

$$\bar{J}_s^{(1)} = -D \nabla n_s(\vec{r}, t), \quad (3.20)$$

con un coeficiente de difusión  $D$  dado por:

$$D = -\frac{1}{d} \int d\vec{v} \vec{v} \cdot \vec{B}(\vec{v}). \quad (3.21)$$



Para llegar a la expresión del flujo (3.20), se han hecho consideraciones de simetría e isotropía. En ella, hemos querido resaltar la dependencia de  $\bar{J}_s^{(1)}$  del gradiente de densidad. Volviendo a la ecuación (3.19), multiplicándola por  $\vec{v}$  e integrando respecto de esta variable, se llega fácilmente a

$$\left[ \zeta_H(T_H) T_H(t) \frac{\partial}{\partial T_H} - \nu_D \right] D = -\frac{k_B T_H(t)}{m}, \quad (3.22)$$

en dónde toda la dependencia de la ecuación respecto  $\vec{B}(\vec{v})$  se recoge en la funcional  $\nu_D$ , definida como

$$\nu_D = \frac{\int d\vec{v} \vec{v} \cdot \Lambda \vec{B}(\vec{v})}{\int d\vec{v} \vec{v} \cdot \vec{B}(\vec{v})}. \quad (3.23)$$

Teniendo en cuenta que  $\zeta_H \propto T_H^{1/2}$ , un análisis dimensional de la ecuación (3.22) requiere que la dependencia de  $D$  de la temperatura sea de la forma  $D \propto T^{1/2}$ , por lo que

$$\frac{\partial D}{\partial T_H} = \frac{D}{2T_H}. \quad (3.24)$$

De esta manera, la ecuación (3.22) conduce de forma inmediata a:

$$D = \frac{k_B T_H(t)}{m} \left( \nu_D - \frac{\zeta_H}{2} \right)^{-1}. \quad (3.25)$$

Para obtener una expresión explícita de  $D$ , utilizamos de nuevo la primera aproximación de Sonine, en la cual se retiene el primer término del desarrollo de  $\vec{B}(\vec{v})$  en polinomios de Sonine. Explícitamente, aproximamos  $\vec{B}(\vec{v}) \propto \vec{v} f_M(\vec{v})$ , siendo  $f_M$  la Maxwelliana

$$f_M(\vec{v}_1) = n_H \left( \frac{m}{2\pi k_B T_H(t)} \right)^{d/2} e^{-\frac{m v_1^2}{2k_B T_H(t)}}. \quad (3.26)$$

El resultado final, tras evaluar  $\nu_D$  y  $f_s^{(1)}$ , (ver Apéndice D para más detalles), es:

$$D(\alpha) = D^*(\alpha) \times D_0, \quad (3.27)$$

donde se ha definido una coeficiente adimensional  $D^*$ , cuya expresión en la aproximación considerada es

$$D^*(\alpha) = \frac{4}{(1 + \alpha)^2 - \frac{c^*(\alpha)}{32}(4 + \alpha - 3\alpha^2)}. \quad (3.28)$$

En la expresión anterior  $D_0$  representa el límite elástico del coeficiente de autodifusión en un estado de equilibrio, pero con una temperatura dependiente

del tiempo,  $T_H(t)$ , es decir,

$$D_0 = \frac{\Gamma(d/2)d}{4\pi^{\frac{d-1}{2}}n_H\sigma^{d-1}}\sqrt{\frac{k_B T_H(t)}{m}}. \quad (3.29)$$

Mencionaremos en este punto que, a la hora de comparar nuestros resultados de simulación con esta teoría, tomaremos como estado de referencia una gaussiana con temperatura que depende del tiempo (formalmente  $c^*(\alpha) = 0$  en la Ec.(D.6)), ya que la discrepancia con los resultados obtenidos al considerar órdenes más altos en el desarrollo en polinomios de Sonine no puede ser observada en el rango de valores de los parámetros de los sistemas que vamos a presentar.

Al sustituir la forma de  $D$  y del flujo de densidad (Ecs. (3.27) y (3.11), respectivamente) en la Ec.(3.3) se obtiene, en definitiva, la ecuación de autodifusión para un gas granular a muy baja densidad en el HCS:

$$\frac{\partial}{\partial t}n_s(\vec{r}, t) = D(t)\nabla^2 n_s(\vec{r}, t) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (3.30)$$

Nótese que esta ecuación difiere de la ecuación de autodifusión en un fluido molecular normal, puesto que  $D(t)$ , en el caso inelástico, depende del tiempo. Además, como ya avanzáramos al principio de esta sección,  $D(t)$  muestra una doble dependencia respecto del coeficiente de restitución  $\alpha$ . Por un lado, lo hace explícitamente a través del factor  $D^*(\alpha)$  de la ecuación (3.28) y, por otro lado, también depende de forma intrínseca a través de la evolución temporal de la temperatura  $T_H$ , que está determinada por  $\alpha$ , de acuerdo con la ecuación (B.15), del Apéndice B.

### La ecuación adimensional

Una ecuación de difusión cuyo coeficiente no es constante en el tiempo impide el uso de las medidas del recorrido cuadrático medio de las partículas para obtener, como ocurre en los gases moleculares, un valor del coeficiente de difusión del sistema (en base a las conocidas como relaciones de Einstein [87]). Veremos a continuación, sin embargo, que la dependencia temporal del coeficiente de difusión indicada explícitamente en la Ec.(3.29) puede eliminarse mediante un cambio apropiado de las variables espaciales y temporales.

Consideremos, en primer lugar, la frecuencia de colisión de Boltzmann  $\nu_0$ , correspondiente a un gas con una función de distribución de velocidades Maxwelliana a la temperatura  $T_H(t)$ ,

$$\nu_0(t) = \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(d/2)}n_H\sigma^{d-1}\sqrt{\frac{k_B T_H(t)}{m}}. \quad (3.31)$$

A partir de ella definimos la escalas temporal  $\tau$  y espacial  $\vec{l}$  como

$$\begin{aligned}\tau &= \frac{1}{2} \int_0^t dt' \nu_0(t'), \\ \vec{l} &= \frac{\nu_0}{2} \sqrt{\frac{m}{k_B T_H(t)}} \vec{r}.\end{aligned}\tag{3.32}$$

La escala temporal  $\tau$  proporciona una estimación bastante precisa del número acumulado de colisiones por partícula en el intervalo de tiempo  $[0, t]$ , mientras que la unidad de longitud introducida arriba es proporcional al recorrido libre medio de las partículas. En términos de estas nuevas variables, la ecuación de autodifusión queda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_s(\vec{l}, \tau) = \frac{d}{4} D^*(\alpha) \nabla_l^2 \rho_s(\vec{l}, t),\tag{3.33}$$

donde  $\nabla_l^2$  es el operador Laplaciano en el espacio  $\vec{l}$  y hemos escalado la densidad con la media del sistema,

$$\rho_s = \frac{n_s}{n_H}.\tag{3.34}$$

La ecuación (3.33) es una ecuación de difusión con el coeficiente de difusión constante  $dD^*/4$ . Una ecuación de difusión con coeficiente constante conduce a una relación lineal entre el recorrido libre medio de la partícula y el tiempo, lo que en las escalas  $\vec{l}$  y  $\tau$  usadas se traduce en:

$$\langle (\Delta \vec{l})^2; \tau \rangle = \frac{d^2}{2} D^*(\alpha) \tau.\tag{3.35}$$

Esta última expresión extiende al caso de colisiones inelásticas la bien conocida relación entre el recorrido cuadrático medio de las partículas y el coeficiente de autodifusión en sistemas elásticos [79]. Además, en las variables originales es equivalente a

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle (\Delta \vec{r})^2; t \rangle = 2dD(t).\tag{3.36}$$

En resumen, si representamos frente al tiempo la derivada del recorrido cuadrático medio de las partículas del gas convenientemente escalada,  $\frac{1}{D_0} \frac{\partial}{\partial t} \langle (\Delta \vec{r})^2; t \rangle$ , obtendremos un valor estacionario del que podremos obtener una medida del coeficiente de autodifusión adimensional  $D^*$ . Para contrastarlos con la simulación a densidades no muy pequeñas, nos restaría aún extender estos resultados a la ecuación de Boltzmann-Enskog-Lorentz, a fin de incorporar efectos de volumen excluido. De acuerdo con lo discutido tras la ecuación

(C.18), es sencillo ver que el coeficiente de autodifusión se modifica en la siguiente forma:

$$D_0^E = \frac{d\Gamma(d/2)}{4\pi^{\frac{d-1}{2}} n_H \sigma^{d-1} g_e(\sigma)} \sqrt{\frac{k_B T_H(t)}{m}}. \quad (3.37)$$

Expresión en la que hemos utilizado la función de correlación de pares de equilibrio a densidad  $n_H$  y una distancia  $\sigma$ , representada por  $g_e(\sigma)$ . Esta sencilla relación entre los resultados de la ecuación de Enskog y la ecuación de Boltzmann-Lorentz indica que los resultados de ésta se pueden extrapolar a la de Enskog sin más que escalar con el factor  $g_e(\sigma)$ . Así pues, las conclusiones que hemos obtenido a partir de la ecuación cinética (C.16) son inmediatamente extensibles a la ecuación de Enskog correspondiente.

### 3.1.2 Resultados de Dinámica Molecular

Como apuntábamos al principio de este capítulo, los razonamientos que conducen a la ecuación (3.33), se basan en la validez de la ecuación de Boltzmann inelástica para describir un gas granular a baja densidad. También se ha supuesto que el sistema permanece en el HCS por un período de tiempo suficientemente largo como para alcanzar el régimen hidrodinámico, en el que la ecuación de autodifusión se puede aplicar con garantías. De acuerdo con la discusión del Apéndice B, esto no es evidente en absoluto dadas las inestabilidades que aparecen en el estado de enfriamiento homogéneo de un medio granular. En este sentido, confirmar las predicciones de la teoría de Chapman-Enskog mediante la comparación con los resultados de la simulación del sistema será una forma eficaz de dar validez a nuestras hipótesis respecto a la separación de escalas temporales cinética e hidrodinámica. En este contexto es importante tener siempre presente que la simulación de Dinámica Molecular refleja de manera exacta la dinámica del sistema, sin que se introduzca aproximación alguna más allá de los inevitables errores de redondeo, o los efectos de tamaño finito de la muestra utilizada en la simulación.

Hemos simulado un sistema de discos duros en un dominio cuadrado, sometido a condiciones periódicas de contorno en ambas direcciones del plano. La condición inicial fue siempre una distribución espacial uniforme de partículas y una distribución de velocidades isotropa y homogénea. En las simulaciones primero se dejaba evolucionar el sistema con colisiones elásticas ( $\alpha = 1$ ) entre las partículas durante un período de tiempo suficientemente largo como para que el sistema alcanzase una distribución de velocidades Maxwelliana. Esta configuración ha sido la condición inicial para las simulaciones del gas inelástico ( $\alpha < 1$ ). Las simulaciones realizadas han involucrado  $N = 6400$

partículas y se han promediado los resultados sobre 30 trayectorias. El programa de ordenador utilizado, basado en un algoritmo de Dinámica Molecular conducido por sucesos [88], se describe en el Apéndice A.

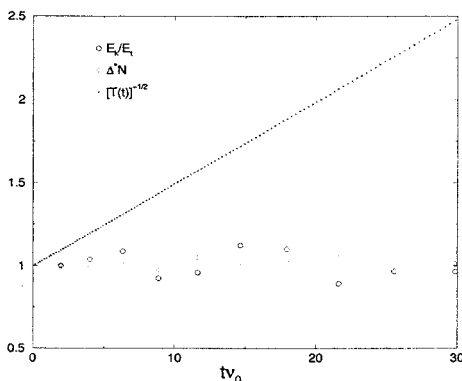


Figura 3.1: Enfriamiento de un gas granular en el HCS; medidas de la densidad cuadrática media, la energía cinética y la temperatura (ver Apéndice B). Todas las magnitudes se han escalado con su valor inicial. Los resultados indican que, en el caso considerado, el sistema está exento de inhomogeneidades en densidad y velocidad. El coeficiente de restitución es  $\alpha = 0.95$ .

Dado que el estado de enfriamiento homogéneo es inestable en ciertas condiciones, en cada una de las simulaciones realizadas, se ha comprobado que ni los valores de la densidad cuadrática ni los del cociente entre la energía cinética macroscópica y la térmica crecieron en el tiempo de manera excesiva, lo que indicaría la aparición en el sistema de inhomogeneidades en densidad y/o velocidad. Para ello hicimos uso de los parámetros definidos en las ecuaciones (B.7 – B.9). Adicionalmente, se controló que la temperatura cumpliera la Ley de Haff (B.3), verificando que al representar  $\sqrt{T(0)/T(t)}$  se obtenía una línea recta. Las mismas tres magnitudes representadas en la Figura B.3 para ilustrar la aparición de inhomogeneidades en el enfriamiento de un gas granular, se representan en la Figura 3.1, esta vez para mostrar que en el sistema ahora considerado no existen inestabilidades aparentes. De esta forma nos aseguramos que el baño de partículas se va enfriando sin alejarse en el transcurso del tiempo del estado de enfriamiento homogéneo.

En la Figura 3.2 presentamos resultados obtenidos en un gas muy diluido con una fracción sólida  $\nu = 4.908 \cdot 10^{-4}$  (ver la definición en la ecuación (B.4)). Haciendo uso de la aproximación a la ecuación de estado de discos

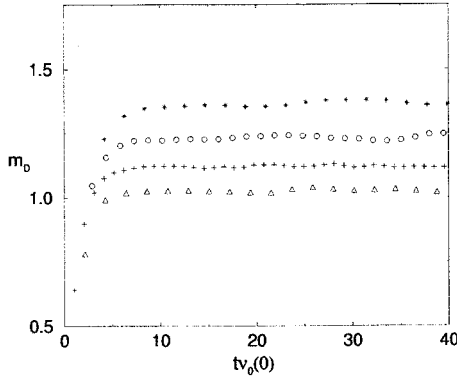


Figura 3.2: Evolución temporal de la pendiente reducida del recorrido cuadrático medio,  $m_D \equiv (4D_0^E)^{-1} \partial_t \langle (\Delta \vec{r})^2 \rangle$ , para  $\alpha = 0.7, 0.8, 0.9, 1$  (de arriba a abajo). La existencia de un comportamiento hidrodinámico es evidente, después de un período transitorio inicial del orden de algunas colisiones por partícula.

duros propuesta en [89], podemos estimar la función de correlación de pares de equilibrio:

$$g_e(\sigma) \simeq 1 + 1.56401\nu + 2.131\nu^2 + 2.49\nu^3 + \mathcal{O}(\nu^4). \quad (3.38)$$

Para la densidad del sistema simulado  $g_e(\sigma) \simeq 1.0008$ . La figura muestra  $m_D \equiv (4D_0^E)^{-1} \partial_t \langle (\Delta \vec{r})^2 \rangle$  como una función de  $tv_0(0)$  para diferentes valores del coeficiente de restitución en el intervalo  $0.7 \leq \alpha \leq 1$ . El tiempo ha sido escalado con la frecuencia de colisión de Boltzmann definida en la Ec.(3.31) para  $t=0$ . Tras un corto régimen transitorio, del orden del tiempo que debe transcurrir para que tengan lugar unas cuantas colisiones, las curvas alcanzan un valor prácticamente constante en el tiempo. Según la predicción teórica, Ec.(3.36), los valores estacionarios de la Fig. 3.2 corresponden a  $D^*(\alpha)$ . La comparación entre esta última y los datos de la simulación se ofrece en la Figura 3.3. En ella se han representado los resultados, para distintos valores del coeficiente de restitución, obtenidos por medio de nuestro algoritmo de Dinámica Molecular y con un algoritmo de Simulación Directa de Monte Carlo (DSMC) para la solución numérica de la ecuación de Boltzmann-Lorentz [49]. También se ha incluido la curva teórica  $D^*(\alpha)$  dada por la Ec.(3.28). Se observa un excelente acuerdo de las simulaciones con la predicción teórica. Más aún, es interesante hacer notar que las pequeñas desviaciones de ambas simulaciones (Dinámica Molecular y Simulación Directa de Monte Carlo) respecto a ella, se

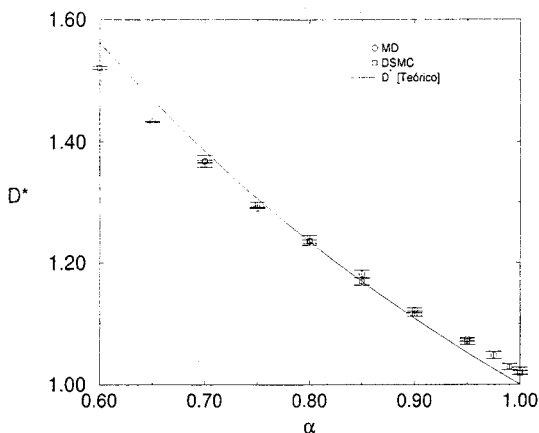


Figura 3.3: Comparación de los coeficientes de autodifusión reducidos para un sistema de discos duros obtenidos por simulación de Dinámica Molecular (MD) y por resolución numérica de la ecuación de Boltzmann-Lorentz (DSMC), con el resultado teórico.

producen en el mismo sentido [86]. Cuando la disipación es pequeña ( $\alpha$  muy próximo a la unidad), la predicción teórica cae por debajo de los resultados de la simulación, y hay un cruce de ambas curvas a medida que aumenta la inelasticidad. Esto parece indicar que la discrepancia se debe en ambos casos al carácter aproximado de la solución de Chapman-Enskog, al haber considerado el primer orden en la aproximación de Sonine. De hecho, es destacable el extraordinario acuerdo entre los resultados obtenidos de la solución numérica de la ecuación de Boltzmann-Lorentz y los obtenidos directamente de nuestra simulación de Dinámica Molecular. Esto sucede a pesar de que comparamos resultados de DSMC para un sistema de  $d = 3$  con los de Dinámica Molecular de discos,  $d = 2$ . La razón de tal acuerdo es que la única dependencia de  $D^*(\alpha)$  en la dimensión  $d$  del sistema tiene lugar a través de la función  $c^*(\alpha)$  y esta cantidad, como ya hemos hecho notar, contribuye de forma inapreciable al coeficiente de autodifusión en el rango de valores de  $\alpha$  que consideramos.

## 3.2 Movimiento browniano en un medio granular diluido

El movimiento ininterrumpido e irregular de partículas diminutas de polen en el agua fue descrito a principios del siglo XIX por el botánico escocés Robert Brown. Formuló así, sin saberlo, uno de los problemas básicos de la Física moderna, que no es posible abordar con una teoría clásica determinista. Más allá de la primera explicación válida ofrecida por Einstein en 1905 [90] y de los posteriores tratamientos alternativos y más formales de Schmoluchowsky (1906), Adrian Daniel Fokker (1916) y Max Planck (1917), existen multitud de aplicaciones del estudio del movimiento Browniano a diversos campos de las ciencias [23, 91, 92], que lo han convertido en uno de los problemas más y mejor estudiados en la historia de la Física Estadística.

El problema de una partícula de gran tamaño en un fluido granular añade al alto valor teórico del problema browniano "clásico", una gran importancia práctica y tecnológica, por lo que pueda ayudar a comprender mecanismos de segregación o mezcla de granos [2, 93]. Veremos que a esto se añade el hecho de que nos proporciona otro argumento de peso a favor de la validez de la descripción hidrodinámica de los medios granulares. Mostraremos que en el caso concreto de una partícula marcada con mucha más masa que las del gas granular que la rodea, la ecuación cinética de Boltzmann-Lorentz puede ser reducida de manera exacta a una ecuación de Fokker-Planck con coeficientes dependientes de la temperatura del gas, que permanece en el estado de enfriamiento homogéneo, y del coeficiente de restitución normal de las colisiones entre la partícula browniana y las del fluido. El espectro del operador de colisión es conocido y la solución exacta puede ser construida de forma que queden patentes los cambios cualitativos que introduce la inelasticidad en el problema browniano. Se encuentra, en particular, que el conocido teorema de fluctuación-disipación no se cumple en el caso inelástico. Como consecuencia de ello, la función de distribución de velocidades final que se establece para tiempos largos corresponde a una Maxwelliana, pero con una temperatura diferente a la del gas. Sin embargo, existe un cambio de variables con el que se consigue que el espectro de la ecuación de Fokker-Planck sea igual al del caso elástico. Hay un número infinito de modos cinéticos y un único modo hidrodinámico difusivo, aunque todos los modos cinéticos se encuentran desplazados levemente debido al enfriamiento. Aun así, para tiempos largos, la dinámica del sistema está dominada por la difusión simple. En tiempo real, en contra de lo que ocurre en el caso elástico, la separación entre estos modos cinéticos e hidrodinámicos es algebraica y no exponencial. Todos estos resultados, como decimos, son una demostración clara de la validez de una teoría hidrodinámica en un sistema con colisiones inelásticas para todos los valores del coeficiente de restitución y dan una indicación precisa de la tendencia a



una región hidrodinámica a partir de cualquier condición inicial.

### 3.2.1 Descripción del movimiento de la partícula browniana en un gas granular

Sea una partícula de masa  $m$  y diámetro  $\sigma$  inmersa en un gas diluido cuyas partículas tienen masa  $m_g$  y diámetro  $\sigma_g$ . Todas las partículas son esferas lisas inelásticas ( $d = 3$ ) o discos lisos inelásticos ( $d = 2$ ). Las colisiones entre la partícula marcada y las del fluido están caracterizadas por un coeficiente de restitución normal  $\alpha$ , mientras que las colisiones entre partículas del gas lo están por  $\alpha_g$ . Aplicando la ecuación de Boltzmann-Lorentz, Ec.(C.16), a la función de distribución de la partícula marcada  $F(\vec{r}, \vec{v}, t)$ , resulta:

$$(\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla) F(\vec{r}, \vec{v}, t) = J_c[\vec{r}, \vec{v}, t|F, f], \quad (3.39)$$

con el operador de colisión dado por

$$J_c[\vec{r}, \vec{v}, t|F, f] = \sigma_0^{d-1} \int d\vec{v}_1 \int d\hat{\sigma} \Theta(\vec{g} \cdot \hat{\sigma})(\vec{g} \cdot \hat{\sigma}) \\ \times [\alpha^{-2} F(\vec{r}, \vec{v}^*, t) f(\vec{r}, \vec{v}_1^*, t) - F(\vec{r}, \vec{v}, t) f(\vec{r}, \vec{v}_1, t)]. \quad (3.40)$$

Como es habitual,  $f(\vec{r}, \vec{v}_1, t)$  es la función de distribución monoparticular del gas,  $\Theta$  es la función escalón de Heaviside y  $\hat{\sigma}$  un vector unitario que apunta desde el centro de la partícula 1 al centro de la partícula marcada cuando ambas están en contacto (como en la Figura 2.1). Por último la distancia  $\sigma_0 = (\sigma + \sigma_g)/2$  es la semisuma de los diámetros  $\sigma$  y  $\sigma_g$  de la partícula marcada y de las del gas, respectivamente. Las velocidades antes de la colisión  $\vec{v}_1^*$  y  $\vec{v}^*$  de una partícula del fluido con la browniana, que después de la colisión dan lugar a las velocidades  $\vec{v}$  y  $\vec{v}_1$ , están dadas por

$$\vec{v}^* = \vec{v} - \frac{(1 + \alpha)\Delta}{\alpha(1 + \Delta)}(\vec{g} \cdot \hat{\sigma})\hat{\sigma} \\ \vec{v}_1^* = \vec{v}_1 + \frac{(1 + \alpha)}{\alpha(1 + \Delta)}(\vec{g} \cdot \hat{\sigma})\hat{\sigma}. \quad (3.41)$$

En las expresiones anteriores,  $\vec{g} = \vec{v} - \vec{v}_1$  es la velocidad relativa de las partículas que colisionan y  $\Delta$  es el cociente de sus masas,  $\Delta = m_g/m$ .

La distribución  $f(\vec{r}, \vec{v}_1, t)$  debe ser una solución de la ecuación de Boltzmann inelástica y las colisiones entre partículas del gas estarán gobernadas por las leyes de colisión (B.1) y (B.2). Consideraremos el gas en el estado de enfriamiento homogéneo que, como sabemos, está descrito por una solución de la forma [94]:

$$f_H(\vec{v}, t) = n_g v_g^{-d}(t) \phi\left(\frac{v}{v_g(t)}\right). \quad (3.42)$$

donde  $v_g(t) = [2k_B T_g(t)/m_g]^{1/2}$  es la velocidad térmica de las partículas del gas. La forma explícita de  $\phi$  no será dada aquí, aunque es conocida en la denominada segunda aproximación de Sonine, Ec.(D.6). Por otro lado, la densidad numérica  $n_g$  y la temperatura del gas,  $T_g(t)$ , se definen de la forma habitual,

$$n_g = \int d\vec{v} f_H(\vec{v}, t), \quad \frac{d}{2} n_g k_B T_g(t) = \int d\vec{v} \frac{1}{2} m_g v^2 f_H(\vec{v}, t), \quad (3.43)$$

siendo  $d$ , de nuevo, la dimensión del sistema.

Como vimos en la sección anterior y tal como se detalla en el Apéndice B, la temperatura del gas disminuye algebraicamente en el tiempo, siguiendo la ley de Haff, con una velocidad de enfriamiento, dada en la Ec.(2.13), que se puede calcular a partir de la ecuación de Boltzmann en función del coeficiente de restitución  $\alpha$ .

En el caso especial de una partícula con mucha masa inmersa en un gas libre inelástico muy diluido, la ecuación de Boltzmann-Lorentz se simplifica a una ecuación de Fokker-Planck, haciendo una expansión formal en el cociente de masas  $\Delta$ , quedándonos en el orden más bajo y tomando el límite  $\Delta \rightarrow 0$ . Los detalles de dicha expansión, así como una discusión sobre el ámbito de validez del desarrollo, se presentan en el Apéndice E donde se considera, además, el caso particular de un estado de enfriamiento homogéneo del gas, en cuyo caso la ecuación de Fokker-Planck resultante es:

$$(\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla) F(\vec{r}, \vec{v}, t) = \mathcal{L}[T_g(t)] F(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (3.44)$$

con

$$\mathcal{L}(T_g) = \gamma_e(T_g) a_0(\alpha) \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left[ \vec{v} + \frac{k_B T_g}{m} a_0(\alpha) \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right], \quad (3.45)$$

siendo  $\gamma_e(T_g)$  la constante de fricción en el caso elástico, salvo que aquí es función del tiempo a través de la temperatura  $T_g$  (véanse las Ecs. (B.15) y (B.17)). Explícitamente:

$$\gamma_e(T_g) = \frac{4\pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma_0^{d-1} n_g \Delta^{1/2}}{d\Gamma(\frac{d}{2})} \left( \frac{2k_B T_g}{m} \right)^{1/2}. \quad (3.46)$$

La inelasticidad de las colisiones entre la partícula marcada y las del gas aparece en la ecuación a través de  $a_0$ , que es una función del coeficiente de restitución  $\alpha$ ,

$$a_0(\alpha) = \frac{1 + \alpha}{2}. \quad (3.47)$$

La relación de fluctuación-disipación existente en el caso elástico, por la que se relacionan los coeficientes de la ecuación (3.44), se viola en este caso por la aparición del factor adicional  $a_0(\alpha)$ . En realidad, la ecuación (3.44) es consecuencia de una extensión del método general para partículas elásticas [79], si bien presenta la singularidad importante de restringirse al límite distinguido definido por  $\Delta \rightarrow 0$  y  $\alpha_g \rightarrow 1$ , pero manteniéndose

$$\epsilon_0 \equiv \frac{\zeta[T_g(t)]}{2a_0(\alpha)\gamma_e[T_g(t)]} = \frac{1 - \alpha_g^2}{4\sqrt{2}a_0(\alpha)\Delta} \left(\frac{\sigma_g}{\sigma_0}\right)^{d-1} \quad (3.48)$$

constante y menor que la unidad.

Así, además de un cociente de masas pequeño, la disipación del gas debe ser débil (aunque no haya limitaciones para la disipación en las colisiones de la browniana caracterizada por el coeficiente  $\alpha$ ). Para entender esto, consideremos la temperatura de la partícula browniana, definida a partir de su energía cinética media,

$$\frac{d}{2}k_B T = \int d\vec{r} \int d\vec{v} \frac{1}{2}m(\vec{v} - \vec{u})^2 F(\vec{r}, \vec{v}), \quad (3.49)$$

donde

$$\vec{u}(t) = \int d\vec{r} \int d\vec{v} \vec{v} F(\vec{r}, \vec{v}), \quad (3.50)$$

es la velocidad media de la partícula marcada. Multiplicando la ecuación de Fokker-Planck por  $\vec{v}$  y  $v^2$  e integrando respecto a  $\vec{v}$ , se obtienen las ecuaciones:

$$\partial_t \vec{u} = -\gamma_e(T_g)a_0(\alpha)\vec{u}, \quad (3.51)$$

$$[\partial_t + 2\gamma_e(T_g)a_0(\alpha)(1 - \epsilon_0)] \frac{T(t)}{T_g(t)} = 2\gamma_e(T_g)a_0^2(\alpha). \quad (3.52)$$

En la primera se observa que la velocidad media decae en el tiempo debido a las colisiones con el gas como  $\gamma_e a_0$ , mientras la temperatura lo hace como  $2\gamma_e a_0$ . Esto avala la interpretación de  $\epsilon_0$  en la ecuación (3.48) como el cociente del enfriamiento del gas respecto del de la partícula marcada. Consecuentemente,  $-2\gamma_e a_0(1 - \epsilon_0)$  en (3.52) representa la diferencia entre esos dos decaimientos, y expresa que la tendencia de la browniana a enfriarse respecto al gas que la rodea se ve “frustrada” debido al enfriamiento de éste. Las soluciones de las ecuaciones de los momentos (3.51) y (3.52) son:

$$\vec{u}(t) = [U(t)]^{\frac{1}{2(1-\epsilon_0)}} \vec{u}(0), \quad (3.53)$$

$$\frac{T(t)}{T_g(t)} = U(t) \frac{T(0)}{T_g(0)} + a_0(\alpha) \frac{1}{(1-\epsilon_0)} [1 - U(t)], \quad (3.54)$$

donde se ha definido el operador de evolución,

$$U(t) = \left(1 + \frac{\zeta[T_g(0)]}{2} t\right)^{-\frac{2(1-\epsilon_0)}{\epsilon_0}}. \quad (3.55)$$

Obsérvese que este decaimiento de  $U(t)$  es similar al comportamiento algebraico de la temperatura  $T_g(t)$  de la ecuación (B.3) pero con distinto exponente, lo que refleja las diferencias en la evolución de las dos temperaturas. Es interesante conocer la evolución de la razón de las temperaturas de la partícula marcada y del gas, ya que, como se muestra en Apéndice E, los coeficientes en la expansión en  $\Delta$  dependen de ella. Se desprende del resultado (3.55) que para  $\epsilon_0 \geq 1$  la temperatura de la browniana crece sin límite respecto a  $T_g$ , mientras que en el caso contrario,  $\epsilon_0 < 1$ , el cociente de ambas se aproxima al valor constante

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{T(t)}{T_g(t)} = \frac{a_0(\alpha)}{1 - \epsilon_0}. \quad (3.56)$$

Esto explica la condición  $\epsilon_0 < 1$  anunciada anteriormente.

Aunque del resultado (3.56) se infiera que, si  $\epsilon_0 < 1$ , la velocidad de enfriamiento de las partículas del gas y de la marcada tienden al mismo valor, es importante notar que las temperaturas asintóticas respectivas pueden ser diferentes. Así, en el rango  $\frac{1-\alpha}{2} < \epsilon_0 < 1$ , la temperatura de la partícula marcada será mayor, mientras que para  $0 < \epsilon_0 < \frac{1-\alpha}{2}$ , la temperatura del gas que la rodea será superior. Igualmente, se desprende de (3.55), que las soluciones se aproximan a su valor asintótico algebraicamente y no exponencialmente en el tiempo real,

$$T(t) \rightarrow \frac{a_0(\alpha)}{1 - \epsilon_0} T_g(t) = \frac{a_0(\alpha)}{1 - \epsilon_0} T_g(0) \left( 1 + \frac{\zeta[T_g(0)]}{2} t \right)^{-2}. \quad (3.57)$$

Dos efectos por los que hemos pasado someramente con anterioridad compiten entre sí, dando lugar a esta diferencia entre los valores asintóticos de las temperaturas. Por un lado, la inelasticidad de las colisiones entre la partícula pesada y las del gas tiende a disminuir la temperatura de la browniana  $T$ . Por lo tanto, incluso si el gas es elástico ( $\epsilon_0 = 0$ ), de (3.57) se desprende que  $T/T_g \rightarrow a_0(\alpha) < 1$ . Por otro lado, el enfriamiento de las partículas del gas tiende a hacer  $T_g$  demorarse frente a  $T$ , a pesar del hecho de que la velocidad de enfriamiento de  $T$ ,  $2\gamma_e(T_g)a_0(\alpha)$ , se asuma mayor que la velocidad de enfriamiento de las partículas del gas,  $\zeta(T_g)$ . Consecuentemente, incluso si la partícula marcada colisiona elásticamente con las del gas ( $a_0 = 1$ ), la ecuación (3.57) predice  $T/T_g \rightarrow (1 - \epsilon_0)^{-1} > 1$ . Nótese que ambos efectos se compensan exactamente sólo si  $\epsilon_0 = (1 - \alpha)/2$ .

En ausencia de fuerzas externas o condiciones de contorno, no hay solución estacionaria para la ecuación de Fokker-Planck, debido a la dependencia temporal explícita de la temperatura del gas  $T_g(t)$ . Sin embargo, sí que existe un estado análogo al de enfriamiento homogéneo del gas, definido en la ecuación (3.42), dado por

$$F_H(\vec{v}, t) = \Omega^{-1} v_0^{-d}(t) \Phi(v/v_0(t)), \quad (3.58)$$

donde  $\Omega$  es el volumen del sistema y  $v_0(t) = [2k_B T(t)/m]^{1/2}$  es la velocidad térmica de la partícula marcada. Si se sustituye esta forma en (3.44), se obtiene:

$$-\frac{1}{2T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot [\vec{v} F_H(\vec{v}, t)] = \mathcal{L}[T_g(t)] F_H(\vec{v}, t), \quad (3.59)$$

que, haciendo uso de la ecuación de la temperatura (3.52), se puede transformar en

$$\frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left[ \vec{v} + \frac{k_B T(t)}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right] F_H(\vec{v}, t) = 0, \quad (3.60)$$

una de cuyas soluciones es

$$F_H(\vec{v}, t) = \Omega^{-1} \frac{v_0^{-d}(t)}{\pi^{d/2}} e^{-v^2/v_0^2(t)}. \quad (3.61)$$

Los detalles del cálculo que lleva a la ecuación (3.60) se pueden consultar en el Apéndice E.

En consecuencia, el estado de enfriamiento homogéneo de la partícula marcada es exactamente Maxwelliano, como lo es para el movimiento browniano en un gas elástico, pero introduciendo una dependencia en el tiempo a través de la temperatura. La importancia de esta solución especial radica en que la solución general, que puede ser obtenida de forma similar a como se hace en el caso elástico, tiende a  $F_H(\vec{v}, t)$  para tiempos largos.

### 3.2.2 La ecuación de Fokker-Planck en variables reducidas

A continuación reformularemos el problema desde un nuevo punto de vista que consiste, básicamente, en trasladar la ecuación a unas escalas espacial y temporal que nos permitan establecer una analogía con el problema de la partícula browniana en un fluido molecular. Dichas escalas son en cierto modo similares a las usadas en el problema de la autodifusión de la sección 3.1. La mayor ventaja de este tratamiento es su idoneidad para el estudio de la difusión de la browniana, problema que usaremos como prueba de la validez del desarrollo hecho a partir de la ecuación de Boltzmann-Lorentz.

Consideremos de nuevo la ecuación (3.44) y el gas granular que rodea a la partícula browniana en el estado de enfriamiento homogéneo y por tanto caracterizado por una temperatura dependiente del tiempo cuya evolución está marcada por la ecuación (E.21). Definimos el siguiente cambio de variables:

$$\vec{v}^* = \frac{\vec{v}}{\hat{v}_0(t)}, \quad \vec{r}^* = a(1 - \epsilon_0) \frac{\gamma_e(t)}{\hat{v}_0(t)} \vec{r}, \quad t^* = a_0(\alpha)(1 - \epsilon_0) \int_0^t dt' \gamma_e(t'), \quad (3.62)$$

donde  $\hat{v}_0(t) \equiv [2k_B T_g(t) a_0(\alpha) / m(1 - \epsilon_0)]^{1/2}$  y volvemos a hacer uso de  $\epsilon_0$ , ya introducido en la Ec.(3.48). Como ya hemos discutido,  $\epsilon_0$  es una cantidad independiente del tiempo y las definiciones anteriores son válidas tan sólo para  $\epsilon_0 < 1$ , consistentemente con la deducción de la ecuación (3.44) llevada a cabo en el Apéndice E. La ecuación (3.44) se transforma, en las nuevas variables, en

$$\left( \partial_{t^*} + \vec{v}^* \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}^*} \right) F^*(\vec{r}^*, \vec{v}^*, t^*) = \frac{\partial}{\partial \vec{v}^*} \cdot \left( \vec{v}^* + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \vec{v}^*} \right) F^*(\vec{r}^*, \vec{v}^*, t^*), \quad (3.63)$$

donde se ha escalado la densidad de probabilidad mediante

$$F^*(\vec{r}^*, \vec{v}^*, t^*) = \frac{\hat{v}_0^{2d}(t)}{[a(1 - \epsilon_0)\gamma_e(t)]^d} F(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (3.64)$$

estando, como  $F$ , normalizada a la unidad. La forma de la ecuación (3.63) es idéntica a la correspondiente al movimiento browniano en el caso elástico ( $\alpha = \alpha_g = 1$ ). Consecuentemente, pueden ponerse en correspondencia las propiedades físicas de una partícula marcada más pesada que choca inelásticamente con las de un gas granular en un estado de enfriamiento homogéneo con las de una partícula elástica inmersa en un gas en equilibrio. Las únicas diferencias son las escalas espaciales y temporales relevantes. Por ejemplo, si bien la relación entre el tiempo real y el escalado es lineal en el caso elástico,  $t^* = \gamma_e t$ , cuando las colisiones son inelásticas la relación es más complicada,

$$t^* = \frac{1 - \epsilon_0}{\epsilon_0} \ln \left[ 1 + \frac{\zeta(0)}{2} t \right], \quad (3.65)$$

resultando que la escala de tiempo se comprime logarítmicamente.

La solución general del problema (3.63) para un sistema infinito es conocida [95]:

$$F^*(\vec{r}^*, \vec{v}^*, t^*) = \int d\vec{r}^{*'} \int d\vec{v}^{*'} G^*(\vec{r}^*, \vec{v}^*, t^*; \vec{r}^{*'}, \vec{v}^{*'}, 0) F^*(\vec{r}^{*'}, \vec{v}^{*'}, 0), \quad (3.66)$$

con

$$G^*(\vec{r}^*, \vec{v}^*, t^*; \vec{r}^{*'}, \vec{v}^{*'}, 0) = \left[ \frac{e(t^*) b(t^*)}{\pi^2} \right]^{d/2} \times \exp \left\{ -e(t^*) [\vec{r}^* - \vec{r}^{*'} - c(t^*)(\vec{v}^* + \vec{v}^{*'})]^2 - b(t^*) (v^* - e^{-t^*} v^{*'}) \right\}. \quad (3.67)$$

En las expresiones anteriores hemos definido

$$e(t^*) = \frac{1}{2[t^* - 2c(t^*)]}, \quad b(t^*) = \frac{1}{1 - e^{-2t^*}}, \quad c(t^*) = \frac{1 - e^{-t^*}}{1 + e^{-t^*}}. \quad (3.68)$$

Consideremos en primer lugar un estado inicial de la partícula marcada espacialmente homogéneo, es decir,  $F^*(\vec{r}^*, \vec{v}^*, 0) = F^*(\vec{v}^*, 0)$ . En ese caso, la ecuación (3.66) se simplifica a

$$F^*(\vec{v}^*, t^*) = \left[ \frac{b(t^*)}{\pi} \right] \int d\vec{v}^{\prime} \exp \left[ -b(t^*) (\vec{v}^* - e^{-t^*} \vec{v}^{\prime})^2 \right] F^*(\vec{v}^{\prime}, 0). \quad (3.69)$$

Para tiempos largos,  $t^* \gg 1$ , se puede comprobar que  $b(t^*) \rightarrow 1$  y por lo tanto la expresión anterior se simplifica

$$F^*(\vec{v}^*, t^*) \rightarrow F_M^*(v^*) = \frac{1}{\Omega^*} \pi^{-d/2} e^{-v^{*2}}, \quad (3.70)$$

donde  $\Omega^*$  es el volumen del sistema medido en la escala espacial reducida, definida en la ecuación (3.62). Este resultado describe el estado de enfriamiento homogéneo para la partícula browniana, que ya fue obtenido en la sección anterior, Ec.(3.58), y que aparece en este formalismo de manera natural. Para una discusión detallada de este estado, nos remitimos a lo ya dicho allí. Ahora nos vamos a centrar en la expresión que tiene la ecuación de la temperatura de la partícula marcada, Ec.(3.54), en las nuevas variables escaladas definidas en (3.62),

$$\frac{T(t^*)}{T_g(t^*)} = \frac{\alpha_0}{1 - \epsilon_0} + e^{-2t^*} \left[ \frac{T(0)}{T_g(0)} - \frac{\alpha_0}{1 - \epsilon_0} \right]. \quad (3.71)$$

El acercamiento de la temperatura  $T$  a su valor asintótico  $T_\infty$  es exponencialmente rápido en la escala de tiempo reducida (mientras que como se desprende de la Ec.(3.54), es algebraico en la escala original). Comprobamos que  $T_\infty(t) \neq T_g(t)$ , incluso en el caso de colisiones elásticas para la partícula marcada, si el gas es inelástico. Y al contrario; si las partículas del gas son elásticas pero la colisión con la partícula marcada es inelástica,  $\epsilon_0 = 0$  y la partícula marcada se aproxima a una temperatura constante que difiere de  $T_g$  en un factor  $\alpha_0$ . El resultado dado por la ecuación (3.71) se aplica incluso para estados inhomogéneos arbitrarios de la partícula browniana (ver su deducción en el Apéndice E).

Consideremos a continuación un estado inicial cuya distribución de velocidades está dada por el estado de enfriamiento homogéneo Maxwelliano, pero con una inhomogeneidad espacial. Explícitamente tomemos

$$F^*(\vec{r}^*, \vec{v}^*, 0) = n^*(\vec{r}^*, 0) \pi^{-d/2} e^{-v^{*2}}, \quad (3.72)$$

donde  $n^*(\vec{r}^*, 0)$  es la densidad de probabilidad de encontrar la partícula marcada en la posición  $\vec{r}^*$  en el instante  $t = 0$ . La misma magnitud en el instante  $t^*$  la podemos obtener integrando  $F^*(\vec{r}^*, \vec{v}^*, t^*)$  de la ecuación (3.66) respecto

a  $\vec{v}^*$ , resultando

$$n^*(\vec{r}^*, t^*) = \left[ \frac{d}{2\pi l^{*2}(t^*)} \right]^{d/2} \int d\vec{r}^{*'} \exp \left[ -d(\vec{r}^* - \vec{r}^{*'})^2 / 2l^{*2}(t^*) \right] n^*(\vec{r}^{*'}, 0), \quad (3.73)$$

donde

$$l^{*2}(t^*) = d(t^* - 1 + e^{-t^*}). \quad (3.74)$$

Se puede verificar fácilmente que  $l^{*2}(t^*)$  es el recorrido libre medio de la partícula marcada en las variables adimensionales. Más aún, derivando (3.73) se comprueba directamente que  $n^*(\vec{r}^*, t^*)$  cumple la ecuación de difusión generalizada

$$\partial_t n^*(\vec{r}^*, t^*) = (1 - e^{-t^*}) D^* \nabla^{*2} n^*(\vec{r}^*, t^*), \quad (3.75)$$

con  $D^* = 1/2$ . Esta ecuación es exacta para todo tiempo si la condición inicial tiene la forma asumida, e indica casi directamente el alcance de la escala hidrodinámica. La ecuación de difusión usual es la que rige la evolución de la partícula browniana para  $t^* \gg 1$ , y la ecuación exacta se aproxima a ella exponencialmente sobre la escala reducida. Por otro lado, el valor de  $D^* = 1/2$  es consistente con el resultado de Einstein [90], cumpliéndose

$$D^* = \frac{1}{2d} \lim_{t^* \rightarrow \infty} \frac{l^{*2}(t^*)}{t^*}. \quad (3.76)$$

Para unas condiciones iniciales más generales, la dinámica del sistema es cualitativamente similar. El sistema alcanza un equilibrio homogéneo tras una rápida relajación de las velocidades y una posterior difusión espacial. Haciendo uso de la expresión de la densidad de la partícula browniana,

$$n(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} F(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (3.77)$$

y deshaciendo los cambios de variable, la ecuación de difusión en las escalas originales resulta ser

$$\left\{ \partial_t - \frac{D_e[T_g(t)]}{(1 - \epsilon_0)^2} \nabla^2 \right\} n(\vec{r}, t) = 0, \quad (3.78)$$

y el coeficiente de difusión se puede expresar en términos del valor asintótico de la temperatura de la partícula pesada para tiempos largos, es decir usando la Ec.(3.56):

$$D_e[T_g(t)] = \frac{k_B T}{m \gamma_{eff}[T_g(t)]}. \quad (3.79)$$

Obsérvese que la segunda parte de la igualdad tiene una forma análoga a la del caso elástico, salvo por la presencia de un coeficiente de fricción efectivo



$\gamma_{eff}[T_g(t)] = (1 - \epsilon_0)a_0(\alpha)\gamma_e[T_g(t)]$ , el cual caracteriza el cambio del valor medio de la velocidad de las partículas relativo a la velocidad térmica del gas.

Un análisis exacto del espectro del operador de Fokker-Planck de la ecuación (3.44) confirma la separación de las escalas temporales en todo el rango de valores del parámetro de inelasticidad y ofrece, por tanto, un ejemplo concreto que justifica el uso de las ecuaciones hidrodinámicas para sistemas granulares. Aunque no haya un estado asintótico estacionario, cualquier condición inicial impuesta relaja, vía modos cinéticos rápidos, a un modo difusivo dominante. Éste a su vez evoluciona, en una escala de tiempo mayor, a un estado homogéneo dependiente del tiempo y caracterizado por su temperatura. El enfriamiento del sistema durante la relajación cinética y difusiva pasa de ser exponencial a algebraico en el tiempo como consecuencia de la inelasticidad. Resta por confirmar aún la validez del análisis asintótico que conduce a la ecuación de Fokker-Planck [96].

A este respecto, vamos a contrastar en la próxima sección medidas del recorrido cuadrático medio tomadas en las simulaciones de una partícula pesada inmersa en un gas granular con la expresión teórica (3.74). Esto servirá para delimitar la validez del desarrollo propuesto. Con idéntico propósito, mediremos la evolución temporal de la temperatura de la browniana y su relajación al estado asintótico, descrito en nuestro esquema teórico por la ecuación (3.54).

### 3.2.3 Simulación de una partícula browniana inmersa en un gas granular

Todo el análisis previo se basa en la validez de la ecuación de Boltzmann-Lorentz para describir la evolución temporal de una partícula marcada en el seno de un gas poco denso cuando todas las colisiones son inelásticas. Ahora presentamos la simulación mediante Dinámica Molecular de una partícula pesada en un baño granular bidimensional. Desde un punto de vista computacional, este estudio requiere la simulación de un sistema suficientemente grande, a fin de que el estado del baño no sea perturbado por el movimiento de la browniana. Este condicionante, unido a la necesidad de conseguir estadísticas suficientemente representativas, implica el uso de una cantidad considerable de tiempo de ordenador.

#### Dinámica Molecular (DM)

Hemos simulado un sistema de discos duros ( $d = 2$ ) en un dominio cuadrado con condiciones periódicas de contorno. El gas está compuesto por  $N = 3025$  partículas y todos los resultados que vamos a presentar están promediados sobre 500 trayectorias distintas de la partícula browniana, generada cada una mediante una ejecución diferente del programa. La partícula mar-

cada y las del gas se han tomado del mismo tamaño ( $\sigma = \sigma_g$ ). La condición inicial se ha generado dejando evolucionar libremente el gas, sin la partícula browniana, durante un período de tiempo suficientemente largo como para permitir que el sistema alcanzase el estado de enfriamiento homogéneo. Entonces, una de las partículas componente del gas, elegida al azar, se ha sustituido por una partícula con una masa mayor, cambiando el valor su masa por un nuevo valor. La técnica de simulación empleada está descrita en el Apéndice A.

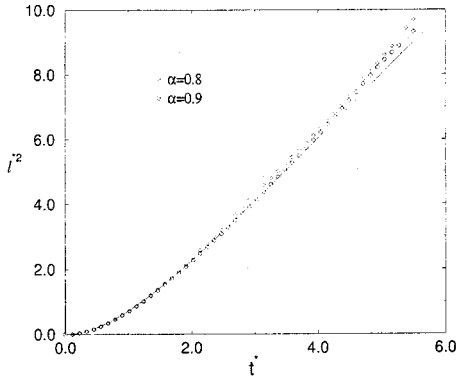


Figura 3.4: Evolución temporal del recorrido cuadrático medio de una partícula browniana en un gas diluido de partículas inelásticas, usando la técnica de DM. El cociente entre las masas es  $\Delta = 0.02$  y se han considerado dos valores del coeficiente de restitución para colisiones de la partícula marcada:  $\alpha = 0.9$  (cuadrados) y  $\alpha = 0.8$  (círculos). El coeficiente de restitución para las colisiones dentro del baño es  $\alpha_g = 0.99$ . Las magnitudes están medidas en las unidades reducidas adimensionales definidas en el texto, Ec.(3.62). La línea continua es la predicción teórica de la ecuación de Fokker-Planck, Ec.(3.74).

La Figura 3.4 muestra los resultados obtenidos para la evolución temporal del recorrido cuadrático medio de la partícula marcada en un sistema con coeficiente de restitución  $\alpha_g = 0.99$  y un cociente de masas  $\Delta = 0.02$ . La densidad del gas es  $n\sigma^2 = 1.322 \cdot 10^{-3}$ , lo que corresponde a una fracción sólida de  $\nu = 1.039 \cdot 10^{-3}$ . Se incluyen los valores correspondientes a dos valores del coeficiente de restitución para las colisiones de la partícula pesada con las del gas,  $\alpha = 0.9$  y  $\alpha = 0.8$ . La línea continua es la predicción dada por la ecuación (3.74). Se observa un buen acuerdo, lo que constituye una prueba convincente de la validez de la ecuación cinética incluso antes de que el sistema

alcance el régimen difusivo, ya que desde tiempos cortos, del orden de algunas colisiones por partícula, el acuerdo de la predicción teórica con la simulación es excelente. Resultados similares han sido encontrados para otros valores de los parámetros. Como se desprende de la Ec.(3.74), es posible medir el coeficiente de difusión de la partícula marcada a partir del recorrido cuadrático medio.

En la Figura 3.4 se observa que la discrepancia entre la teoría y la simulación aumenta con el tiempo. Este es un efecto estadístico que decrece conforme se aumenta el número de trayectorias consideradas para promediar, como se observa aún más claramente en la Figura 3.5, en la que se presenta la evolución temporal de la temperatura de la browniana para las simulaciones correspondientes a  $\alpha = 0.9$  de la Figura 3.4. Aunque estos resultados son consistentes con las predicciones de la ecuación de Fokker-Planck, las fluctuaciones son demasiado grandes como para hacer una comparación cuantitativa detallada.

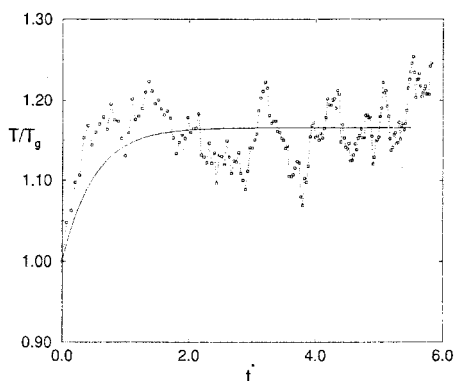


Figura 3.5: Evolución temporal de la temperatura de la browniana para el sistema considerado en la Figura 3.4 con  $\alpha = 0.9$ . La temperatura está escalada con la temperatura del gas. La línea continua es la predicción teórica de la Ec.(3.54). El tiempo está medido en las unidades reducidas, Ec.(3.62).

En esta misma línea, añadiremos que, a la hora de comparar los resultados obtenidos mediante DM con otros obtenidos haciendo uso del método de simulación directa de Monte Carlo que presentaremos a continuación, hay que tener presente que el número de trayectorias consideradas en este segundo método es del orden de 200 veces mayor que las que se han usado en las

simulaciones de DM. A esto hay que sumar la dificultad añadida de que el gas que rodea a la browniana en las simulaciones de DM no es una condición impuesta a la simulación, como ocurre en el método de simulación directa de Monte Carlo, sino que se ve afectado por la dinámica de la propia browniana. Este efecto disminuye a medida que decrece la diferencia de masas entre los componentes del gas y la partícula browniana. El desarrollo teórico hecho, sin embargo, se centra en el límite contrario, es decir, en el límite en que  $\Delta \rightarrow 0$ . En este límite, se consigue un baño de partículas alrededor de la browniana cuando el número de partículas del gas es infinito. Con el algoritmo empleado (véase el Apéndice A), el tiempo de computación aumenta aproximadamente como  $\mathcal{O}(N^2)$ . Eso significa que el número de partículas en el baño no puede ser demasiado grande, si se pretenden hacer promedios sobre diversas trayectorias. Debemos establecer un compromiso entre el tamaño del gas que rodea a la partícula marcada ( $N$ ) y el cociente de masas ( $\Delta$ ), de forma que, permaneciendo dentro del límite en el que la descripción que ofrece la ecuación de Fokker-Planck sea válida, el tiempo empleado en el cálculo sea razonable y nos permita alcanzar valores con significado estadístico.

### Simulación directa de Monte Carlo (DSMC)

Este método de simulación se ha usado en el presente contexto para dar validez al análisis formal presentado que lleva a la ecuación de Fokker-Planck a partir de la ecuación de Boltzmann-Lorentz. El algoritmo [85] ha sido aplicado en numerosas ocasiones para el estudio de los medios granulares [81, 83] y en esencia es un método de resolución numérica de la ecuación de Boltzmann. Su adaptación a la ecuación de Boltzmann-Lorentz es inmediata. En lo que nos concierne, ha sido aplicado específicamente a las predicciones de relajación de la distribución de velocidades de la browniana a una Maxwelliana con una nueva temperatura así como la existencia de un coeficiente de difusión dependiente de la inelasticidad [96]. A continuación presentamos algunos resultados de simulaciones de un sistema de esferas con cociente de masas  $\Delta = 1 \cdot 10^{-2}$ , de igual diámetro y un coeficiente de restitución normal para colisiones entre las partículas del gas  $\alpha_g = 0.99$ . Estos valores aseguran que  $\epsilon_0$  sea  $\epsilon_0 < 1$  para cualquier valor de  $\alpha$  ( $0 < \alpha \leq 1$ ), de modo que estamos en las condiciones en las que es válido el desarrollo teórico que hemos presentado.

En las simulaciones se han generado  $10^5$  trayectorias de la partícula marcada (llamamos la atención sobre la diferencia con las conseguidas en la simulación de DM). Independientemente de la posición, las colisiones de la partícula marcada siempre tuvieron lugar contra partículas de un gas homogéneo cuya función de distribución era de la forma indicada en la Ec.(3.42), con una temperatura del gas determinada por la ley (B.15).

La Figura 3.6 muestra una comparación detallada de los valores numéricos asintóticos de la ecuación (3.56) para diferentes valores de  $\alpha$ . El acuerdo

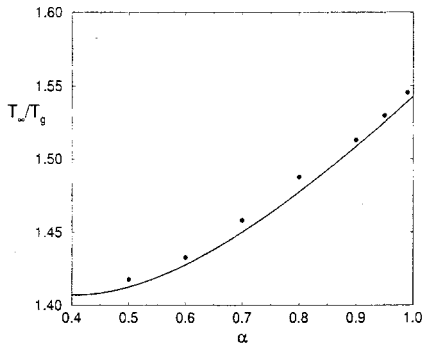


Figura 3.6: Valor asintótico del cociente de la temperatura de la partícula pesada  $T$  y la del gas granular  $T_g$  en función del coeficiente de restitución normal  $\alpha$  para colisiones entre la partícula marcada y las del fluido. La línea es la predicción de la ecuación de Fokker-Planck y los puntos son simulaciones numéricas de la ecuación de Boltzmann-Lorentz para un sistema tridimensional, cuyos detalles se describen en el texto.

con la teoría es muy bueno, considerando que las correcciones al límite de Fokker-Planck son del orden de  $\Delta^{1/2}$ . De hecho, como era de esperar, el acuerdo aumenta si se disminuye el cociente de masas y se aumenta el coeficiente de restitución del gas  $\alpha_g$  de forma que el valor de  $\epsilon_0$  se mantenga constante. El carácter gaussiano del estado de enfriamiento de la partícula marcada se puede estudiar a través del cuarto momento de la función de distribución monoparticular, o mejor aún, de su expresión normalizada  $3\langle v^4 \rangle / 5\langle v^2 \rangle^2$ , que en el caso gaussiano para  $d = 3$  tiene el valor unidad. Aquí hemos usado la notación

$$\langle v^n \rangle = \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} \int d\vec{v} v^n F(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (3.80)$$

siendo  $\Omega$  el volumen del sistema.

La Figura 3.7 muestra los valores de la simulación para el momento normalizado como una función del tiempo para  $\alpha = 0.5$  y  $\alpha = 0.99$ . También se muestran los resultados para la distribución del gas. Este último presenta desviaciones significativas respecto a la unidad mientras que la partícula pesada se mantiene gaussiana incluso para disipaciones altas. Aunque en la figura se muestren sólo dos valores extremos de  $\alpha$ , el mismo comportamiento se observa para varios valores intermedios. Tampoco se encuentra ninguna dependencia del resultado respecto a la condición inicial.

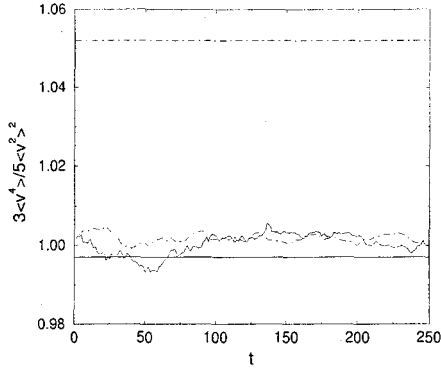


Figura 3.7: Evolución temporal de los cuartos momentos reducidos de la función de distribución de la partícula marcada. El tiempo ha sido medido en unidades de  $\lambda/\hat{v}_0$ , siendo  $\lambda$  el recorrido libre medio, Ec.(4.12). La línea continua corresponde a  $\alpha = 0.95$  y la de rayas a  $\alpha = 0.5$ . Las líneas horizontales representan el cuarto momento de la función de distribución del fluido para  $\alpha = 0.95$  (continua) y  $\alpha = 0.5$  (discontinua). El baño es el mismo que en la Figura 3.6.

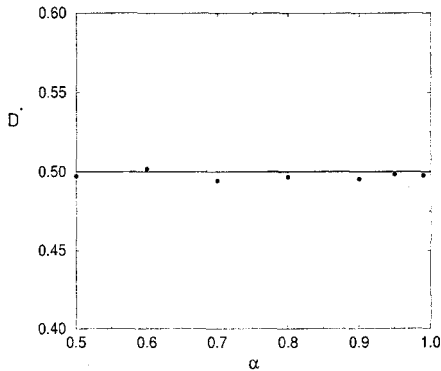


Figura 3.8: Comparación de los valores numéricos del coeficiente de difusión reducido obtenido a partir de la ecuación de Boltzmann-Lorentz (puntos) y el valor predicho por la teoría desarrollada en este Capítulo  $D^* = 1/2$  (línea continua). Los detalles del sistema simulado son los mismos que en las figuras anteriores.

Por último, la evolución del sistema hacia el régimen difusivo puede estudiarse midiendo el recorrido libre medio de la partícula marcada, como se mostró en el apartado anterior. En la Figura 3.8, se presenta la comparación de los resultados de las medidas del coeficiente de difusión a partir del recorrido cuadrático medio, Ec.(3.74), con el valor  $D^* = 1/2$ , para un amplio espectro de valores de  $\alpha$ . El acuerdo es excelente y confirma tanto la existencia de un límite difusivo como el valor del coeficiente de difusión asintótico predicho por la teoría.

### 3.3 Conclusiones

En este capítulo se han aplicado las ecuaciones que rigen la evolución de los campos hidrodinámicos en un medio granular en la aproximación de Navier-Stokes a dos problemas de transporte de materia, como son la autodifusión y la difusión de una partícula browniana.

En lo que respecta al estudio de la autodifusión en el estado de enfriamiento homogéneo, el caso más sencillo posible de transporte en gases granulares, hemos simulado el sistema con un algoritmo de Dinámica Molecular y contrastado los resultados con los obtenidos mediante resolución de Chapman-Enskog de la ecuación de Boltzmann-Lorentz y también por resolución numérica de la ecuación usando la técnica de simulación directa de Monte Carlo. El excelente acuerdo entre los resultados obtenidos, acuerdo que se extiende sobre un amplio intervalo de valores del coeficiente de restitución, proporciona una prueba muy valiosa de la exactitud y utilidad de las diferentes formas de abordar el problema de la autodifusión en un gas granular.

El desarrollo teórico propuesto muestra que el proceso de la autodifusión en el seno de un medio granular en el estado de enfriamiento homogéneo, se puede describir a un nivel macroscópico por una ecuación hidrodinámica, Ec.(3.30), de forma análoga a lo que ocurre en fluidos ordinarios. La diferencia esencial reside en la dependencia temporal del coeficiente de la ecuación de difusión correspondiente, a través de la temperatura del sistema. Existe, como también se ha señalado, una dependencia explícita del coeficiente de restitución, que caracteriza la disipación en el sistema. Se pueden hallar, sin embargo, unas escalas temporal y espacial adecuadas en las que la ecuación de difusión tiene un coeficiente de difusión que no depende del tiempo, Ec.(3.33).

En cuanto al problema browniano, la ecuación de Fokker-Planck obtenida a partir de la de Boltzmann-Lorentz en el límite del cociente de masas pequeño permite un análisis exacto de la dinámica de la partícula marcada. El baño granular se supone en un estado de enfriamiento homogéneo. Esta ecuación puede ser transformada a una escala espacial y temporal en la que

es formalmente similar a la ecuación correspondiente al caso elástico. Consecuentemente, todos los resultados conocidos para este caso en lo que se refiere a relajación de velocidades y a la existencia de un estado difusivo, se traducen directamente a las colisiones inelásticas. Las diferencias cualitativas acontecen tan sólo a través de los cambios en las escalas. Algunas de las más relevantes son:

- La descripción es independiente de  $\alpha$ , por lo que se aplica para un grado arbitrario de inelasticidad en las colisiones entre la partícula browniana y el baño. Existen, sin embargo, ciertas restricciones para la inelasticidad del gas que han sido discutidas.
- La nueva escala temporal  $t^*$  está relacionada logarítmicamente con el tiempo real. Por ello, la relajación de velocidades y el acercamiento a la escala hidrodinámica es algebraico y no exponencial.
- En el límite de tiempos largos, la función de distribución de velocidades de la partícula marcada para el estado homogéneo es Gaussiana, aunque la de las partículas del baño no lo sea.
- La temperatura de la partícula browniana, que es una función del tiempo, difiere de la del baño aunque las velocidades de enfriamiento son las mismas.
- El recorrido libre medio se aproxima a un comportamiento logarítmico en el tiempo para tiempos largos, con un coeficiente que determina el coeficiente de difusión.
- La ecuación de difusión para tiempos largos tiene la forma usual, aunque su solución es cualitativamente diferente a la del caso elástico debido a la dependencia temporal de la temperatura, presente en el coeficiente de difusión.

Con anterioridad hemos indicado nuestra intención de confirmar la validez del análisis asintótico que conduce al límite de Fokker-Planck. El excelente acuerdo encontrado con la simulación directa de Monte Carlo y de Dinámica Molecular, para las diversas propiedades estudiadas da evidencias más que convincentes de su validez. La separación de escalas entre los modos cinéticos y difusivo es bastante clara, toda vez que las complicaciones consecuencia del enfriamiento se suprimen mediante el cambio de variables. Finalmente, la validez de la propia ecuación de Boltzmann-Lorentz ha sido también confirmada mediante simulación de Dinámica Molecular. El acuerdo se extiende a un amplio rango de los parámetros que va más allá del límite cuasielástico.

La consecuencia más relevante de la dependencia temporal de los coeficientes de transporte presentados en este capítulo es la aparición de una



nueva escala temporal relevante en el problema, que implica un decaimiento algebraico de las excitaciones microscópicas en la escala de tiempo original. Esto no es inconsistente, en principio, con la separación de escalas que la descripción hidrodinámica requiere. El problema de la partícula browniana es particularmente interesante en este sentido, ya que permite un estudio exacto del decaimiento de los modos cinéticos y microscópicos. En cualquier caso, merece la pena que señalemos que hemos considerado valores del coeficiente de restitución normal  $\alpha$  siempre mayores que 0.6, pudiendo ocurrir que para valores inferiores la hidrodinámica y la propia ecuación de Boltzmann no sean aplicables.

En definitiva, se han estudiado algunas situaciones de transporte en las que se ha verificado la transición de un régimen cinético a uno hidrodinámico, comparando resultados teóricos derivados de las ecuaciones hidrodinámicas con soluciones numéricas de la ecuación de Boltzmann y resultados de simulación de Dinámica Molecular. La disipación en las colisiones modifica las ecuaciones de transporte de una forma trivial y esperada, mediante la dependencia temporal de la temperatura y la aparición de un sumidero en su ecuación de evolución, pero también de una forma intrincada e imprevisible *a priori*. Ejemplos de esto último son la modificación de la relación de disipación-fluctuación en el movimiento browniano y la dependencia explícita respecto del coeficiente  $\alpha$  del coeficiente de autodifusión.

En este capítulo, también hemos pretendido abrir las puertas a una nueva forma de abordar el estudio de los flujos granulares: la combinación de una teoría cinética analítica, el método directo de Monte Carlo y la simulación de Dinámica Molecular. Aunque hasta aquí nos hayamos restringido a situaciones en torno al estado de enfriamiento homogéneo que experimentan los flujos granulares libres, veremos en los siguientes capítulos que estas herramientas se muestran igualmente eficaces en el estudio de otros estados de los fluidos granulares, más concretamente, en sistemas agitados mediante una pared vibrante.

## Capítulo 4

# Medios granulares vibrados en ausencia de gravedad

Ya hemos mencionado en la introducción de esta memoria el interés que tienen los medios granulares vibrados. Y si bien el transporte y la manipulación de materiales granulares en el ámbito industrial puede considerarse la razón más práctica para su estudio, no es menor su atractivo desde el punto de vista de la física teórica, ya que estos sistemas ofrecen de manera directa nuevas vías para la prueba de teorías cinéticas, contrastando las predicciones de éstas con los resultados experimentales. No es de extrañar, por lo tanto, la aparición en los últimos años de gran cantidad de trabajos relativos al tema, tanto experimentales [66, 97, 98, 99], como teóricos [100, 101, 102, 103] o de simulación mediante ordenador [82, 104, 105].

El modelo de estos sistemas más extensamente utilizado es nuevamente un sistema de discos (o esferas) duros inelásticos. Como ocurre en el caso de los gases granulares libres, el modelo escogido permite una simulación sencilla del sistema haciendo uso de un algoritmo conducido por sucesos. Veremos a lo largo de los siguientes capítulos, así mismo, que con este modelo es posible obtener resultados analíticos relevantes. En cualquier caso, ambas formas de atacar el problema, teoría y simulación, se complementan hasta cierto punto, para así poder explicar los fenómenos observados experimentalmente.

En los medios granulares vibrados surge la necesidad de modelar la interacción de los granos con las paredes y, particularmente, con la pared vibrante. Para ello existen diferentes modelos más o menos realistas [82]. Muchas de las propiedades internas del sistema parecen, sin embargo, no depender de la forma detallada en que se agita el sistema. Básicamente, el movimiento de los granos puede ser coherente o incoherente con el de la pared que vibra. En el primer caso, los granos se mueven conjuntamente en capas de forma periódica, con una frecuencia que está relacionada con la de vibración de la pared. En

este caso, el sistema muestra ondas de superficie y su estado ha sido objeto de numerosos trabajos [29, 105, 106]. En el segundo caso, las partículas se mantienen “suspendidas” sobre la pared vibrante, sometidas a un movimiento de agitación irregular, de forma que permanecen en un estado denominado “fluidizado”, por comportarse los granos en esta situación análogamente a como lo hacen las partículas dentro de un fluido normal. También este régimen fluidizado ha sido profusamente reproducido experimentalmente [66, 97, 99, 107] y puede ser estudiado teóricamente haciendo uso de la teoría cinética. En una primera aproximación a su descripción, existen numerosos experimentos y simulaciones en la bibliografía que pretenden encontrar leyes de escala de la dependencia de la densidad o la temperatura del sistema respecto de la forma de la excitación [82, 104] o de las características de la pared vibrante [66, 108]. En otros estudios el interés se centra en la distribución de velocidades dentro del sistema [97, 98]. Merece la pena apuntar que, a pesar de la gran cantidad de artículos producidos y de la relevancia de éstos, no parece que se haya prestado mucha atención a las propiedades centrales o de volumen del sistema, en contraposición a la capa límite o de coexistencia del sistema con la pared. Tampoco son muchos los trabajos sobre la relación entre las propiedades mecánicas de la pared vibrante y los perfiles hidrodinámicos que se crean en el volumen del sistema.

En la mayoría de los experimentos que encontramos en la bibliografía, el medio granular se encuentra encerrado en un recipiente en el que los granos se agitan por la acción de una pared vibrante inferior que actúa contra la gravedad. La energía suministrada por la pared se disipa en el sistema mediante las colisiones entre las partículas, de forma que se alcanza un estado estacionario. Este balance de energías, entre la que se disipa en el sistema y la que se suministra a través de la pared vibrante, debe ser tenido en cuenta en cualquier teoría hidrodinámica que pretenda describir el estado estacionario que alcanza el sistema, de forma que su temperatura quede fijada por él. Haciendo uso de teorías cinéticas granulares [72, 109, 102, 76], es posible tanto obtener ecuaciones hidrodinámicas válidas, como establecer el balance energético en la pared vibrante. Merece la pena resaltar que las mencionadas relaciones hidrodinámicas se basan en que las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos granulares sean válidas para la caracterización del sistema y en la exactitud de las aproximaciones introducidas para modelar el suministro de energía a través de la pared vibrante.

En general, el conjunto de inestabilidades que presentan los medios granulares vibrados dependen de multitud de parámetros, que incluyen la dinámica de la pared vibrante, la amplitud de sus oscilaciones, las interacciones de los granos con las paredes laterales y la naturaleza inelástica de las colisiones en el medio. A lo largo de los próximos capítulos veremos que los fenómenos de inestabilidad que muestran los medios granulares vibrados no están ligados

en general a la existencia de campos externos, sino que son inherentes a su naturaleza, más concretamente, a la inelasticidad de las colisiones entre los granos. En base a ello, vamos a considerar un sistema sobre el que no actúa ningún campo externo. Sea por tanto un gas granular encerrado entre dos paredes infinitas, una de las cuales se mueve suministrando energía al sistema mientras que la otra permanece en reposo (ver Figura 4.1). Las colisiones de las partículas con las paredes son elásticas. El movimiento de la pared vibrante es tal que su amplitud de vibración es mucho menor que el recorrido libre medio de las partículas del gas y su frecuencia mucho mayor que la de colisión entre partículas. Eliminamos de este modo la posibilidad de que se establezcan correlaciones entre la dinámica del sistema y el movimiento de la pared. Además, consideramos que la pared se mueve en forma de dientes de sierra, así que una partícula que colisiona con ella siempre la encuentra moviéndose hacia arriba con velocidad constante. Consecuentemente, el único parámetro relevante para caracterizar la excitación es la energía que se transfiere desde la pared vibrante al volumen del sistema a través de las colisiones discretas con las partículas que chocan con ella. Dicho de otra manera, la pared queda caracterizada completamente por su velocidad,  $v_b$ .

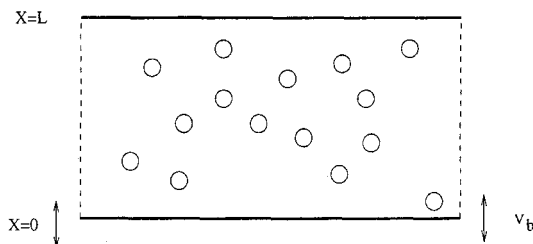


Figura 4.1: El sistema que se estudia consiste en un gas granular diluido entre dos paredes infinitas. La pared inferior, en  $x = 0$ , vibra con una velocidad típica  $v_b$ , mientras que la superior, en  $x = L$  está en reposo.

A continuación vamos a presentar un estudio detallado tanto de las propiedades de volumen del sistema como de las condiciones de contorno, relacionando los parámetros que definen el movimiento de la pared con las condiciones de contorno pertinentes para resolver las ecuaciones hidrodinámicas que definen los perfiles en el sistema, más allá de la capa límite "cinética". Este estudio nos servirá de base para posteriores aplicaciones de las ecuaciones hidrodinámicas a dos geometrías distintas (Capítulos 5 y 6) en las que se producen sendas asimetrías espontáneas en un sistema inicialmente homogéneo.

## 4.1 Descripción hidrodinámica

Para un fluido de esferas, ( $d = 3$ ) o discos ( $d = 2$ ) duros lisos inelásticos, se pueden obtener unas ecuaciones de balance para la densidad local de partículas  $n(\vec{r}, t)$ , la velocidad de flujo  $\vec{u}(\vec{r}, t)$  y la temperatura  $T(\vec{r}, t)$  similares a las de Navier-Stokes para un fluido newtoniano [110]. Hemos visto en el Capítulo 2 que estas ecuaciones acopladas no lineales resultan de tomar momentos en la ecuación de Liouville,

$$\partial_t n + \nabla \cdot (n\vec{u}) = 0, \quad (4.1)$$

$$\partial_t \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} + (mn)^{-1} \nabla \cdot P = \vec{0}, \quad (4.2)$$

$$\partial_t T + \vec{u} \cdot \nabla T + 2(dnk_B)^{-1} (P : \nabla \vec{u} + \nabla \cdot \vec{q}) + \zeta T = 0. \quad (4.3)$$

El significado de cada uno de los símbolos usados en las ecuaciones anteriores se detalló convenientemente en aquel capítulo. Para un estado estacionario y en el que no exista un flujo macroscópico de velocidad, las ecuaciones se simplifican notablemente, quedando:

$$\nabla \cdot P = 0, \quad (4.4)$$

$$2(dnk_B)^{-1} \nabla \cdot \vec{q} + \zeta T = 0. \quad (4.5)$$

Ahora bien, observemos que estas expresiones, que son aplicación directa de las ecuaciones generales de balance, son válidas sin ningún tipo de restricción. Si consideramos el primer orden en los gradientes de los flujos y el límite de bajas densidades, las ecuaciones se simplifican notablemente:

$$P = p\mathcal{I}, \quad (4.6)$$

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n, \quad (4.7)$$

$$\zeta = \zeta^{(0)} + \zeta^{(2)}. \quad (4.8)$$

Continuando con el uso de la notación del Capítulo 2,  $p = nk_B T$  es la presión e  $\mathcal{I}$  es el tensor unidad. El término  $\zeta^{(0)}$  es de orden cero en los gradientes de los campos hidrodinámicos, mientras que  $\zeta^{(2)}$  contiene las contribuciones a la velocidad de enfriamiento de los términos de segundo orden en los gradientes. Es de esperar que estas contribuciones sean muy pequeñas comparadas con el flujo de calor y el tensor de presiones y, como se hiciera anteriormente, se van a despreciar en el desarrollo que sigue a continuación. La conductividad térmica  $\kappa$  y el coeficiente de transporte  $\mu$  fueron también introducidos en el Capítulo 2.

Dada la simetría del sistema que estamos estudiando, esperamos que en el estado estacionario los gradientes hidrodinámicos aparezcan sólo en la

dirección perpendicular a las paredes infinitas localizadas en los planos  $x = 0$  y  $x = L$ , es decir, en la dirección  $x$ . De ahí que las ecuaciones (4.4) y (4.5) se reduzcan mediante el uso de (4.6) - (4.8) a:

$$\frac{\partial}{\partial x} p = 0, \quad (4.9)$$

$$2(dn\kappa_B)^{-1}[\kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha)] \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa_0 \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{\zeta^* p T}{\eta_0} = 0, \quad (4.10)$$

donde, según lo dicho, se ha despreciado la contribución de  $\zeta^{(2)}$  a  $\zeta$ .

En el límite en el que el sistema que tratamos sea muy grande, y en las regiones lejanas a las paredes, la descripción del estado estacionario que se alcanza en el sistema se simplifica considerablemente. La presión se vuelve uniforme y el perfil de temperatura lineal. Una característica importante del estado alcanzado por el sistema en dichas regiones es que ambos campos hidrodinámicos no son independientes, sino que están relacionados a través de los parámetros del sistema. Es fácil entender el origen de esta relación. Busquemos una solución de las ecuaciones hidrodinámicas que corresponda a una presión uniforme y un perfil lineal de temperatura, es decir:

$$T(x) = Ax, \quad x \geq 0, \quad A > 0. \quad (4.11)$$

Se puede comprobar, sin más que sustituir esta expresión en la ecuación (4.10), que la condición para que tal estado exista es que la presión sea constante y proporcional al gradiente de temperatura,  $A$ , dependiendo la constante de proporcionalidad únicamente de la inelasticidad  $\alpha$ . Retomaremos este punto más adelante.

Volvamos ahora a las ecuaciones hidrodinámicas (4.9) y (4.10). Para resolverlas en general es conveniente definir una nueva variable espacial adimensional,  $\xi$ , en función del recorrido libre medio local de los discos (esferas),

$$\lambda(x) = [C\sigma^{d-1}n(x)]^{-1}, \quad (4.12)$$

como:

$$\xi = \sqrt{a(\alpha)} \int_0^x \frac{dx'}{\lambda(x')}, \quad (4.13)$$

habiéndose introducido

$$a(\alpha) = \frac{32(d-1)\pi^{d-1}\zeta^*(\alpha)}{(d+2)^3 C^2 \Gamma(d/2)^2 [\kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha)]}. \quad (4.14)$$

Nótese que  $\xi$  da una medida de la distancia a la pared vibrante, en unidades del recorrido libre medio. En la expresión de  $\lambda$ ,  $C$  es una constante cuyo valor varía con la dimensión del sistema, siendo  $C = 2\sqrt{2}$  para  $d = 2$  y

$C = \pi\sqrt{2}$  para  $d = 3$ . En términos de la nueva variable  $\xi$ , la ecuación (4.10) se transforma en:

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} T^{1/2} = a(\alpha) T^{1/2}, \quad (4.15)$$

En unidades del recorrido libre medio, la magnitud de los gradientes en el sistema está determinada por  $\sqrt{a(\alpha)}$ . Por ello, asumir el límite de pequeños gradientes en las ecuaciones de Navier-Stokes, implica en el presente contexto limitarse al correspondiente límite cuasielástico o de baja inelasticidad.

La solución general de la ecuación (4.15) es

$$T(\xi)^{1/2} = Ae^{-\xi} + Be^{\xi}, \quad (4.16)$$

quedando las constantes  $A$  y  $B$  por determinar según las condiciones de contorno impuestas.

En nuestro caso existe una pared vibrante en  $x = 0$ , que suministra energía al sistema, y una reflectante en  $x = L$ . Si representamos por  $T_0$  la temperatura del gas cerca de la pared que vibra, estas condiciones de contorno se expresan por las relaciones:

$$T(\xi = 0) = T_0, \quad (4.17)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \xi}\right)_{\xi=\xi_m} = \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=L} = 0. \quad (4.18)$$

Nótese que  $\xi = 0$  cuando  $x = 0$  y  $\xi_m$  es el valor de  $\xi$  correspondiente a  $x = L$ ,  $\xi_m = \sqrt{a(\alpha)}C\sigma^{d-1}N_x$ , siendo  $N_x$  el número medio de partículas por unidad de sección perpendicular al eje  $x$ .

$$N_x = \int dz n(z) = \frac{\xi_m}{C\sigma^{d-1}}. \quad (4.19)$$

La relación de  $T_0$  con los parámetros que caracterizan el movimiento de la pared vibrante se analizará en la sección 4.2 y se discute con detalle en el Apéndice F.

Las condiciones expresadas en las ecuaciones (4.17) y (4.18) conducen a la siguiente expresión para la temperatura en la variable escalada:

$$T(\xi) = T_0 \left\{ \frac{\cosh(\xi_m - \xi)}{\cosh(\xi_m)} \right\}^2. \quad (4.20)$$

La forma funcional de esta solución se presenta en la Figura 4.2, para ciertos valores de  $\xi_m$  y  $\alpha$ . Se observa que la temperatura es mínima en la pared elástica, para  $\xi = \xi_m$  y es monótonamente decreciente desde el valor  $T_0$ .

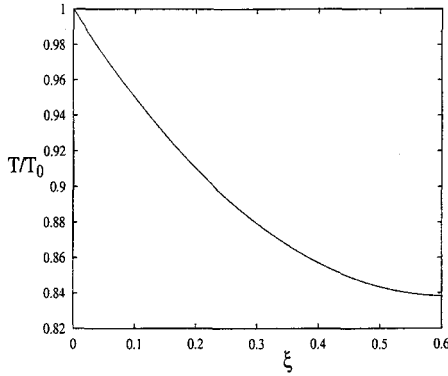


Figura 4.2: Solución del perfil de temperatura en la variable escalada, Ec.(4.20), para un sistema de  $N = 500$  partículas,  $\alpha = 0.9$  y  $\xi_m = 0.612$ .

Partiendo de la solución (4.20), es inmediato calcular el valor de la temperatura en la pared reflectante, sin más que sustituir el valor  $\xi = \xi_m$ ,

$$T_m = T_0 \left\{ \frac{1}{\cosh(\xi_m)} \right\}^2. \quad (4.21)$$

Paralelamente, usando la ecuación (4.20) en la definición (4.13), podemos establecer una relación explícita entre las escalas  $x$  y  $\xi$ ,

$$x = \frac{k_B T_0}{4C\sigma^{d-1}p\sqrt{a(\alpha)} \{\cosh[\xi_m]\}^2} \{2\xi + \sinh[2\xi_m] - \sinh[2(\xi_m - \xi)]\}. \quad (4.22)$$

Y si a continuación nos situamos en la pared reflectante ( $x = L$ ) y usamos la expresión de la temperatura correspondiente, Ec.(4.21), encontramos una relación entre la presión del sistema y sus dimensiones,

$$L = \frac{k_B T_m}{4C\sigma^{d-1}p\sqrt{a(\alpha)}} \{2\xi_m + \sinh[2\xi_m]\}. \quad (4.23)$$

Hasta ahora, todos los resultados que hemos presentado provienen directamente de las ecuaciones de Navier-Stokes y las correspondientes condiciones de contorno, no habiéndose introducido ninguna aproximación adicional. Supongamos ahora que  $L$  es muy grande, de forma que  $\xi_m \gg 1$ . De la dependencia de  $T_m$  de este factor, Ec.(4.21), se desprende que este límite equivale



a  $T_m \ll T_0$ . En esas condiciones, las ecuaciones (4.22) y (4.23) se aproximan por:

$$T_m \simeq 4T_0 e^{-2\xi_m}, \quad (4.24)$$

$$p \simeq \frac{k_B T_0}{2C \sqrt{a(\alpha)} \sigma^{d-1} L}, \quad (4.25)$$

a lo que se llega sin más que considerar el valor límite de las funciones hiperbólicas cuando el argumento es muy grande, que es proporcional a la exponencial de su argumento.

Nótese que estos últimos resultados implican que la presión en el sistema, dentro de las condiciones en las que la aproximación hecha es válida, no depende del número total de partículas que contiene el sistema, aunque sí del "gradiente" de temperatura  $T_0/L$ . Conviene recordar que esto es precisamente lo que habíamos obtenido de las ecuaciones hidrodinámicas sin más que suponer un perfil lineal de temperaturas, Ec.(4.11).

Si además de considerar un sistema grande, nos restringimos a distancias  $\xi$  de la pared que vibra que cumplan  $\xi \ll \xi_m$ , se desprende también de (4.20) que la temperatura decae exponencialmente en la variable  $\xi$  en esta región de los parámetros, es decir,

$$T(\xi) \simeq T_0 e^{-2\xi}. \quad (4.26)$$

Cuando se aplica la ecuación (4.22) a las condiciones consideradas, se deduce que la temperatura tiene un perfil lineal en la variable espacial original  $x$ ,

$$T(x) \simeq T_0 \left(1 - \frac{x}{L}\right). \quad (4.27)$$

Merece la pena llamar la atención sobre el hecho de que las expresiones de la temperatura (4.26) y (4.27), puesto que han sido obtenidas en el límite  $x \ll L$ , no se pueden aplicar en las proximidades a la pared reflectante ( $x = L$ ). En esta zona, la ecuación (4.26) conduce a un valor de la temperatura que difiere en un factor 4 del dado por la expresión exacta, Ec.(4.21).

Por otro lado, aplicando la ecuación de estado en la región en la que ambas relaciones asintóticas son válidas, resulta

$$n(x) = \frac{1}{2C \sqrt{a(\alpha)} \sigma^{d-1} (L - x)} \quad (4.28)$$

de forma que el perfil de densidad es sólo función del tamaño del sistema,  $L$ , y del coeficiente de restitución,  $\alpha$ , pero no depende de las propiedades de la pared vibrante (que determinan  $T_0$ ) ni del número de partículas del sistema.

## 4.2 Condiciones de contorno

Con el objetivo de determinar la temperatura del gas  $T_0$  en la zona próxima a la pared vibrante en función de los parámetros que definen el movimiento de ésta, se evaluará a continuación la potencia que la pared suministra al sistema y la energía que éste disipa debido a su naturaleza inelástica. Por sencillez, supondremos que la velocidad de la pared varía en el tiempo en forma de diente de sierra, de modo que todas las partículas que colisionan con ella la encuentran con una velocidad constante  $v_b$  en la dirección creciente de  $x$  [104, 82] (ver Figura 4.3). La amplitud de su movimiento, además, va a ser muy pequeña comparada con el recorrido libre medio del gas en las cercanías de la pared. Como consecuencia de esto, se puede considerar en buena aproximación, que la pared permanece fija en la posición  $x = 0$  (aunque con velocidad  $v_b$ ). De este modo, evitamos el acoplamiento de la dinámica de la pared y el sistema, no produciéndose, en particular, pulsos de energía propagándose desde la pared hacia el interior del sistema [104].

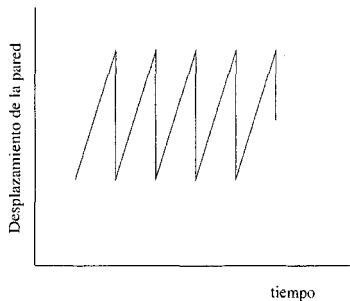


Figura 4.3: Modelo sencillo para el movimiento de la pared vibrante. Consideramos que la pared se desplaza en forma de dientes de sierra con una amplitud de vibración en relación al recorrido libre medio del medio granular tal que las partículas de éste siempre la encuentran desplazándose en sentido “ascendente”.

Dado que consideramos que las colisiones entre la pared y las partículas del gas son elásticas, cuando una partícula con velocidad  $\vec{v}$ , tal que  $v_x < 0$ , colisiona con la pared, cambia su velocidad a  $\vec{v}'$ , cuyas componentes quedan fijadas por las siguientes reglas de colisión:

$$\begin{aligned} v_x' &= 2v_b - v_x, \\ \vec{v}'_{\perp} &= \vec{v}_{\perp}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Aquí,  $\vec{v}_{\perp}$  denota las componentes de la velocidad perpendicular al movimiento

de la pared vibrante. Por otro lado, la energía que gana una partícula al colisionar con la pared es

$$\Delta E = 2m(v_b^2 - v_b v_x). \quad (4.30)$$

A continuación hacemos uso de los resultados mostrados en el Apéndice *F*, en el que se calculan la potencia suministrada por la pared vibrante del sistema que tratamos,  $P_b$ , y la que se disipa en su interior como consecuencia de las colisiones,  $D$ . En el estado estacionario, se habrá establecido un balance entre ambas. En ese caso, con ayuda de las correspondientes relaciones, Ecs. (F.7) y (F.19), establecemos la expresión de  $T_0$ ,

$$T_0 = \frac{e^2}{\tanh^2 \xi_m}, \quad (4.31)$$

siendo

$$e = \frac{(d+2)C\sqrt{a(\alpha)}\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)\pi^{-\frac{d-1}{2}}m^{1/2}}{4d\zeta^*(\alpha)k_B^{1/2}}v_b. \quad (4.32)$$

Sustituyendo a continuación esta expresión en las ecuaciones hidrodinámicas (4.20) y (4.23) obtenemos los perfiles en función de los parámetros que definen al sistema:

$$T(\xi) = e^2 \left[ \frac{\cosh(\xi_m - \xi)}{\sinh \xi_m} \right]^2 \quad (4.33)$$

y

$$p = \frac{k_B T_0}{4C\sigma^{d-1}L\sqrt{a(\alpha)}} \frac{2\xi_m + \sinh(2\xi_m)}{\cosh^2 \xi_m}. \quad (4.34)$$

Finalmente, la relación entre las escalas espaciales  $x$  y  $\xi$  se puede derivar directamente sustituyendo la expresión de  $T_0$  en la ecuación (4.22),

$$x = \frac{2\xi + \sinh(2\xi_m) - \sinh[2(\xi_m - \xi)]}{2\xi_m + \sinh(2\xi_m)}L. \quad (4.35)$$

La ecuación (4.34) muestra que la presión es una función monótonamente decreciente de  $\xi_m$ , estando de hecho acotada inferiormente por el valor:

$$p_{min} = \frac{k_B e^2}{2C\sigma^{d-1}\sqrt{a(\alpha)}L}. \quad (4.36)$$

Otro punto interesante lo marca el hecho de que la relación entre  $x$  y  $\xi$ , Ec.(4.35), sea independiente de  $v_b$ . Esto implica que la densidad de partículas en la variable  $x$  tampoco se verá afectada por la velocidad de la pared vibrante.

El perfil de densidad se puede calcular fácilmente a partir de la ecuación (4.34) con ayuda de la ecuación de estado, resultando

$$n(\xi) = \frac{1}{C\sigma^{d-1}L} \frac{2\xi_m + \sinh(2\xi_m)}{4\sqrt{a(\alpha)} \cosh^2(\xi_m - \xi)}. \quad (4.37)$$

Obsérvese que las ecuaciones (4.37), (4.34), (4.20) y (4.35) determinan completamente los perfiles hidrodinámicos del sistema en el estado estacionario.

### 4.3 Conclusión

Se ha desarrollado la descripción hidrodinámica de un estado estacionario de un medio granular vibrado en ausencia de campos externos. En la zona interior del gas, lejos de las paredes que lo contienen, se ha demostrado que el perfil de la temperatura es lineal y la presión constante. Sin embargo, el gradiente de temperatura y la presión no son independientes, sino que están relacionadas a través de los parámetros del sistema. La importancia de este estado se refuerza por el hecho de que corresponde a una solución exacta, sin aproximación alguna, de la ecuación de Boltzmann de un sistema de esferas duras o discos duros. La validez de la descripción descansa, por supuesto, en la aplicabilidad de las ecuaciones hidrodinámicas de Navier-Stokes para describir el sistema.

El tratamiento presentado sugiere, además, una explicación cualitativa de la aparición de una capa límite en la pared reflectante, tal y como se observa en las simulaciones de este sistema, Figura 4.4. Dada la temperatura del gas en la vecindad de la pared vibrante, que está determinada por la velocidad de la pared  $v_b$ , el sistema tiende a establecer un gradiente de temperatura constante con una presión uniforme. En general, sin embargo, no es posible para el sistema completo alcanzar dicho estado, debido a que el número de partículas que lo componen no se ajusta siempre al perfil de densidad que el sistema intenta imponer, que está relacionado con la presión y la temperatura a través de la ecuación de estado. Como compromiso, el gas tiende al estado descrito por las ecuaciones (4.25) y (4.27) en una región que empieza en las cercanías de la pared vibrante y sitúa todas las partículas que le “sobran” en la región opuesta en una especie de “fase condensada”, que escapa a una descripción basada en la ecuación de Boltzmann

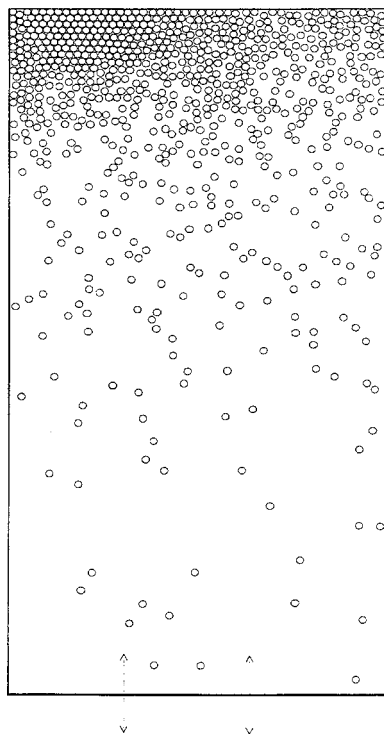


Figura 4.4: Una instantánea de las partículas en el estado estacionario, extraída de una simulación de  $N = 764$  discos duros inelásticos con  $\alpha = 0.925$  y  $v_b = 2$ , encerrados en una caja de dimensiones  $L_x = 50$  y  $L_y = 100$ . Se observa claramente la densa capa de partículas junto a la pared reflectante, como se describe en el texto.

## Capítulo 5

# Ruptura espontánea de simetría en medios granulares vibrados

Como hemos señalado en la introducción, las condiciones más propicias para la aparición de fenómenos nuevos e incluso aparentemente insólitos en los medios granulares son, sin duda, aquellas en las que los granos se mantienen en movimiento continuo mediante algún agente externo. Particularmente activo es el estudio de los medios vibrados. Existen gran cantidad de experimentos distintos que dan muestra de la enorme complejidad del comportamiento de estos sistemas [16], siendo la segregación de los granos, sin duda alguna, uno de los fenómenos más interesantes y característicos (y no sólo por las enormes implicaciones prácticas que conllevaría el control de tal mecanismo). Con este nombre se conoce al fenómeno que aparece en algunos medios granulares vibrados, por el que una mezcla de granos inicialmente distribuidos homogéneamente evoluciona a un estado en el que los diferentes componentes ocupan espacios bien diferenciados unos de otros. La segregación es la reacción espontánea a un movimiento impuesto externamente a un sistema que está compuesto de partículas de, al menos, dos naturalezas diferentes. Aunque es una de las inestabilidades más estudiadas desde hace años [111, 112, 113, 114, 115, 116, 117, 118], poco es lo que se conoce a cerca de la misma. En los últimos años, la simulación en ordenadores [30, 119] ha permitido un análisis más detallado del problema.

Pero no es la segregación el único fenómeno sorprendente, en el que la simetría y homogeneidad del sistema granular se rompe de forma espontánea. Hace unos pocos años, un grupo de pedagogos ocupados con la didáctica de la física moderna, proponían los medios granulares como un modelo directo para la enseñanza práctica de diversos fenómenos físicos [1]. Entre los experimentos que plantearon se incluía uno especialmente interesante. Un recipiente relativamente alto, cuya base se encuentra dividida por una pared de unos 2-3 cm

de altura, se somete a la vibración impuesta por un sencillo altavoz. Las dos celdas idénticas en las que queda dividido el recipiente se llenan con bolas de iguales características físicas, inicialmente hasta un tercio de la pared divisoria.

Cuando se somete al sistema anterior a una vibración de amplitud suficien-

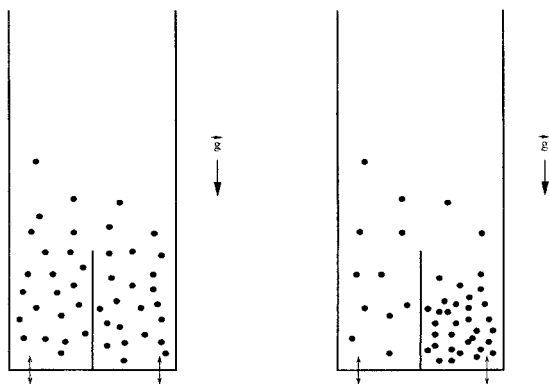


Figura 5.1: Experimento original del diablillo de Maxwell. El sistema está abierto por arriba y vibrado por la base mediante algún mecanismo que lo mantenga fluidizado (figura de la izquierda). Si la frecuencia de la vibración no es demasiado grande, las partículas tienden a agruparse en uno de los compartimentos, rompiéndose la simetría del sistema (figura de la derecha).

temente grande, se observa un movimiento de las partículas del sistema por toda su extensión, obteniéndose una distribución continua de las mismas, que se reparten por igual a ambos lados de la pared divisoria (ver Figura 5.1). La situación cambia radicalmente al disminuir la amplitud de la vibración impuesta por debajo de un cierto valor crítico. Cuando la altura máxima alcanzada por las partículas en su movimiento forzado es del orden del tamaño de la pared, empiezan a pasar preferentemente hacia uno de los lados, de modo que se reparten asimétricamente entre las dos celdas del recipiente (como en el lado derecho de la Figura 5.1). Aparece así un lado sobrecargado de partículas, mientras que en el otro solo se encuentran unas pocas. Además, estas últimas se desplazan mucho más rápidamente a causa de la vibración que transmite la base. La asimetría anterior aumenta al disminuir la intensidad de la vibración. En tanto en cuanto el recipiente se construya de manera suficientemente simétrica, el grueso de las partículas cae en un lado o en el otro indistintamente. El hecho de que las partículas en el lado menos denso se muevan con una energía mucho mayor que las otras, ha motivado que se bautice este experimento como el experimento del diablillo de Maxwell.

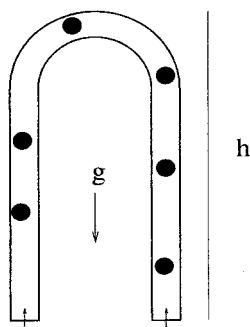


Figura 5.2: Modelo sencillo unidimensional usado para ilustrar el mecanismo de formación de agregados de partículas que se observa en el experimento de Schlichting. Las partículas se encierran en un tubo con forma de herradura con una anchura inferior a dos veces su diámetro. Existe un campo gravitatorio en la dirección señalada. Los extremos del tubo se hacen vibrar, impulsando en su movimiento a los granos.

A pesar de la espectacularidad del fenómeno, es posible una explicación cualitativa simple de lo que está ocurriendo. De hecho, el experimento es susceptible de ser simplificado notablemente. Considérese un sistema monodimensional como el de la Figura 5.2, compuesto por discos lisos inelásticos de masa  $m$  que se mueven dentro de un tubo cerrado, sometidos a un campo gravitatorio  $g$  dispuesto como se indica, y que son vibrados desde los extremos. Una simulación del este sistema muestra el mismo comportamiento que el sistema tridimensional de la Figura 5.1. Para amplitudes grandes de vibración, las partículas se mueven a lo largo del tubo que las contiene y el número medio de partículas a cada lado es el mismo. Estamos en el caso en el que la energía suministrada a los discos en cada uno de los lados es mucho mayor que  $mgh$  y también que la disipada en las colisiones (que es del orden de  $n_i(1-\alpha^2)$ ) siendo  $n_i$  el número de partículas en un brazo del tubo. Al disminuir la energía que entra al sistema a través de la pared vibrante, porque disminuya la frecuencia o la amplitud de la vibración, el paso aleatorio de un número apreciable de partículas de un lado al otro del tubo puede ser el desencadenante de un proceso retro-alimentado, consecuencia básicamente de que en el lado cargado de partículas se disipa más energía que en el otro, de modo que el impulso medio que recibe la última partícula de la pila de partículas a ese lado del tubo disminuye respecto al caso simétrico. Eso no sólo hace disminuir la probabilidad de que la partícula vuelva a la celda original, sino que al quedar el otro lado



despoblado, la energía que llega desde la pared vibrante a la última partícula de esta fila es mayor que en la situación simétrica, favoreciéndose de nuevo el paso de partículas desde el lado menos denso. El final de este proceso es un estado estacionario en el que uno de los brazos del tubo contiene un número grande de partículas que disipan la energía suministrada por la pared vibrante en las colisiones que sufren entre sí, siendo la última partícula de la fila la única con alguna probabilidad de cruzar al otro lado. En éste unas pocas partículas se mueven con extrema rapidez y pasan de un brazo del tubo al otro constantemente. Tendríamos por lo tanto una situación estacionaria asimétrica, en la que unas pocas partículas se desplazan con rapidez, saltando de una celda a otra, mientras que el grueso de las partículas permanecen en un lado del recipiente disipando en sus colisiones la energía que transmite la pared vibrante. También es posible que todas las partículas caigan en un compartimento y que la amplitud de vibración (o la altura de la "pared") sea tal que no llegue suficiente impulso a la última partícula de la pila para que pase la frontera. Se llega entonces a una situación estacionaria en la que la simetría del sistema se ha roto completamente.

Obsérvese que a efectos de lo que nos interesa en esta memoria, si se desprecia el rozamiento de los discos con las paredes, el experimento propuesto en la Figura 5.2 puede simularse con dos columnas de partículas dirigidas en la dirección al campo gravitatorio. En ellas las partículas se mueven chocando elásticamente con las paredes y entre sí inelásticamente. Si alguna partícula alcanza en su movimiento el extremo de su columna pasa automáticamente a ocupar un espacio en la otra columna manteniendo la misma altura. En este proceso, la componente de su velocidad en la dirección del campo gravitatorio debe ser invertida y se debe ser cuidadoso con predecir colisiones entre partículas de una y otra columna, para evitar errores en el algoritmo. En la Figura 5.3 se muestran algunas instantáneas de la simulación de este modelo. Los lados del tubo se representan aquí separados a uno y otro lado de la ventana. El coeficiente de restitución de las colisiones entre partículas es  $\alpha = 0.95$  (las leyes de colisión entre las partículas son las habituales, es decir, las dadas en las ecuaciones (B.1)). La anchura del conducto no permite el paso de más de un disco. Desde la situación inicial, en la que las  $N = 20$  partículas están dispuestas simétricamente en cada uno de los lados (con una velocidad pequeña aleatoria), el sistema evoluciona a un estado estacionario final, en el que casi todas las partículas quedan a uno de los lados del tubo. De hecho, en dicho lado se encuentran todas menos una, que continua pasando al lado contrario y rebotando con fuerza en la base del recipiente, retornando al lado denso, donde disipa su exceso de energía en la colisión con el resto de sus compañeras, que actúan como un "colchón" de amortiguamiento.

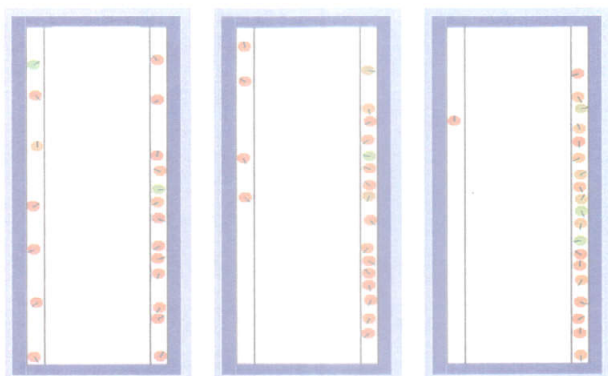


Figura 5.3: Tres instantáneas de una realización del modelo sencillo del sistema de la Figura 5.2 que se discute en el texto. La simulación comienza a la izquierda y termina en la imagen de la derecha, con la máxima asimetría en el reparto de las partículas entre los dos brazos del tubo.

## 5.1 Mecanismos desencadenantes de la asimetría

Muy recientemente se ha reproducido el experimento del Diablillo de Maxwell descrito en la sección anterior de forma más sistemática, y se ha tratado de caracterizar la aparición de la asimetría mediante el correspondiente diagrama de bifurcación [120, 121]. También se ha simulado el experimento usando un modelo sencillo de discos duros inelásticos lisos, y se ha propuesto una explicación teórica en la que la asimetría se desencadena mediante un mecanismo de efusión [27]. La validez de esta explicación requiere que el recorrido libre medio de las partículas sea mucho menor que el orificio por el que deben pasar (ver Figura 5.4). En el experimento original, tal suposición equivale a que sean pocas las partículas que alcancen una altura del orden de la pared central. En la solución de propuesta por Eggers [27], la pared interior que separa ambos compartimentos se extiende formalmente hasta el infinito, y se introduce un pequeño agujero en ella, como se muestra en la Figura 5.4. Admitiendo que el intercambio de partículas entre los compartimentos se puede considerar un proceso efusivo, la condición de estacionariedad, que requiere que el flujo neto de partículas que cruzan el agujero sea nulo, puede escribirse en forma explícita haciendo uso de un modelo cinético de medio granular. El resultado es que existe una transición de fase con ruptura de simetría,

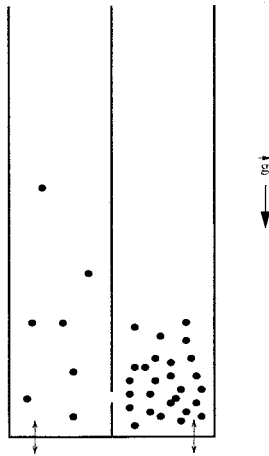


Figura 5.4: Sistema propuesto por Eggers [27] para explicar la ruptura de asimetría en el experimento de Schlichting.

determinada por un parámetro que depende de la intensidad de la vibración, la inelasticidad de las colisiones y el número de capas de partículas que existirían si el sistema estuviera en reposo sobre la pared vibrante. La comparación del diagrama así obtenido con los resultados teóricos y de simulación es bastante buena [121].

En el sistema de la Figura 5.4, distinguimos dos mecanismos diferentes que pueden desencadenar la ruptura de simetría: uno, hidrodinámico, que implica la igualdad de los campos hidrodinámicos a ambos lados del agujero y otro, efusivo, en el que se igualan los flujos de partículas. Que uno u otro mecanismo sea el responsable de la aparición de la inestabilidad en el sistema, dependerá de la relación entre el tamaño del agujero y el recorrido libre medio en sus proximidades. Si el recorrido libre medio es mucho mayor que el tamaño del agujero, la asimetría se producirá por un mecanismo hidrodinámico, en caso contrario lo hará por efusión. Se puede comprobar entonces que la explicación propuesta por Eggers para el problema no parece completa. De hecho, como veremos en lo que sigue, el mecanismo que produce la ruptura de simetría es intrínseco a que el medio sea granular, en concreto, a la inelasticidad de los granos. Para demostrarlo vamos a estudiar la separación de los granos en un sistema de discos inelásticos que no está sometido a un campo externo. De entre los aspectos que diferencian este fenómeno del estudiado por Eggers, el más relevante es que, si en el experimento de Schlichting el equilibrio se



Figura 5.5: Representación esquemática del sistema de caja vibrada del experimento del diablillo de Maxwell, en el caso libre de campos externos.

alcanza por un mecanismo efusivo, en este caso que presentamos se produce al considerar una condición de estacionariedad hidrodinámica, ya que la ruptura de la simetría aparece cuando el tamaño del agujero que conecta ambas celdas es mayor que el recorrido libre medio de las partículas en su entorno. Haremos notar que en este régimen la bifurcación mencionada en las referencias [1, 27, 121] desaparece, lo que demuestra la diferencia en la naturaleza de ambos fenómenos. Además, consideramos un sistema en ausencia de cualquier campo externo. Como una consecuencia de ello, el parámetro de control es diferente en ambos casos. Por otro lado, es importante llamar la atención sobre el hecho de que ninguna de las dos transiciones presenta una longitud característica, lo que las distingue claramente de la inestabilidad de formación de agregados. Finalmente, reseñemos que en el caso que tratamos, la presión es uniforme y la misma en ambos compartimentos, de modo que la existencia de un gradiente de presión no puede considerarse como responsable de la ruptura de la simetría.

## 5.2 Resultados de simulación

Comencemos describiendo los resultados de la simulación de Dinámica Molecular realizada con el algoritmo conducido por sucesos descrito en la última parte del Apéndice A. El sistema estudiado es una caja bidimensional de anchura  $2S$  y altura  $L$ , que contiene  $N$  discos de masa  $m$  y diámetro  $\sigma$ . La

caja está dividida en dos compartimentos idénticos de la misma anchura  $S$  por una pared vertical que comienza a una altura  $h$ , tal y como se observa en la Figura 5.5. No actúa ningún campo externo sobre el sistema. La pared inferior se hace vibrar con un movimiento en forma de dientes de sierra con velocidad  $v_b$  (ver Figura 4.3). Además, la amplitud de la vibración se toma mucho menor que el recorrido libre medio de las partículas junto a ella, de modo que la posición del fondo de la caja se puede considerar fija a todos los efectos. Por ello, todas las partículas que colisionan con la pared la encuentran en la misma posición y con la misma velocidad  $v_b$ . Las colisiones de las partículas con las otras paredes se consideran elásticas, por sencillez, mientras que las colisiones entre partículas se caracterizan con un coeficiente constante de restitución normal  $\alpha$ , viniendo pues descritas por las leyes B.1. Manteniendo el resto de parámetros del sistema fijos, hemos realizado una serie de simulaciones en las que variaba el número total de partículas del sistema.

Se observa que, en sistemas con un número de partículas relativamente pequeño, el sistema alcanza un estado estacionario en el que los granos se reparten de igual forma en los dos compartimentos. Sin embargo, cuando  $N$  aumenta por encima de un valor crítico, la simetría se rompe espontáneamente, y las poblaciones a ambos lados de la pared son distintas en el estado estacionario. La asimetría de la transición se puede caracterizar mediante el parámetro

$$\epsilon = (N - 2\bar{N}^{(i)})/2N. \quad (5.1)$$

Donde  $\bar{N}^{(i)}$  es la media temporal del número de partículas en el compartimento de la izquierda en el estado estacionario. El diagrama de bifurcación resultante se recoge en la Figura 5.6, en la que se representa  $\epsilon$  como función de  $\xi_m$ , magnitud adimensional que es proporcional al número total de partículas  $N$  y que definiremos más adelante. Los datos de simulación de la figura corresponden a un sistema con dimensiones  $L = 140\sigma$  y  $S = 50\sigma$ . El tamaño del agujero ha sido escogido mayor que el recorrido libre medio del gas que le rodea, para asegurarnos que los campos hidrodinámicos se igualan en ambos compartimentos por encima de la pared. Se incluyen resultados de dos valores distintos del coeficiente de restitución  $\alpha = 0.95$  y  $\alpha = 0.9$ . Como se puede observar, los datos de la simulación colapsan sobre una misma curva cuando se representan como función de  $\xi_m$ . Es más, hemos verificado que el diagrama de bifurcación no se altera al modificar la velocidad de la pared  $v_b$ , siempre que ésta sea suficientemente alta como para que el sistema se mantenga fluidizado. Resultados similares se obtienen mediante la simulación del sistema utilizando el método de simulación directa de Monte Carlo [28].

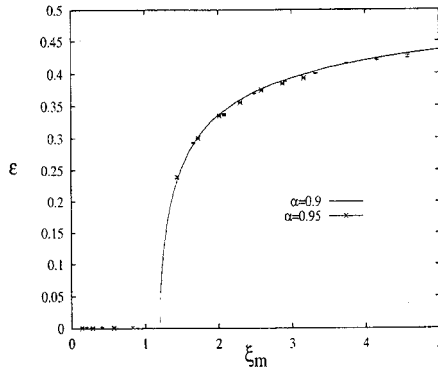


Figura 5.6: Diagrama de bifurcación del experimento de la Figura 5.5. La línea continua marca la solución teórica, mientras que los puntos se han obtenido de la simulación de Dinámica Molecular. La escala  $\xi_m$  se define en el texto a partir de la Ec.(5.2). Los detalles de la simulación también se dan en el texto.

### 5.3 Descripción hidrodinámica

Para explicar lo que se observa en las simulaciones, hemos hecho uso de la descripción hidrodinámica de un gas granular vibrado de discos duros presentada en el Capítulo 4. Consideremos un gas granular diluido confinado entre una pared vibrante en la posición  $x = 0$  y otra reflectante en  $x = L$ . Admitimos que existen gradientes sólo en la dirección  $x$ , siendo por tanto el sistema traslacionalmente invariante en la dirección perpendicular. Es conveniente introducir la variable adimensional reducida

$$\xi = \sqrt{a(\alpha)} \int_0^x \frac{dx'}{\lambda(x')}, \quad (5.2)$$

donde  $\lambda$ , definido en la Ec.(4.12), es el recorrido libre medio local,  $n(x)$  la densidad numérica local y, finalmente,  $C = 2\sqrt{2}$  para  $d = 2$  y  $C = \pi\sqrt{2}$  para  $d = 3$ . Además,

$$a(\alpha) = \frac{32(d-1)\pi^{d-1}\xi^*(\alpha)}{(d+3)^3 C^2 \Gamma(d/2) [\kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha)]}. \quad (5.3)$$

En esta última expresión,  $\kappa^*(\alpha)$  y  $\mu^*(\alpha)$  son funciones conocidas de  $\alpha$  que describen el flujo hidrodinámico en un gas granular diluido [80] y que se definieron en las Ecs. (2.20) y (2.22). En el límite de inelasticidad pequeña,

la primera tiende a la unidad ( $\kappa^*(\alpha) \rightarrow 1$ ) y la segunda a cero ( $\mu^*(\alpha) \rightarrow 0$ ). La función  $\zeta^*$  está asociada con la velocidad de enfriamiento como consecuencia a la disipación de energía en las colisiones inelásticas. También se puede comprobar que en el límite cuasielástico,  $\zeta^* \simeq (2+d)(1-\alpha)/2d$ .

En el extremo  $x = L$ ,  $\xi$  toma su valor máximo  $\xi_m \equiv \sqrt{a(\alpha)}C\sigma^{d-1}N_x$ , siendo  $N_x$  el número de partículas por unidad de sección de pared vibrante. Esta es precisamente la magnitud (aplicada al sistema completo) usada en el eje de abscisas de la Figura 5.6. Usando la escala  $\xi$ , el perfil de temperaturas  $T(\xi)$  y la presión  $p$  (que es uniforme en el sistema) están dados respectivamente por las ecuaciones (4.20) y (4.34). Ambas expresiones contienen a  $T_0$ , la temperatura del gas granular en las cercanías de la pared vibrante. Las expresiones anteriores se cierran con la ecuación de estado  $p = nk_B T$ .

Para analizar teóricamente el estado estacionario alcanzado por el sistema ilustrado en la Figura 5.5, lo vamos a modelar considerando dos compartimentos independientes que comparten tan solo una capa fina de gas granular a una temperatura  $T_0$ , situada en la parte inferior del contenedor (formalmente en  $x = 0$ ). El estado estacionario del gas en cada uno de los compartimentos se supone descrito correctamente por las ecuaciones (4.33) y (4.34). Las ecuaciones hidrodinámicas implican que la presión es constante en cada compartimento. Como, además, las presiones a ambos lados del agujero deben ser iguales en el estado estacionario, la presión es la misma en ambos compartimentos, lo que, según la ecuación (4.34), implica que

$$f(\xi_m^{(i)}) = f(\xi_m^{(d)}), \quad (5.4)$$

habiéndose definido por conveniencia la función

$$f(\xi) = \frac{2\xi + \sinh(2\xi)}{\cosh^2 \xi}. \quad (5.5)$$

Los índices  $(i)$  y  $(d)$  en la ecuación (5.4) se refieren a los compartimentos de la izquierda y la derecha de la caja, respectivamente. La conservación del número total de partículas implica, por otro lado, la siguiente ligadura para las variables escaladas:

$$\xi_m^{(i)} + \xi_m^{(d)} = 2\xi_m = 2\sqrt{a(\alpha)}C\sigma^{d-1}N_x. \quad (5.6)$$

Nótese que en este caso  $N_x = N/2S$ . Por supuesto, la ecuación (5.4) tiene siempre la solución trivial  $\xi_m^{(i)} = \xi_m^{(d)} = \xi_m$ , que corresponde al estado simétrico con el mismo número de partículas en ambos compartimentos. Para investigar si existe otra solución, se debe analizar la función  $f(\xi)$ , que se muestra en la Figura 5.7. La función presenta un máximo en  $\xi = \xi_0$ , siendo  $\xi_0$  la raíz de la ecuación

$$\xi_0 \tanh(\xi_0) = 1. \quad (5.7)$$

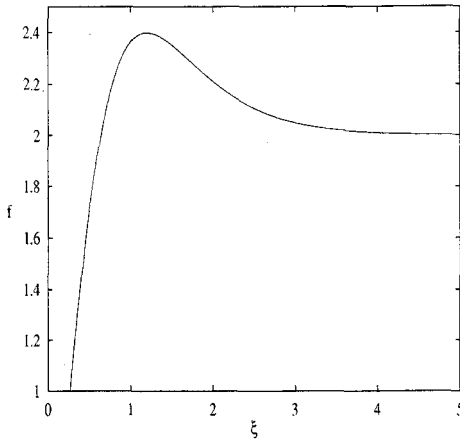


Figura 5.7: Representación gráfica de la función  $f(\xi)$  definida en la ecuación (5.5). Como se discute en el texto, ésta es la forma en que varía el perfil de presiones con  $\xi_m$ .

Numéricamente, se encuentra que  $\xi_0 \simeq 1.20$ . Si el sistema es tal que  $\xi_m < \xi_0$ , existe sólo la solución simétrica, mientras que si  $\xi_m > \xi_0$ , existen además dos valores  $\xi_m^{(i)}$  y  $\xi_m^{(d)}$ , siendo  $\xi_m^{(i)} \neq \xi_m^{(d)}$ , que cumplen las ecuaciones (5.4) y (5.6). Para comprobar ésto no hay más que fijarse en que para que la condición (5.4) se cumpla,  $\xi_0$  debe ser un valor entre  $\xi_m^{(i)}$  y  $\xi_m^{(d)}$ , lo cual sólo puede ocurrir, según (5.6), cuando  $\xi_m > \xi_0$ .

La asimetría de los dos poblaciones, medida por  $\epsilon$  definido en Ec.(5.1), aumenta muy rápidamente a medida que el número total de partículas crece por encima de un valor crítico  $N_0$  determinado por  $\xi_0 = \sqrt{a(\alpha)} C \sigma^{d-1} N_0 / 2S$ . Aún más, el número de partículas en el estado estacionario de uno de los compartimentos decrece al añadir partículas al sistema, hasta alcanzar un valor fijo de densidad muy baja. A partir de entonces, todas las partículas que se añaden al sistema van a parar al compartimento de alta densidad, de forma que la diferencia relativa de densidad se va haciendo cada vez mayor. Este comportamiento tan inusual, que indica una tendencia del sistema a desplazar todas las partículas “superfluas” hacia el compartimento denso, se confirma por los resultados de simulación. La línea continua de la Figura 5.6 corresponde a las soluciones de la Ec.(5.4). Obsérvese que, escalada de esta forma, la dependencia en  $\alpha$  de la predicción teórica ha sido eliminada. Se observa un



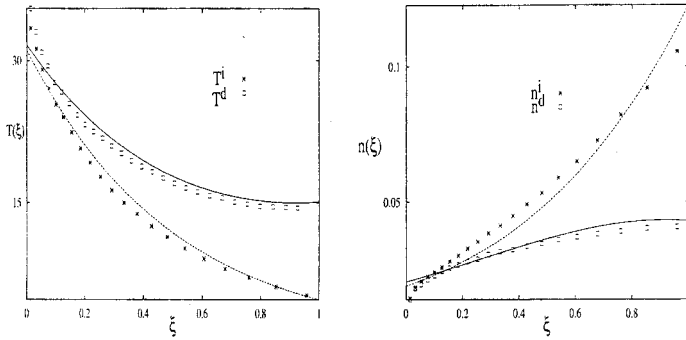


Figura 5.8: Perfiles de densidad  $n(z)$  y temperatura  $T(\xi)$  en cada uno de los compartimentos ([i]zquierda y [d]derecha), en un sistema con  $\xi_m=2.27$ ,  $\alpha = 0.975$ . Las líneas corresponden a los perfiles teóricos y los puntos son resultados de simulación de Dinámica Molecular.

acuerdo bastante bueno entre la teoría y la simulación.

Justo por debajo del punto crítico,  $0 < \xi_m - \xi_0 \ll 1$ , la solución asimétrica está descrita por

$$\epsilon = \pm [A_0(\xi_m - \xi_0)]^{1/2}, \quad (5.8)$$

con  $A_0 \simeq 0.31$ , indicando un comportamiento crítico descrito con un exponente  $\beta = 1/2$ . Esto corresponde a una energía libre clásica de Landau para una transición de fase de segundo orden.

También hemos investigado los perfiles hidrodinámicos estacionarios en cada uno de los compartimentos. Como ejemplo, en la Figura 5.8 comparamos las predicciones teóricas para los perfiles de la temperatura y la densidad con los obtenidos en la simulación de Dinámica Molecular. Hay que tener en cuenta que los resultados de simulación están afectados por efectos de volumen finito que no se consideran en la descripción hidrodinámica que hemos empleado, ya que está basada en la ecuación de Boltzmann. La figura corresponde a un sistema de discos duros inelásticos con coeficiente de restitución  $\alpha = 0.975$ , cuya masa y diámetro han sido tomados como unidades de la simulación. La unidad de temperatura, por otro lado, se ha fijado tomando la energía cinética total al comienzo de la simulación con el valor unidad. Hemos construido las curvas teóricas para la temperatura usando  $T_0^{(i)}$  y  $T_0^{(d)}$  como parámetros de ajuste. Aunque en la teoría simplificada se han considerado ambas temperaturas iguales ( $T_0^{(i)} = T_0^{(d)} = T_0$ ) y hemos despreciado el tamaño de la zona común más próxima a la pared vibrante, las simulaciones indican

que el estado de esta capa límite es, como era de esperar, más complicado que eso. Los valores de las variables hidrodinámicas en la zona cercana a la pared vibrante no corresponden a la extrapolación de lo que se observa en el centro de los compartimentos. Por el contrario, el perfil de la densidad teórico no incluye ningún parámetro de ajuste externo. La forma de los perfiles indica que el sistema se segrega en dos fases diferentes: mientras que en uno de los compartimentos el fluido es denso y frío, en el otro es caliente y diluido. Como se discutió anteriormente en el caso del sistema sometido a la acción de un campo externo, la situación se asemeja a que hubiera un diablillo controlando que el número de partículas en un compartimento permanezca muy bajo y seleccionando el paso de las partículas de un compartimento al otro según su velocidad. De nuevo, el buen acuerdo de la teoría con la simulación apoya la validez del modelo propuesto y, con más generalidad, de una descripción hidrodinámica de este comportamiento singular de los fluidos granulares.

## 5.4 Sistema con tres compartimentos

Pasamos a continuación a abordar el problema de la aparición de asimetrías en el caso más complejo de que existan dos paredes iguales dividiendo así al sistema vibrado en tres compartimentos de idéntica anchura  $S$  (ver Figura 5.9). La excitación es homogénea en toda la extensión de la pared y la interacción de las partículas con el resto de las paredes continúa siendo elástica. Hemos simulado un sistema tal, de discos lisos inelásticos, variando su inelasticidad y la velocidad  $v_b$  de la pared vibrante, y hemos encontrado un fenómeno análogo al que se describió antes en el caso de dos compartimentos. Para un sistema ligeramente inelástico y una vibración suficientemente intensa, las partículas se reparten en el sistema de manera aproximadamente homogénea, una vez alcanzado el estado estacionario. En este estado, la energía suministrada por la pared vibrante se iguala con la que se disipa en los compartimentos al colisionar los discos entre sí. Cuando  $v_b$  se disminuye por debajo de un valor crítico, se produce una ruptura de la simetría del sistema en el estado estacionario. En todas las simulaciones realizadas en este rango de parámetros, hemos observado la aparición de una aglomeración de partículas en uno solo de los compartimentos, quedando los otros dos compartimentos relativamente vacíos, y con densidades similares. En algunas simulaciones, en las que el proceso se produce con la suficiente lentitud (lo que, fijado  $\alpha$ , implica sistemas suficientemente densos), hemos podido observar que el equilibrio final se alcanza en etapas. Antes de llegar al estado estacionario final con un compartimento muy poblado y los dos restantes con densidades similares, el sistema reparte sus componentes entre los compartimentos de forma más singular, como se aprecia en la Figura 5.10.

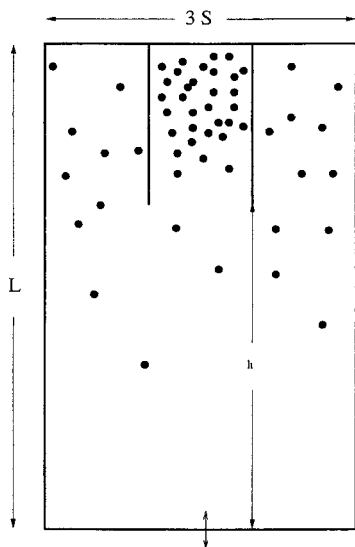


Figura 5.9: Esquema del sistema con tres compartimentos. Dos paredes similares dividen al sistema en tres espacios con igual anchura. Las partículas se mueven por efecto de la vibración impuesta por la pared inferior, chocan entre ellas inelásticamente, pero conservan su energía en los choques con las paredes laterales y superior.

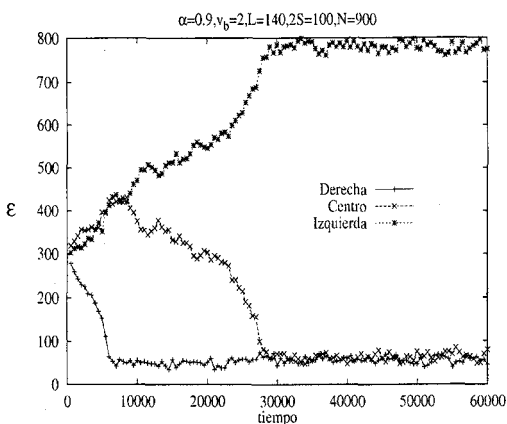


Figura 5.10: Evolución temporal del número de partículas en cada uno de los compartimentos. Aunque el resultado final es similar al de la Figura 5.11, se percibe en la simulación una fase transitoria, en la que el sistema parece pasar por un estado intermedio, en el que permanece brevemente antes de evolucionar hasta la configuración completamente asimétrica. La escala de tiempo es la misma que en aquella figura.

En la escala de tiempo empleada, uno de los sistemas se vacía casi instantáneamente quedando los dos sumidos en un equilibrio muy inestable en el que el resto de las partículas se reparte por igual entre los dos compartimentos restantes. Esta situación evoluciona más lentamente hasta que se llega al estado estacionario, en el que uno de los compartimentos acoge la gran mayoría de las partículas y los otros dos mantienen una proporción aproximadamente idéntica de ellas. Cuando el sistema es poco denso, la evolución al estado estacionario final se produce de manera rápida y no es posible identificar etapas intermedias. Una situación típica de esto se muestra en la Figura 5.11, para un sistema similar al de la Figura 5.10, pero con menor número de partículas  $N$ . Es conveniente hacer la observación de que en las figuras que mostramos en esta parte de la memoria relativas a la evolución temporal del sistema, tan sólo se muestra una parte significativa de ésta. En todas las simulaciones que se han llevado a cabo, se ha dejado evolucionar el sistema durante el tiempo necesario para tener asegurado que el sistema haya alcanzado una situación estacionaria.

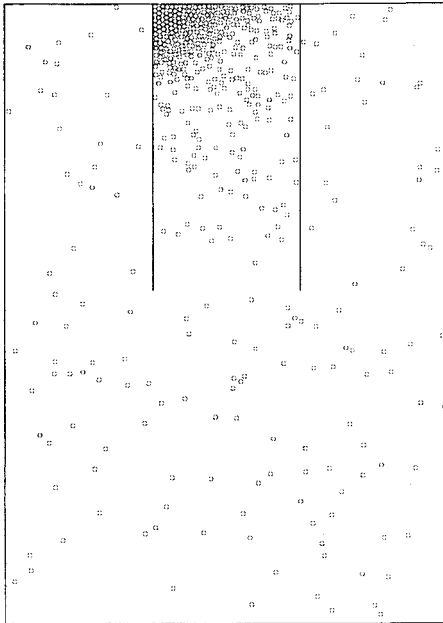
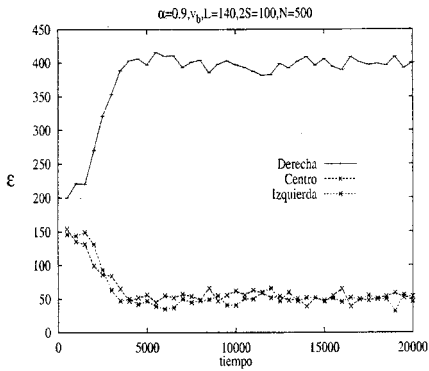


Figura 5.11: Evolución temporal (arriba) del número de partículas en cada uno de los compartimentos de la simulación de un sistema con  $N=500$  partículas. En la gráfica de abajo, mostramos una instantánea del sistema en el estado estacionario. La ruptura de la simetría es evidente en ambas gráficas.

Veremos a continuación que un tratamiento similar al presentado en la sección anterior es válido en el caso que nos ocupa y, de hecho, también si se tiene un número mayor de compartimentos iguales. En nuestro modelo, la presión y temperatura en los tres compartimentos debe ser igual en la zona cercana a la pared vibrante,  $x = 0$ . Dado que la forma de la presión en cada compartimento está dada por el perfil (4.34), la condición anterior implica que

$$f(\xi_m^{(1)}) = f(\xi_m^{(2)}) = f(\xi_m^{(3)}), \quad (5.9)$$

donde se hace uso, de nuevo, de la función  $f(\xi)$ , definida en (5.5), y de

$$\xi_m^{(i)} = \sqrt{a(\alpha)} C \sigma^{d-1} \frac{N_i}{S}, \quad (5.10)$$

siendo  $3S$  la longitud de la base del contenedor y  $N_i$  el número de partículas en el compartimento correspondiente ( $i = 1, 2, 3$ ). En lo que se refiere a las variables  $\xi_i$ , debemos tener presente que sobre ellas pesa la condición de que el número de partículas se conserva en el sistema, de modo que las tres deben tomar valores tales que cumplan

$$\xi_m^{(1)} + \xi_m^{(2)} + \xi_m^{(3)} = \sqrt{a(\alpha)} C \sigma^{d-1} \frac{N_1 + N_2 + N_3}{S} = 3\xi_m, \quad (5.11)$$

con

$$\xi_m = \sqrt{a(\alpha)} C \sigma^{d-1} \frac{N_1 + N_2 + N_3}{3S} = \sqrt{a(\alpha)} C \sigma^{d-1} N_x, \quad (5.12)$$

donde  $N_x = N/3S$  y  $N$  es el número total de partículas en el sistema.

Dada la peculiar forma de la función  $f(\xi^{(i)})$  (ver de nuevo la Figura 5.7), las igualdades de la Ec.(5.9), se producirán, a lo sumo, en dos puntos diferentes  $\xi^+$  y  $\xi^-$  de la curva para cada valor de la presión en la base de los compartimentos. Esto es, existen un par de números de ocupación compatibles con la presión del sistema, siempre que ésta sea menor que el máximo de  $f$  ( $\simeq 2.39$ ) y mayor que 2. Cada uno de los compartimentos puede tener  $\xi_m^{(i)}$  igual a  $\xi^+$  o  $\xi^-$ , lo que conduce a que podamos tener las siguientes situaciones:

- a) Los tres compartimentos con  $\xi^-$ , de modo que

$$S_0 \equiv \xi_m^{(1)} + \xi_m^{(2)} + \xi_m^{(3)} = 3\xi^-. \quad (5.13)$$

- b) Dos compartimentos con  $\xi^-$  y uno con  $\xi^+$ . En este caso,

$$S_1 \equiv \xi_m^{(1)} + \xi_m^{(2)} + \xi_m^{(3)} = 2\xi^- + \xi^+. \quad (5.14)$$

c) Un compartimento con  $\xi^-$  y dos con  $\xi^+$ . Ahora ha de ser

$$S_2 \equiv \xi_m^{(1)} + \xi_m^{(2)} + \xi_m^{(3)} = \xi^- + 2\xi^+. \quad (5.15)$$

d) Los tres compartimentos con  $\xi^+$ , lo que implica,

$$S_3 \equiv \xi_m^{(1)} + \xi_m^{(2)} + \xi_m^{(3)} = 3\xi^+. \quad (5.16)$$

Observemos que la etiqueta usada para cada posibilidad ( $S_i$ ) hace mención al número de compartimentos "llenos", o sea con un valor  $\xi^+$ . Analizando en este sentido las diferentes situaciones, encontramos las siguientes posibilidades,

- Dos situaciones indistinguibles, los casos  $S_0$  y  $S_3$ , que corresponden a la solución simétrica, en la que todos los compartimentos tienen el mismo número de partículas.
- Dos soluciones asimétricas, correspondientes a  $S_1$  y  $S_2$ .

La solución simétrica es siempre una solución posible del problema. En las simulaciones, sin embargo, hemos comprobado que el sistema prefiere, cuando es posible, una solución asimétrica y, más concretamente, el sistema tiende a la solución correspondiente al caso b).

El procedimiento seguido para la obtención del diagrama de bifurcación ha sido el siguiente: se ha fijado un valor de la inelasticidad (a través del coeficiente de restitución  $\alpha$ ), se ha hecho uso de la variable  $\xi_m$  de la ecuación (5.12) y se ha considerado

$$\epsilon = \frac{N_i}{N}, \quad (5.17)$$

como parámetro para representar la bifurcación que se produce en el sistema al aumentar el número de partículas. En la Figura 5.12 se han señalado las tres ramas posibles; la simétrica y las dos asimétricas. De entre estas dos últimas, el sistema nunca escoge una configuración en la que dos compartimentos estén llenos y uno solo vacío. La otra situación, en cambio, se encuentra siempre que el valor crítico de  $\epsilon$  se supera. Los puntos son resultados de simulación del sistema de discos duros. Partiendo de una configuración simétrica de las partículas y una distribución gaussiana de las velocidades, el sistema evoluciona hasta un estado en el que las partículas se reparten por igual en todas las

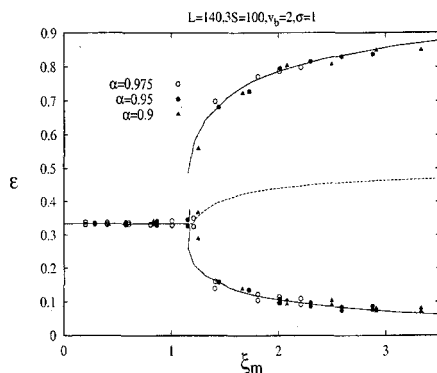


Figura 5.12: Diagrama de la bifurcación en el sistema con tres compartimentos. Las líneas representan las diferentes configuraciones posibles, según se discute en el texto. Los valores han sido calculados numéricamente. El sistema no se muestra nunca en la configuración  $S_2$  (línea discontinua) por encima del punto crítico, de lo que deducimos que se trata de una rama inestable.

regiones del sistema. Si los parámetros que caracterizan al sistema son tales que son posibles soluciones asimétricas, éste evoluciona hasta el estado asimétrico agrupándose las partículas en uno de los compartimentos extremos. Las líneas son las soluciones de la ecuación (5.9) con la ligadura expresada en (5.11). Es importante mencionar también que en las simulaciones se observa que la presión y la temperatura se igualan en la zona cercana a la pared (en la que los sistemas están en contacto), hasta donde la resolución de la estadística de la simulación permite distinguir.

En resumen, hemos comprobado que el problema de la ruptura espontánea de simetría en un sistema con tres compartimentos puede tratarse de forma similar al problema con dos compartimentos. De hecho la bifurcación de un sistema con múltiples compartimentos iguales se puede abordar de la misma forma, siempre que se asuma que los campos hidrodinámicos se igualan en la región próxima a la pared vibrante. Además, hemos comprobado la tendencia del sistema hacia la situación en la que la disipación es mayor, lo que corresponde al estado en que la mayoría de granos se concentra en un compartimento (que está “lleno”, por lo tanto) y el resto se reparte aproximadamente de manera homogénea en los restantes (“vacíos”). El fenómeno se puede entender en base a las ecuaciones hidrodinámicas que, de nuevo, aparecen como una herramienta muy valiosa para la descripción de fluidos granulares, al menos en el límite poco denso. Esta descripción resulta por tanto aplicable no sólo



al sistema más sencillo, compuesto de dos compartimentos separados por una pared, sino que se revela útil para un sistema más complejo, compuesto de varios compartimentos consecutivos unidos tan sólo parcialmente y separados por paredes.

## 5.5 Conclusión

En este capítulo se ha presentado un estado simple de un medio granular en el que se muestra la tendencia espontánea de estos sistemas a formar agregados de partículas, lo que en la geometría aquí estudiada, se manifiesta en una ruptura espontánea de la simetría. Se ha tratado la evolución de un sistema de discos duros inelásticos encerrados en una caja como la de la Figura 5.5. Los granos se agitan empleando una pared vibrante, no habiéndose considerado la acción de campo externo alguno. Hemos visto que es posible hacer una descripción hidrodinámica de este problema que reproduce de manera muy ajustada el diagrama de la bifurcación del sistema, en el parámetro de orden adecuado. Se ha tratado, así mismo, la extensión de esta descripción a geometrías más complicadas, obteniéndose unos resultados muy satisfactorios. En ambos casos, la ruptura de simetría no puede ser explicada en términos de un balance efusivo de los flujos de partículas.

La solución hidrodinámica propuesta, que se basa en la descripción del Capítulo 2 ha sido contrastada con resultados de simulación. El acuerdo, en particular, de los perfiles hidrodinámicos obtenidos en la simulación y predichos por la teoría, son una prueba clara de la validez de ésta.

Una cuestión aún por resolver es la razón por la que el sistema prefiere de hecho el estado asimétrico al simétrico. Una condición física al respecto nos la da el hecho de que la potencia disipada por las colisiones para un valor dado de la velocidad de la pared vibrante, es mayor en el caso asimétrico que en el simétrico, como se discute en el Apéndice *F*. Dejaremos, sin embargo, para el siguiente capítulo de esta memoria una discusión más profunda de esta cuestión.

## Capítulo 6

# Inhomogeneidades transversales de un medio granular fluidizado

En este capítulo vamos a estudiar un fenómeno de inestabilidad que desencadena una ruptura espontánea de la simetría de un sistema fluidizado en la dirección paralela a la pared vibrante. El sistema que consideramos es el de la Figura 4.1, es decir, un gas encerrado en una caja rectangular, libre de campos externos y al que se suministra energía a través de una de las paredes, que vibra. Para una geometría como la descrita, se ha observado una ruptura de la simetría en la dirección perpendicular a la pared vibrante [122, 123]. El trabajo de Livne [122] se restringe al límite cuasielástico y se basa en un análisis de estabilidad marginal de las ecuaciones hidrodinámicas. Las predicciones de este análisis se comparan con soluciones numéricas de las ecuaciones hidrodinámicas con las condiciones de contorno apropiadas. El mismo fenómeno se ha observado en un sistema granular encerrado en una geometría similar en presencia de un campo gravitatorio. Sunthar y Kumaran [103] han obtenido resultados de simulación de este sistema que muestran la existencia de convección y separación de fases en el sistema, indicando la coexistencia de una región diluida con otra de una densidad mucho mayor.

A continuación vamos a profundizar en el análisis de este fenómeno utilizando para ello tanto la descripción hidrodinámica expuesta en el Capítulo 5 como la simulación mediante ordenador. Desde el punto de vista teórico, partiremos de las ecuaciones hidrodinámicas derivadas de la ecuación de Boltzmann para discos inelásticos, válidas, en principio, para inelasticidad arbitraria. Podemos entender de esta forma que se extiende el rango de validez de los resultados previos [122]. Presentaremos, además, un estudio analítico basado en la aproximación WKB. Como ya hemos indicado, una de las ventajas principales de esta forma de afrontar el problema es que permite la identificación del parámetro de orden que gobierna la bifurcación. Además, la simula-

ción del sistema tanto mediante el método de Monte Carlo como de Dinámica Molecular, muestra la existencia de la bifurcación predicha por la teoría, pudiéndose comparar los valores observados en la simulación del valor crítico del parámetro con los previstos teóricamente. Por último, del estudio de los perfiles hidrodinámicos más allá de la bifurcación, obtendremos un conocimiento más profundo del desarrollo de la inestabilidad.

El desarrollo de este capítulo es el siguiente. Partiremos de la descripción hidrodinámica del estado unidimensional de un gas granular vibrofluidizado en el régimen de baja densidad, identificando la forma de los perfiles hidrodinámicos. Este estado es el punto de partida para un análisis de la estabilidad marginal. La linearización de las ecuaciones hidrodinámicas en torno al estado monodimensional conduce a una ecuación diferencial de segundo orden. Utilizando la aproximación WKB, se construirá una solución del problema cerrado que constituyen esta ecuación y las condiciones de contorno. Esto requiere considerar tres casos bien diferenciados, dependiendo de los valores de los parámetros que caracterizan al sistema. La curva de estabilidad marginal se obtiene a partir de la solución WKB. Finalmente, se presentarán los resultados de los dos métodos de simulación y se compararán con las predicciones teóricas, así como con resultados anteriores de otros autores, en el rango de parámetros en los que ambos sean aplicables.

## 6.1 El estado de referencia

Las ecuaciones de balance que rigen un estado estacionario de un gas bidimensional de discos duros inelásticos de masa  $m$  y diámetro  $\sigma$ , vienen dadas en las relaciones (4.4) y (4.5). También vimos en el Capítulo 5 que las expresiones del tensor de presiones  $P$  y el flujo de calor  $\vec{q}$ , derivadas a partir de la ecuación inelástica de Boltzmann en el orden más bajo en los gradientes (conocido como orden de Navier-Stokes), Ecs. (2.14) y (2.15), se simplifican en el estado estacionario que consideramos [102] tomando la forma:

$$P = p\mathcal{I}, \quad (6.1)$$

$$\vec{q} = -\kappa\nabla T - \mu\nabla n. \quad (6.2)$$

Usando las demás definiciones allí introducidas, que incluyen las funciones  $\kappa^*$ ,  $\mu^*$  y  $\zeta^*$  (que, como se recordará, solo dependen del coeficiente de restitución normal  $\alpha$ ) se obtienen a partir de las ecuaciones (4.5) y (4.4),

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad (6.3)$$

$$(\kappa^* - \mu^*) \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa_0 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \kappa_0 \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right] - \zeta^* \frac{p^2}{\eta_0} = 0. \quad (6.4)$$

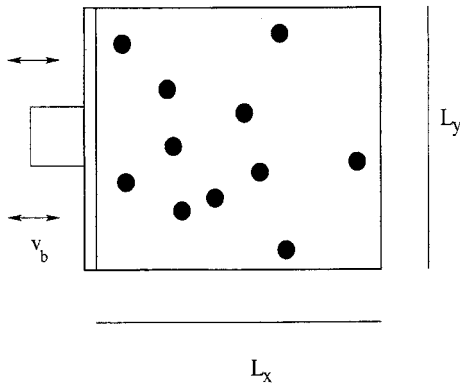


Figura 6.1: Esquema del dispositivo experimental considerado en este apartado. El pistón es la pared vibrante que suministra energía al sistema. La vibración de la pared está caracterizada por la velocidad  $v_b$ . La amplitud de la vibración es mucho menor que el recorrido libre medio de las partículas con las que la pared colisiona.

Necesitamos ahora precisar las condiciones de contorno. Hemos considerado un sistema que tiene  $N$  partículas encerradas en una caja rectangular de dimensiones  $L_x$  y  $L_y$ , idéntica a la de la Figura 6.1. La pared en  $x = 0$  vibra suministrando energía al sistema. Ésta es necesaria para mantenerlo fluidizado y en un estado estacionario. Las otras tres paredes, localizadas en  $x = L_x$ ,  $y = L_y$  y  $y = 0$ , permanecen en reposo. Consideraremos, como en otras ocasiones, que las colisiones de las partículas que componen el sistema con las paredes son elásticas. La expresión matemática de las condiciones de contorno expuestas es:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{y=0} = \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=L_x} = \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{y=L_y} = 0, \quad (6.5)$$

$$-[\kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha)] \left[ \kappa_0(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=0} = Q. \quad (6.6)$$

La ecuación (6.5) expresa que el flujo de calor debe ser nulo en las paredes inmóviles, mientras que (6.6) es el balance de energía en la pared vibrante. La magnitud  $Q$  es la energía que se proporciona al sistema a través de la pared por unidad de longitud y de tiempo. Recordemos que el único efecto que ejerce sobre el sistema una pared que se mueve en forma de dientes de sierra (como en la Figura 4.3) es la transferencia de energía a los granos, sin transmitir

característica alguna de su movimiento, como podría ser la periodicidad propia del movimiento continuo de la vibración. La idoneidad de esta aproximación ya ha sido discutida en el Capítulo 4. Por conservación del momento lineal, la presión en la pared vibrante deber ser idéntica a la presión cinética  $p$ . Cuando una partícula de velocidad  $v$  colisiona con la pared, el cambio en su energía y su momento están relacionados según  $\Delta E = v\Delta p_x$ . Si se promedian las contribuciones de todas las partículas que golpean la pared en uno de sus ciclos (ver Apéndice F) se comprueba que  $Q$  es igual al producto de la velocidad de la pared por el momento transferido por unidad de tiempo [124],

$$Q = pv_b. \quad (6.7)$$

El problema planteado en las ecuaciones (6.3)-(6.7) admite la solución independiente de  $y$  que ha sido presentada con todo detalle en el Capítulo 4. En él se puede encontrar, en particular, la expresión de los campos hidrodinámicos en función de la escala espacial  $\xi_x$ , que depende del coeficiente de restitución y el recorrido libre medio local del gas. En lo que sigue, consideraremos esta solución como nuestro estado de referencia, por lo que las propiedades que lo definen se caracterizarán con el subíndice  $R$ .

En algunos estudios anteriores [101, 102] se ha tratado un sistema análogo pero con una pared térmica. Por definición, las partículas que colisionan con una pared térmica la abandonan con una distribución Maxwelliana de velocidades correspondiente a una temperatura dada por la pared  $T_0$ . Aunque este tipo de condición de contorno no es realista, puede resultar interesante con el objeto de comparar resultados. Queremos hacer notar que el único cambio que ha de realizarse en el tratamiento del Capítulo 4 para adaptarlo al caso de una pared térmica, es la sustitución de la condición de contorno expresada en la ecuación (6.6) por la exigencia de que la temperatura  $T_{0,R}$  tenga el valor  $T_0$  que caracteriza a la pared. Como consecuencia de ello, las expresiones de los perfiles hidrodinámicos permanecen idénticas, si bien no tiene sentido la expresión de  $T_{0,R}$  en función de los parámetros que caracterizan al sistema.

## 6.2 Análisis de estabilidad marginal

Pretendemos investigar si el sistema descrito en la sección anterior presenta otro estado estacionario aparte del ya señalado como de referencia. Para ello, introducimos una perturbación pequeña en la temperatura, según:

$$T(x, y) = T_R(x) + \delta T(x, y), \quad (6.8)$$

siendo, por tanto,  $\delta T(x, y) \ll T_R(x)$ . Buscamos entonces una solución de las ecuaciones (6.3-6.7) con esta forma. Sustituyendo (6.8) en (6.4) y considerando

la aproximación lineal en  $\delta T$ , se obtiene

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial \xi_x^2} + 2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \ln T_R}{\partial \xi_x} \right)^2 + \left( \frac{\lambda_R}{\lambda} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_y^2} \right] \delta T = \frac{4T_R}{p_R} \delta p, \quad (6.9)$$

donde hemos definido

$$p = p_R + \delta p. \quad (6.10)$$

Además, hemos introducido las escalas adimensionales (ver Ec.(4.13))

$$\xi_x = \sqrt{a(\alpha)} \int_0^x \frac{dx'}{\lambda_R(x')}, \quad (6.11)$$

$$\xi_y = \frac{\sqrt{a(\alpha)} y}{\lambda}, \quad (6.12)$$

viniendo  $a(\alpha)$  dado por la ecuación (4.14) y siendo  $\hat{\lambda}$  el recorrido libre medio correspondiente a la densidad media  $\hat{n} = N/L_x L_y$ ,

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{2\sqrt{2}\sigma\hat{n}}. \quad (6.13)$$

Por otro lado,  $\lambda_R(x')$  es el recorrido libre medio local asociado al perfil de densidad  $n_R(x')$ .

Siguiendo el método de separación de variables, buscamos soluciones de la ecuación (6.9) que factoricen en la forma:

$$\delta T(\xi_x, \xi_y) = \phi(\xi_x)\psi(\xi_y). \quad (6.14)$$

Las condiciones de contorno que deben verificar las componentes  $\psi$  y  $\phi$  se siguen directamente de las ecuaciones (6.5) y (6.6):

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial \xi_x} \right)_{\xi_x=\xi_x^*} = \left( \frac{\partial \psi}{\partial \xi_y} \right)_{\xi_y=0} = \left( \frac{\partial \psi}{\partial \xi_y} \right)_{\xi_y=\xi_y^*} = 0, \quad (6.15)$$

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial \ln T_R}{\partial \xi_x} \right)_{\xi_x=0} \phi(0) + \left( \frac{\partial \phi}{\partial \xi_x} \right)_{\xi_x=0} = 0, \quad (6.16)$$

donde

$$\xi_y^* = 2\sqrt{2a(\alpha)} \frac{\sigma N}{L_x} \quad (6.17)$$

y

$$\xi_x^* = 2\sqrt{2a(\alpha)} \frac{\sigma N}{L_y}. \quad (6.18)$$

Las ecuaciones (6.5) y (6.6) también implican que  $\delta p = 0$ , es decir, que una perturbación pequeña no cambia el perfil de presiones. Para demostrar

esto, partimos de la ecuación (6.6), sustituyendo en ella las expresiones de la temperatura, la presión y la energía suministrada por la pared vibrante por unidad de tiempo, Ecs.(6.7), (6.8) y (6.10). Manipulando la expresión se obtiene,

$$(p_R + \delta p)v_b = -[\kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha)] \frac{\kappa_0(T)}{T^{1/2}} \times \\ [T_R(0) + \delta T(0, y)]^{1/2} \left[ \left( \frac{\partial T_R(x)}{\partial x} \right)_{x=0} + \left( \frac{\partial \delta T(x, y)}{\partial x} \right)_{x=0} \right] \quad (6.19)$$

Teniendo en cuenta que

$$-[\kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha)] \left[ \frac{\kappa_0(T)}{T^{1/2}} T_R^{1/2}(0) \frac{\partial T_R(x)}{\partial x} \right]_{x=0} = p_R v_b, \quad (6.20)$$

la igualdad anterior queda, tras despreciar contribuciones de segundo orden en las inhomogeneidades,

$$-[\kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha)] \frac{\kappa_0(T)}{T^{1/2}} T_R^{1/2}(0) \\ \left[ \frac{1}{2T_R(0)} \left( \frac{\partial T_R(x)}{\partial x} \right)_{x=0} \delta T(x, y) + \left( \frac{\partial \delta T(x, y)}{\partial x} \right)_{x=0} \right] = \delta p v_b. \quad (6.21)$$

Si restringimos esta relación a perturbaciones que factorizan según la Ec.(6.14), la ecuación anterior queda en la forma,

$$-[\kappa^*(\alpha) - \mu^*(\alpha)] \frac{\kappa_0(T)}{T^{1/2}} T_R^{1/2}(0) \\ \left[ \frac{1}{2T_R(0)} \left( \frac{\partial T_R(x)}{\partial x} \right)_{x=0} d\phi(x) + \left( \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right)_{x=0} \right] = \frac{\delta p}{\psi(y)} v_b. \quad (6.22)$$

Dado que la parte izquierda de la identidad anterior es una constante, como se sigue de la definición de  $\kappa_0$ , Ec.(2.24), concluimos que la derecha también debe ser lo; y esto sólo ocurre si  $\delta p = 0$ , que es lo que queríamos demostrar.

Sustituyendo la ecuación (6.14) en la ecuación lineal (6.9), se obtienen las ecuaciones:

$$\frac{1}{\psi(\xi_y)} \frac{d^2 \psi(\xi_y)}{d\xi_y^2} = -k^2, \quad (6.23)$$

$$\left[ \frac{d^2}{d\xi_x^2} + 2 - \frac{1}{2} \left( \frac{d \ln T_R}{d\xi_x} \right)^2 - \left( \frac{k \hat{n} T_R}{p_R} \right)^2 \right] \phi(\xi_x) = 0, \quad (6.24)$$

siendo  $k$  la constante de separación. La solución de la ecuación (6.23) que cumple la condición de contorno correspondiente, Ec.(6.15), es

$$\psi = A \cos k\xi_y, \quad (6.25)$$

a falta de determinar la constante  $A$ . Los valores posibles de  $k$  están restringidos además a  $k = \pi m/\xi_y^*$ , siendo  $m$  un número entero. Es importante percatarse de que el límite de densidad baja no implica los límites  $\xi_x^* \ll 1$  ó  $\xi_y^* \ll 1$ . De hecho, ambas magnitudes pueden ser grandes en un sistema muy diluido.

Otra condición que debe imponerse a  $\delta T(x, y)$  es que conserve el número total de partículas en el sistema  $N$ . Haciendo uso de la ecuación de estado y del resultado visto de que  $\delta p = 0$ , podemos calcular

$$\delta n(x, y) = \delta \left[ \frac{p}{k_B T(x, y)} \right] = - \frac{p}{k_B T_R(x)^2} \delta T(x, y). \quad (6.26)$$

Siguiendo el razonamiento, la integral de esta cantidad sobre todo el sistema debe ser nula, de modo que se conserve el número de partículas en el sistema. Con ayuda de la relación anterior esta condición se puede expresar equivalentemente como

$$\int_0^{\xi_x^*} d\xi_x \int_0^{\xi_y^*} d\xi_y \frac{\delta T(\xi_x, \xi_y)}{T_R(\xi_x)} = 0. \quad (6.27)$$

La ecuación (6.14) con  $\psi$  dado por (6.25) garantiza que la identidad anterior se cumple, ya que al factorizar  $\delta T(x, y)$ , factorizan las integrales, y la integral en  $\xi_y$  es nula porque  $k\xi_y^*$ , por definición, es múltiplo entero de  $\pi$ .

En un trabajo llevado a cabo por Livne y colaboradores [122], se obtuvo una ecuación con estructura similar a (6.24) para un sistema denso en el límite de colisiones cuasielásticas, con la ayuda de relaciones constitutivas aproximadas que habían sido introducidas por Grossman [101]. Dicha ecuación fue resuelta en [122] usando técnicas numéricas. Aquí, en cambio, haremos uso de la aproximación de Wentzel, Kramers y Brioullin (WKB), para investigar las posibles soluciones de la ecuación hidrodinámica (ver Apéndice G).

Haciendo uso de los perfiles hidrodinámicos (4.20) y (4.23) se puede escribir la ecuación (6.24), en la escala correspondiente, como

$$\frac{d^2 \phi(\xi_x)}{d\xi_x^2} + f(\xi_x) \phi(\xi_x) = 0, \quad (6.28)$$

donde la función  $f(\xi_x)$  viene dada por

$$f(\xi_x) = \frac{2}{\cosh^2(\xi_x^* - \xi_x)} - \frac{16k^2 \xi_x^{*2} \cosh^4(\xi_x^* - \xi_x)}{(2\xi_x^* + \sinh 2\xi_x^*)^2}. \quad (6.29)$$



Nótese que  $f(\xi_x)$  es una función monótonamente creciente de su argumento en todo el intervalo  $0 \leq \xi_x \leq \xi_x^*$ .

Para construir la aproximación exponencial WKB de la ecuación (6.28) hemos de considerar tres rangos de los parámetros que vamos a tratar separadamente a continuación, según sea el signo de la función  $f(\xi_x)$  en el intervalo de valores de  $\xi_x$  que caractericen al sistema.

**a) La función  $f(\xi_x)$  es positiva en todo el sistema**

Dado el carácter monótonamente creciente de  $f(\xi_x)$ , esto equivale a que  $f(0) > 0$ , lo que según la definición de  $f$  implica que

$$k \leq \frac{2\xi_x^* + \sinh 2\xi_x^*}{2\sqrt{2}\xi_x^* \cosh^3 \xi_x^*}. \quad (6.30)$$

En este caso la solución WKB es oscilatoria,

$$\phi(\xi_x) = \frac{c_1}{\sqrt{g(\xi_x)}} \exp \left[ i \int_0^{\xi_x} d\xi'_x g(\xi'_x) \right] + \frac{c_2}{\sqrt{g(\xi_x)}} \exp \left[ -i \int_0^{\xi_x} d\xi'_x g(\xi'_x) \right], \quad (6.31)$$

donde

$$g(\xi_x) = \sqrt{f(\xi_x)}, \quad (6.32)$$

y  $c_1$  y  $c_2$  son dos constantes que, tras imponer la condición de contorno en  $\xi_x = \xi_x^*$ , se reducen a una sola,  $c$ , con lo que la solución queda en al forma:

$$\phi(\xi_x) = \frac{c}{\sqrt{g(\xi_x)}} \cos \int_{\xi_x}^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x). \quad (6.33)$$

Cuando se impone la condición de contorno en  $\xi_x = 0$ , para lo que se requiere la ecuación (6.16), obtenemos la relación de consistencia

$$\tan \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x g(\xi_x) = \frac{3 \tanh \xi_x^*}{g^3(0) \cosh^2 \xi_x^*}. \quad (6.34)$$

Esta igualdad determina los posibles valores de los parámetros del sistema para los que existe una solución WKB de la ecuación diferencial (6.28) en la región que se está estudiando.

En el caso de considerar una pared térmica, en la posición  $x = 0$ , en lugar de una elástica vibrante, la condición de contorno (6.16) se debe reemplazar por la de  $\phi(0) = 0$ , y la relación de consistencia es en este caso:

$$\cos \int_0^{\xi_x^*} d\xi g(\xi) = 0, \quad (6.35)$$

o lo que es lo mismo,

$$\int_0^{\xi_x^*} d\xi g(\xi) = \frac{(2q+1)\pi}{2}, \quad (6.36)$$

con  $q$  un entero arbitrario.

**b) La función  $f(\xi_x)$  es negativa en todos los puntos del sistema**

Este es el caso cuando  $f(\xi_x^*) \leq 0$ . A partir de la definición de  $f$ , Ec.(6.29), se sigue que la región de los parámetros en este caso es

$$k \geq \frac{2\xi_x^* + \sinh 2\xi_x^*}{2\sqrt{2}\xi_x^*}, \quad (6.37)$$

y la solución en la aproximación WKB es la combinación de dos exponenciales:

$$\phi(\xi_x) = \frac{b_1}{\sqrt{h(\xi_x)}} \exp \left[ \int_0^{\xi_x} d\xi'_x h(\xi'_x) \right] + \frac{b_2}{\sqrt{h(\xi_x)}} \exp \left[ - \int_0^{\xi_x} d\xi'_x h(\xi'_x) \right], \quad (6.38)$$

con

$$h(\xi_x) = \sqrt{-f(\xi_x)}, \quad (6.39)$$

y  $b_1, b_2$  dos constantes a determinar. Al imponer las condiciones de contorno (6.15) y (6.16) se llega a la siguiente relación de consistencia que deben verificar los valores de  $\xi_x^*$ ,

$$h(0)^3 \tanh \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x) = \frac{3 \tanh \xi_x^*}{\cosh^2 \xi_x^*}. \quad (6.40)$$

En el caso de que la pared situada en  $x = 0$  fuese térmica, en el sentido ya explicado, la ecuación anterior debe reemplazarse por

$$\cosh \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x) = 0, \quad (6.41)$$

y, puesto que no existe  $\xi_x^*$  que cumpla esta relación, no existe solución WKB en este rango de parámetros (en el supuesto de que la pared sea térmica).

**c) La función  $f(\xi_x)$  cambia de signo en el intervalo  $0 < \xi_x < \xi_x^*$**

Para ello,  $f(0)$  debe ser menor que cero y  $f(\xi_x^*)$  debe ser mayor que cero. Esto implica considerar valores de  $k$  que cumplan:

$$\frac{2\xi_x^* + \sinh 2\xi_x^*}{2\sqrt{2}\xi_x^* \cosh^3 2\xi_x^*} \leq k \leq \frac{2\xi_x^* + \sinh 2\xi_x^*}{2\sqrt{2}\xi_x^*}. \quad (6.42)$$

Dado que  $f(\xi_x)$  presenta en este intervalo un punto, que llamaremos  $a$ , en el que se anula ( $f(a) = 0$ ), tenemos que considerar por separado las regiones  $\xi_x < a$  y  $\xi_x > a$ . En la primera región, la solución WKB tiene la forma de la ecuación (6.38). En la segunda es de la forma indicada en la ecuación (6.31). La solución completa se construye uniendo ambas a través de las fórmulas de conexión entre los comportamientos oscilatorio y exponencial (ver Apéndice G). Puesto que en el caso que nos ocupa el punto  $a$ , es un cero de primer orden, es suficiente con la aplicación de la teoría básica [125]. Y tras imponer las condiciones de contorno que ha de cumplir la solución al problema en este rango, resulta que ésta debe cumplir la ecuación:

$$\tan\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) \frac{6 \tanh \xi_x^* - 2h^3(0) \cosh^2 \xi_x^*}{6 \tanh \xi_x^* + 2h^3(0) \cosh^2 \xi_x^*} = \frac{1}{2} \exp\left[-2 \int_0^a d\xi_x' h(\xi_x')\right], \quad (6.43)$$

donde

$$\theta = \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x g(\xi_x). \quad (6.44)$$

El correspondiente resultado para una pared térmica en  $x = 0$  es en este caso

$$\tan\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{2} \exp\left[-2 \int_0^a d\xi_x h(\xi_x)\right]. \quad (6.45)$$

## 6.2.1 Curva de estabilidad

Una vez que hemos establecido la solución WKB de nuestro problema en todo el rango de parámetros, la estrategia para crear la curva de estabilidad marginal es la siguiente. Dado un valor de  $\xi_x^*$ , el primer paso es comprobar si existe bifurcación de la solución unidimensional, es decir, si la ecuación (6.24) tiene solución. En el caso de que así sea, el valor más bajo de  $\xi_y^*$  para el que haya solución nos dará el punto de la curva de estabilidad marginal correspondiente a ese valor de  $\xi_x^*$ . Para valores mayores de  $\xi_y^*$ , la solución de referencia no es estable. Supongamos que existe una solución de la ecuación (6.28) para un valor dado de  $k$ . Este es compatible con muchos valores de  $\xi_y^*$ . De hecho, si recordamos la relación que existe entre  $k$  y  $\xi_y^*$ ,  $k = \frac{\pi m}{\xi_y^*}$ , el número de ellos es infinito, siendo el menor de ellos el que corresponde con la elección  $m = 1$ . Más aún, cuanto mayor sea el valor de  $k$ , más pequeño será el valor de  $\xi_y^*$  obtenido. La conclusión es, por tanto, que la curva de estabilidad la determina el mayor valor de  $k$  para el que el problema tiene solución. Eso significa que, desde un punto de vista práctico, tenemos que comenzar por buscar soluciones que correspondan al segundo caso ( $f < 0$ ) de los discutidos arriba, porque es el que implica, en principio, los mayores valores de  $k$  (ver Ec.(6.37)). Los valores de  $\xi_y^* = \pi/k$  que se obtienen de la ecuación (6.40), son puntos críticos, en el sentido de que definen valores de la curva de estabilidad.

No existe solución, sin embargo, para todos los valores de  $\xi_x^*$  que pertenecen al intervalo de valores de  $k$  que cumplen la condición (6.37). En particular, no existe solución alguna para el caso de una pared térmica, mientras que es fácil ver que la existencia de solución en esta región, en el caso de la pared vibrante, requiere

$$[h^{(1)}(0)]^3 \tanh \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x h^{(1)}(\xi_x) \leq \frac{3 \tanh \xi_x^*}{\cosh^2 \xi_x^*}, \quad (6.46)$$

donde

$$h^{(1)}(\xi_x) = \lim_{k \rightarrow k_1} h(\xi_x), \quad (6.47)$$

y hemos introducido  $k_1$ ,

$$k_1 = \frac{(2\xi_x^* + \sinh 2\xi_x^*)}{2\sqrt{2}\xi_x^*}. \quad (6.48)$$

Recordemos que los valores de  $k$  correspondientes a la solución **b)** deben cumplir la condición (6.37), que puede escribirse, en términos de  $k_1$ , como

$$k \geq k_1. \quad (6.49)$$

Además, para que exista solución, debe cumplirse la condición de consistencia. Ec.(6.40). Notar que, fijado  $\xi_x^*$ ,  $f(\xi_x)$  es una función decreciente de  $k$  para todo  $\xi_x$ . Entonces,  $h(\xi_x)$  es una función creciente en  $k$ , y se cumple

$$h(0)^3 \tanh \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x' h(\xi_x') \geq \lim_{k \rightarrow k_1} h(0)^3 \tanh \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x' h(\xi_x'). \quad (6.50)$$

Teniendo en cuenta la Ec.(6.40), se tiene que cumplir

$$\frac{3 \tanh \xi_x^*}{\cosh^2 \xi_x^*} \geq [h^{(1)}(0)]^3 \tanh \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x' h^{(1)}(\xi_x'), \quad (6.51)$$

que es precisamente la condición (6.46) y cuya solución numérica es  $\xi_x^* \leq 0.555$ .

Si el sistema es tal que el  $\xi_x^*$  correspondiente es mayor que éste, se deben buscar en una región diferente de valores de  $k$ . En concreto, buscaremos en la región en la que la función  $f$  cambia de signo. Siguiendo este procedimiento para cada valor de  $\xi_x^*$ , es sencillo encontrar en la aproximación WKB, el mayor  $k$  (o correspondientemente el menor  $\xi_y^*$ ) para el que el problema de autovalores definido en (6.24) tiene solución. La curva de estabilidad marginal para una pared vibrante, obtenida según este procedimiento, se muestra en la Figura 6.2, donde hemos pintado los valores críticos,  $\Delta_c$ , del parámetro de asimetría  $\Delta \equiv L_x/L_y = \xi_x^*/\xi_y^*$  como función de  $\xi_x^*$ . La línea continua es la solución WKB que corresponde al caso  $f(\xi_x^*) < 0$ , mientras que la de trazo discontinuo corresponde al último caso, en que  $f$  cambia de signo en el intervalo  $0 \leq \xi_x \leq$

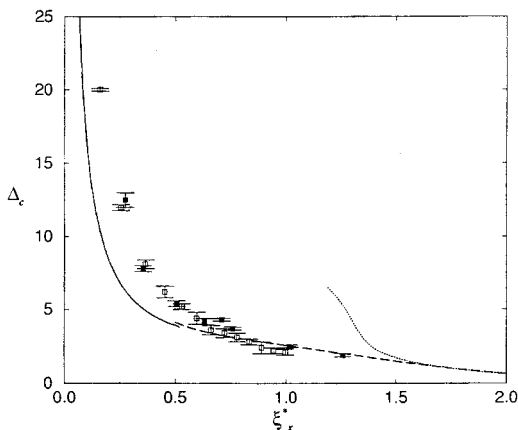


Figura 6.2: Curva de estabilidad marginal del sistema. Las líneas continua y discontinua son las predicciones de la aproximación WKB para un sistema fluidizado por una pared vibrante, mientras que la línea de puntos corresponde a un sistema con una pared térmica. También se muestran los resultados del algoritmo conducido por sucesos (símbolos blancos) y DSMC (símbolos negros). Para un valor dado de  $\xi_x^*$ , el sistema exhibe inhomogeneidades transversales en el estado estacionario para los puntos por encima de la curva.

$\xi_x^*$ . Obsérvese que las soluciones de ambas regiones se unen suavemente en el valor  $\xi_x^* \approx 0.555$ . Además,  $\Delta_c$  es una función monótonamente decreciente de  $\xi_x^*$ , que crece muy rápido cuando  $\xi_x^*$  tiende a cero, como era de esperar, puesto que las inhomogeneidades deben desaparecer en el límite elástico.

Cuando se considera una pared térmica en lugar de una vibrante, vemos que no existe solución en la región  $f < 0$ . Debemos, por tanto, buscar soluciones que pertenezcan a otro caso válido, como hicimos para la pared vibrante. Un análisis de la ecuación (6.45) conduce a que no existen soluciones para  $\xi_x < \xi_{x,e} \approx 1.181$ . Es más, la ecuación (6.36) tampoco tiene solución en ese intervalo, de lo que se infiere que la transición al estado transversalmente inhomogéneo en el caso de tener una pared térmica, en la aproximación WKB, requiere que la inelasticidad y el número de capas monodimensionales en equilibrio no sea pequeño. La línea de puntos de la Figura 6.2 indica la curva de estabilidad marginal para la pared térmica. Obsérvese que en el límite de  $\xi_x^*$  grande, la curva tiende a la de la pared vibrante, poniendo de manifiesto que la forma detallada en que se suministra energía al sistema se vuelve irrelevante en dicho límite.

## 6.3 Resultados de simulación

Para investigar la naturaleza de la ruptura de simetría predicha y comprobar los resultados teóricos presentados en las secciones anteriores, hemos simulado el sistema mediante Dinámica Molecular haciendo uso del algoritmo conducido por sucesos descrito en el Apéndice A. También presentaremos algunos resultados obtenidos mediante la técnica de resolución numérica de la ecuación de Boltzmann denominada simulación directa de Monte Carlo (DSMC) [126]. Este método de simulación, si bien se basa en la validez de la ecuación cinética, no incluye ninguna aproximación hidrodinámica, de forma que la validez de una descripción hidrodinámica del sistema, como la que ofrecen las ecuaciones de Navier-Stokes, no es asumida ni implícita ni explícitamente en el método. Es importante también hacer notar que, en contra de lo que ocurre en el algoritmo de Dinámica Molecular, en el DSMC no se tratan partículas reales, sino elementos ficticios que se emplean para reproducir la dinámica ideal que se deriva de la ecuación de Boltzmann. Es precisamente esta naturaleza ideal de las partículas lo que permite alcanzar una precisión numérica muy alta en las simulaciones de DSMC, ya que el número de partículas no afecta en absoluto al estado físico que se simula y, en particular, no está relacionado con la densidad de éste. En la simulación de Dinámica Molecular, en cambio, la densidad viene determinada por el número de partículas.

Pasamos a continuación a discutir los resultados de las simulaciones de Dinámica Molecular realizadas. Como estamos interesados en el límite de densidad baja, se han considerado sistemas con valores pequeños de la fracción sólida (B.4), típicamente del orden de  $10^{-2}$ . Para valores fijos de  $\nu$ ,  $\alpha$  y  $L_x$ , hemos llevado a cabo una serie de simulaciones variando los valores de  $L_y$ , comenzando con un valor suficientemente bajo. Esto implica que cada conjunto de simulaciones corresponde a un mismo valor del parámetro  $\xi_x^*$  definido en la Ec.(6.18), pero con diferentes valores del parámetro de asimetría  $\Delta$ . El otro parámetro necesario para especificar el estado del sistema es la velocidad de la pared vibrante  $v_b$ . Hemos verificado que, coherentemente con el desarrollo teórico del apartado anterior, al modificar esta velocidad no cambia la formación de inhomogeneidades transversales mientras sea lo suficientemente grande como para fluidizar el sistema. Todas las simulaciones han comenzado con una distribución espacial homogénea de discos, a los que se les ha asignado un conjunto de velocidades escogidas de una distribución gaussiana correspondiente a una temperatura arbitraria. A partir de estas condiciones se deja evolucionar al sistema hasta que alcanza un estado estacionario en que magnitudes tales como energía cinética media, fluctuaciones de densidad, y perfiles de temperatura, se hacen independientes del tiempo. Entonces, los perfiles de la densidad y temperatura, que son los de que nos proporcionarán la descripción hidrodinámica del sistema, son almacenados.

Vamos a pasar a describir los resultados de la simulación de un sistema de discos duros inelásticos con  $\alpha = 0.925$ ,  $\nu = 10^{-2}$  y  $L_x = 100\sigma$ . Para estos valores  $\xi_x^* = 0.281$ . En la Figura 6.4 presentamos la densidad local estacionaria,  $n(x, y)$  que alcanza el sistema tras un breve período de transición. Se observa que no existen gradientes en la dirección  $y$ , de forma que el sistema se encuentra en el estado de referencia. La homogeneidad transversal de este estado se observa con claridad en la Figura 6.5, donde se presenta la densidad como función de  $y$  para diferentes valores de  $x$ , lo que representamos mediante  $n(y|x)$ .

Al aumentar el tamaño del sistema incrementando  $L_y$ , aparece la inhomogeneidad transversal de manera espontánea, como se observa en la Figura 6.6, en la que se presenta, como en la Figura 6.4, la densidad en el sistema para los mismos parámetros que allí, con la única diferencia de que ahora  $L_y = 640\sigma$ . Se identifica claramente un gradiente en la dirección paralela a la pared. El mismo efecto se observa más claramente en la Figura 6.7, donde hemos hecho una representación de algunas "capas" del sistema con  $L_y = 640\sigma$ , de forma análoga a como hicimos en la Fig 6.5.

En todas las simulaciones hechas se ha podido observar una transición continua, al aumentar  $L_y$  desde el estado de referencia monodimensional a otro con una leve inhomogeneidad en la dirección transversal. El perfil transversal de densidad en la proximidad de la transición presenta una longitud de onda igual a dos veces la anchura del sistema. En los términos usados en el apartado anterior, lo que se observa es una perturbación con  $m = 1$  ( $k = \pi/\xi_y^*$ ), efecto que es consistente con el análisis teórico descrito en los apartados anteriores.

Si se continúa aumentando la longitud del sistema, las inhomogeneidades transversales aumentan rápidamente, de forma que los resultados del análisis de estabilidad marginal lineal no pueden ser aplicados. Las simulaciones (ver Figura 6.8) muestran que las partículas tienden a acumularse en una de las esquinas opuestas a la pared vibrante. El rápido aumento de los gradientes y el valor tan elevado de la densidad en una zona localizada del sistema parecen indicar que estamos ante la formación de un agregado de partículas del tipo descrito en [101].

Tras comprobar mediante inspección visual la aparición de las inhomogeneidades transversales, es deseable contar con un criterio cuantitativo para medir las desviaciones del estado del sistema respecto del transversalmente homogéneo. Esto es equivalente a determinar un parámetro de orden para caracterizar la transición. Dado que existen gradientes en ambas direcciones espaciales, la identificación de un parámetro tal no es trivial en absoluto. A continuación presentaremos nuestra elección, para lo cual comenzamos por

definir la cantidad adimensional

$$\rho_x(y) = \frac{n(x, y)}{L_y^{-1} \int_0^{L_y} dy n(x, y)} - 1. \quad (6.52)$$

Si el sistema es transversalmente homogéneo,  $\rho_x(y)$  es independiente de  $x$  e  $y$ , e igual a cero. Al aparecer la inhomogeneidad, en cambio, pasará a depender de  $y$  evidentemente, como se puede deducir de las Figuras 6.4 y 6.6, pero también dependerá de  $x$ . Los resultados de simulación indican, sin embargo, que esta última dependencia es muy débil, al menos en el entorno de la transición. En la Figura 6.3 presentamos la función  $\rho_x(y)$  para un mismo sistema con  $\Delta = 6.2$ . Las diferentes líneas corresponden a distintos valores de  $x$  igualmente distribuidos en el intervalo  $[3L_x/4, L_x]$ . Esta es la región donde los gradientes transversales son mayores. De la figura anterior se deduce que cuando  $x$  varía en este rango,  $\rho_x(y)$  es prácticamente independiente de  $x$ . Hay que indicar, sin embargo, que si se considera todo el rango de variación de  $x$ , se pueden apreciar dependencias en  $x$  de la función  $\rho_x$ . En cualquier caso, la medida de cómo se desvía de cero el valor promedio de  $\rho_x(y)$ ,  $\bar{\rho}(y)$ , sobre un rango dado de valores de  $x$  cercano a la pared reflectante y no demasiado grande como para que aparezcan dependencias en  $x$  indeseadas, ofrece un buen criterio para distinguir sistemas inhomogéneos en la dirección transversal de los que son homogéneos. Los resultados particulares que vamos a discutir han sido obtenidos usando el intervalo  $[3L_x/4, L_x]$ .

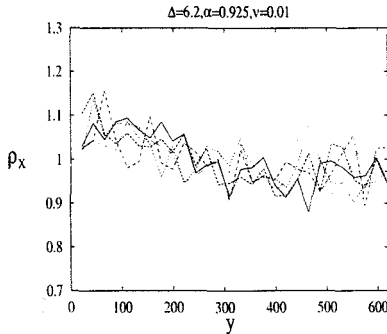


Figura 6.3: Resultados de simulación para la función adimensional  $\rho_x(y)$ , definida en la relación (6.52), en un sistema con parámetro de asimetría  $\Delta = 6.2$ . Las diferentes curvas corresponden a valores equiespaciados de  $x$  en el rango  $[3L_x/4, L_x]$ .



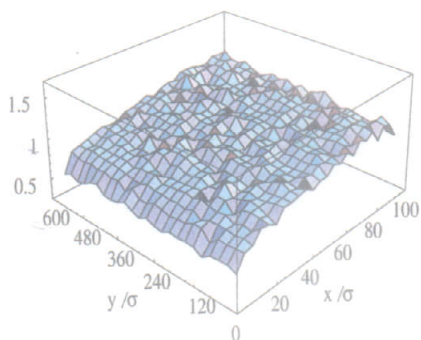


Figura 6.4: Representación tridimensional de la superficie estacionaria de densidad obtenida mediante el algoritmo de Dinámica Molecular para un sistema con  $\Delta = 6$  y  $\xi_x^* = 0.281$ . La densidad se ha normalizado con el valor medio  $\bar{n}$ . El sistema no muestra gradientes en la dirección  $y$ , permaneciendo en el estado de referencia. Se encuentra, por lo tanto, por debajo de la curva de estabilidad.

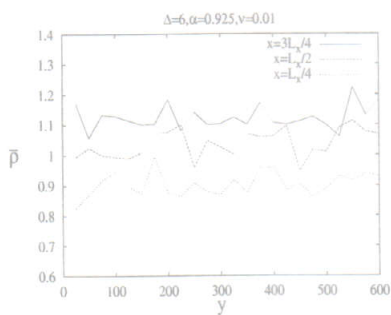


Figura 6.5: Detalles de la densidad como función de  $y$  para algunos valores de  $x$ , en el mismo sistema que en la Figura 6.4.

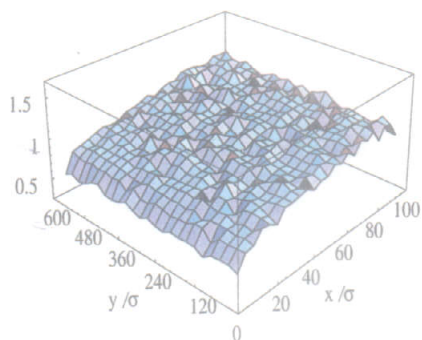


Figura 6.4: Representación tridimensional de la superficie estacionaria de densidad obtenida mediante el algoritmo de Dinámica Molecular para un sistema con  $\Delta = 6$  y  $\xi_x^* = 0.281$ . La densidad se ha normalizado con el valor medio  $\bar{n}$ . El sistema no muestra gradientes en la dirección  $y$ , permaneciendo en el estado de referencia. Se encuentra, por lo tanto, por debajo de la curva de estabilidad.

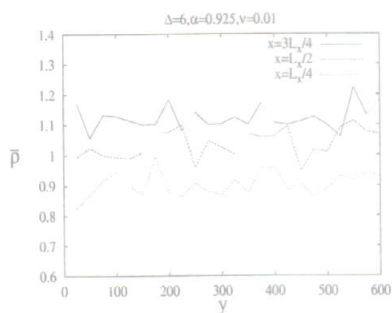


Figura 6.5: Detalles de la densidad como función de  $y$  para algunos valores de  $x$ , en el mismo sistema que en la Figura 6.4.

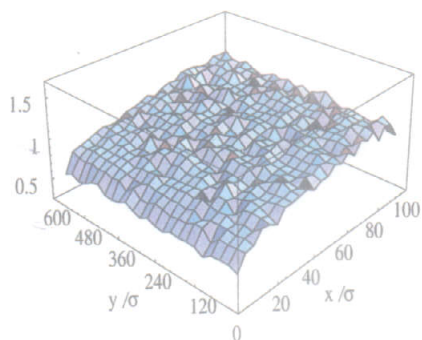


Figura 6.4: Representación tridimensional de la superficie estacionaria de densidad obtenida mediante el algoritmo de Dinámica Molecular para un sistema con  $\Delta = 6$  y  $\xi_x^* = 0.281$ . La densidad se ha normalizado con el valor medio  $\bar{n}$ . El sistema no muestra gradientes en la dirección  $y$ , permaneciendo en el estado de referencia. Se encuentra, por lo tanto, por debajo de la curva de estabilidad.

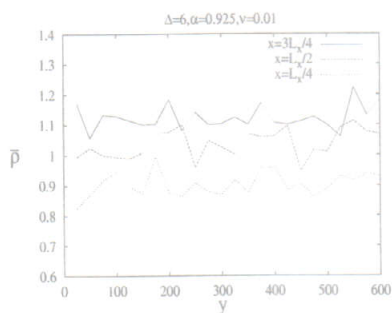


Figura 6.5: Detalles de la densidad como función de  $y$  para algunos valores de  $x$ , en el mismo sistema que en la Figura 6.4.

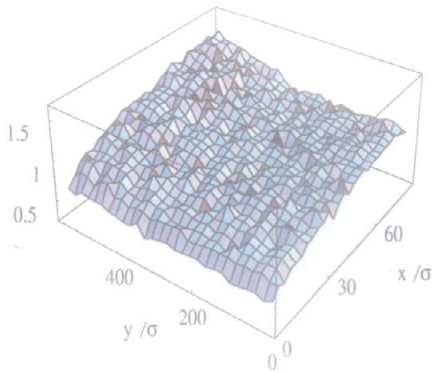


Figura 6.6: Perfil de densidad para la simulación de un sistema idéntico al de la Figura 6.4, pero con una asimetría  $\Delta = 6.4$ . El sistema está por encima de la curva de estabilidad, de forma que las inestabilidades en la dirección  $y$  son fácilmente observables.

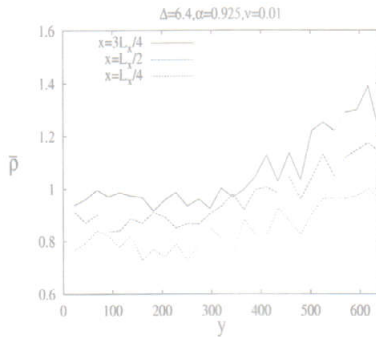


Figura 6.7: Perfil de densidad como función de  $y$  para algunos valores de  $x$  cubriendo todo el rango del sistema. Los puntos se han obtenido de la simulación del sistema con  $\Delta = 6.4$ . Los detalles de simulación son similares a figuras anteriores.

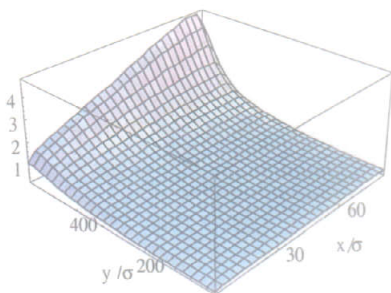


Figura 6.8: De la simulación de un sistema idéntico al de la Figura 6.4, pero con  $\Delta = 7$ , obtenemos este perfil de densidad, en el que fuertes gradientes transversales son fácilmente apreciables: las partículas tienden a agruparse en la parte superior izquierda de la celda. Evidentemente, el sistema se encuentra también por encima de la curva de estabilidad.

En la Figura 6.9, se muestra  $\bar{\rho}$  para diferentes simulaciones en sistemas que sólo difieren en el parámetro de asimetría  $\Delta$ . La transición continua desde el estado de referencia al inhomogéneo se observa claramente, así como el rápido aumento de los gradientes transversales cuando el sistema se encuentra dentro de la zona inestable de  $\Delta$ .

La discusión anterior, el análisis teórico y los resultados numéricos, sugieren que un parámetro de orden adecuado pudiera ser el módulo de la primera componente de Fourier,  $|f_1|$ , de  $\bar{\rho}(y)$ . De hecho, hemos verificado que el valor absoluto de la transformada de Fourier de esta cantidad presenta un máximo pronunciado para la primera componente cuando los gradientes comienzan a aparecer en el sistema. Algunos autores [127] han utilizado como parámetro de orden para caracterizar la aparición de inhomogeneidades transversales, la posición  $y_{CM}$  del centro de masas del sistema. En un sistema confinado entre paredes elásticas en la dirección transversal, esta elección es equivalente a la aquí considerada. Sin embargo, si se consideran condiciones periódicas de contorno, la posición del centro de masas no tiene ningún significado, puesto que el máximo en la función de densidad puede aparecer en cualquier punto. En la Figura 6.10 se muestra el comportamiento de  $|f_1|$  como función de  $\Delta$  en las

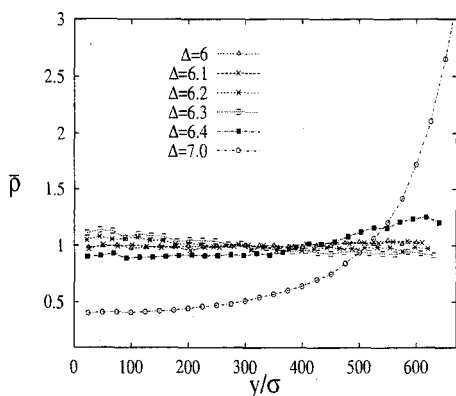


Figura 6.9: Medidas de la función adimensional  $\bar{\rho}(y)$ , obtenidas en la simulación del sistema para diferentes valores del parámetro de asimetría  $\Delta$ . Todos los demás parámetros son idénticos a los de la Figura 6.3. La transición a un estado inhomogéneo en la dirección  $y$  se identifica claramente.

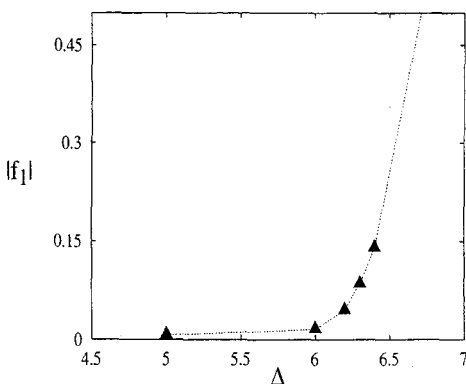


Figura 6.10: Resultados de simulación del parámetro de orden adimensional  $|f_1|$  como función de la asimetría  $\Delta$  para un sistema con  $\xi_x^* = 0.453$ . Se identifica claramente una transición de no equilibrio de segundo orden, tal y como se discute en el texto.

cercanías del punto de transición para los mismos parámetros considerados en las anteriores figuras. En primer lugar, nótese la variación continua de  $|f_1|$  a lo largo de la transición, variando rápidamente cuando se adentra en la región inhomogénea. Este es el comportamiento típico del parámetro de orden de una transición de no equilibrio de segundo orden [128]. El carácter continuo de  $|f_1|$  introduce alguna indeterminación en la posición del punto de transición  $\Delta_c$ . Hemos tomado la opción, quizás arbitraria pero en cualquier caso consistente, de que la transición tiene lugar cuando  $|f_1|$  se hace un orden de magnitud mayor que su valor típico en el estado de referencia, que se determina por el nivel de ruido. En el caso presentado, esto implica valores de la componente de Fourier  $|f_1| = 10^{-2}$ , lo que supone desviaciones respecto del valor homogéneo del orden de 1 %, de forma que la estimación para el parámetro de asimetría de transición en este caso concreto es  $\Delta_c = 6.4 \pm 0.2$ .

Cambiando los parámetros iniciales de la simulación y repitiendo el proceso se ha calculado  $\Delta_c$  para diferentes valores de  $\xi_x^*$ . Los resultados se presentan en la Figura 6.2, junto con los obtenidos mediante el uso de DSMC [126]. El acuerdo con las predicciones teóricas es bastante bueno, aunque debe tenerse en cuenta que las simulaciones sólo ofrecen una cota máxima para  $\Delta_c$ . Cuando el sistema está muy próximo al punto de transición, el tiempo requerido para llegar al estado transversalmente inhomogéneo desde el homogéneo pudiera ser demasiado grande como para observar la transición durante el tiempo de simulación. En cualquier caso, es justo decir que la hidrodinámica y la aproximación WKB ofrecen una descripción del sistema que concuerda bien con lo que se observa en las simulaciones. Y el acuerdo de los resultados del algoritmo de Dinámica Molecular con los de DSMC no hace sino validar la descripción cinética para gases inelásticos diluidos que proporciona la ecuación de Boltzmann.

Merece la pena llamar la atención sobre el hecho de que los puntos de la Figura 6.2 han sido obtenidos variando los valores de  $\alpha$  y  $\sigma N/L_y$ , cubriendo de este modo el intervalo de  $\xi_x^*$  indicado en la Figura. El hecho de que los valores de  $\Delta_c$  obtenidos de esta forma varíen suavemente con  $\xi_y^*$  da validez a la predicción teórica de que  $\Delta_c$  depende de los diferentes parámetros del sistema a través de  $\xi_y^*$ . Esto se ha comprobado considerando dos conjuntos de simulaciones con diferentes valores de  $\alpha$  y  $N\sigma/L_y$ , pero el mismo valor de  $\xi_y^*$ . En ambos casos, se encontró el mismo valor crítico del parámetro de asimetría.

## 6.4 Comparación con resultados precedentes

Mediante la resolución numérica de las ecuaciones hidrodinámicas, en la referencia [122] se encuentran estados bidimensionales no lineales dentro de la

zona de inestabilidad lineal correspondientes a densidades altas. No existe en esto contradicción alguna con nuestros resultados, puesto que nuestro análisis se limita a gases de baja densidad. En la misma referencia, se da una expresión analítica para la curva de estabilidad marginal en un cierto límite que, en nuestra notación, corresponde a  $\xi_x^* \ll 1$ . Despreciando términos subdominantes, dicha expresión tiene la forma  $\Delta_x \approx 1.63/\xi_x^*$ , que es diferente a la obtenida en esta memoria. Desgraciadamente, no es posible obtener resultados de simulación con la suficiente exactitud en la región de validez de esta aproximación como para discriminar entre ambas expresiones.

Por otro lado, aunque parece claro que la ruptura espontánea de simetría que se ha discutido en este capítulo debe estar estrechamente relacionada con la inestabilidad que desencadena la formación de agregados en un gas granular que evoluciona libremente [129], creemos que la relación no es trivial y debe ser investigada cuidadosamente. La información con la que contamos hasta ahora sobre cada uno de los fenómenos no es la misma, sino que es hasta cierto punto complementaria. Conocemos el mecanismo responsable de la inestabilidad de formación de agregados de partículas (el crecimiento del modo tangencial respecto a la temperatura granular), pero desconocemos el estado final que atrae al sistema. Por otro lado, la existencia de un estado estacionario inhomogéneo transversalmente, ha sido establecido para sistemas vibrados, pero se desconoce el mecanismo detallado responsable del desarrollo de inestabilidades a partir del estado de referencia.

## 6.5 Conclusión

En este capítulo, se ha llevado a cabo un análisis detallado de la ruptura transversal de simetría predicha por Livne y colaboradores [122] que se produce en un medio granular vibrado. Se ha puesto de manifiesto la existencia de la transición en simulaciones microscópicas del sistema, tanto mediante un algoritmo de Dinámica Molecular, como con el Método Directo de Monte Carlo. Los resultados de ambos métodos muestran un acuerdo razonable con las predicciones teóricas que se derivan de un análisis de estabilidad marginal de la descripción hidrodinámica del sistema. Esto se refiere tanto a los valores del parámetro de asimetría crítico como función del parámetro de control, como a la forma de los perfiles hidrodinámicos en las cercanías de la ruptura de simetría. Se ha encontrado un parámetro de orden que cuantifica la formación de inhomogeneidades transversales para caracterizar la transición. En términos de este parámetro, la transición presenta las características de una transición de no equilibrio de segundo orden. En este contexto, merece la pena señalar que no se han encontrado bifurcaciones subcríticas en las simulaciones.



Comprobamos una vez más la generalidad de los fenómenos de ruptura de simetría en los fluidos granulares. Ocurren tanto en medios aislados así como en medios vibrados, en situaciones diluidos y densas, con o sin campo gravitatorio actuando sobre las partículas; aparecen, en definitiva, de forma ubicua. Es interesante el hecho de que todo parece indicar que su aparición tiene un origen colectivo, que puede ser totalmente capturado por una descripción hidrodinámica.

# Capítulo 7

## Conclusiones

A continuación vamos a resumir algunos de los aspectos y conclusiones más relevantes de esta memoria:

- Desde una perspectiva general, se ha puesto de manifiesto la utilidad de la Hidrodinámica para describir el comportamiento de los flujos granulares, y de la Teoría Cinética para obtener la forma de las ecuaciones hidrodinámicas.
- Los desarrollos teóricos se han completado en todos los casos con simulaciones numéricas tanto de las ecuaciones cinéticas, como de sistemas de discos duros mediante Dinámica Molecular. Ello ha exigido la puesta a punto de algoritmos específicos que tengan en cuenta el carácter inelástico de las colisiones y la presencia de inestabilidades en estos sistemas.
- Como primer ejemplo se ha analizado el movimiento de una partícula en el seno de un gas granular que se encuentra en el estado de enfriamiento homogéneo. Más concretamente, se han estudiado dos casos límite: que la partícula sea idéntica a las del fluido (autodifusión) y que la partícula tenga una masa mucho mayor que la de las del fluido (movimiento browniano). En ambos casos se han obtenido ecuaciones de transporte que generalizan las de los medios moleculares.
- Las simulaciones numéricas han confirmado el comportamiento predicho por el análisis teórico, encontrándose un acuerdo excelente entre teoría y simulación para los coeficientes de transporte. Es de destacar que lo anterior es cierto incluso para sistemas muy inelásticos, contrariamente a lo que habían defendido algunos autores.
- A continuación hemos abordado el estudio de un sistema cerrado que se mantiene fluidizado mediante el aporte de energía a través de una

pared vibrante, que es el método más usual en los experimentos. Más concretamente nos hemos centrado en la aparición de ruptura espontánea de simetría.

- Si el recinto que contiene el gas está dividido en dos compartimentos mediante una pared central que empieza a una cierta altura, se observa que a partir del valor crítico del parámetro característico se produce una ruptura espontánea de simetría, de manera que las partículas tienden a agruparse en uno de los compartimentos. El parámetro característico depende de la inelasticidad del sistema y del número de monocapas de granos en reposo.
- El fenómeno anterior se describe perfectamente mediante las ecuaciones hidrodinámicas, que en particular predicen el compartimiento correcto, en el sentido de acorde con la simulación, de la asimetría en función del parámetro de orden. Hay que señalar que lo anterior se refiere también a los perfiles de las distintas magnitudes hidrodinámicas en las proximidades de la transición.
- Otra ruptura espontánea de simetría se produce en un sistema vibrado ahora sin pared divisoria, con tal de que sea suficientemente ancho. El estudio teórico de esta inestabilidad lo hemos realizado mediante un análisis marginal utilizando una aproximación WKB, dada la complejidad de las ecuaciones. Uno de los resultados de este análisis es evidentemente la identificación del parámetro de orden que gobierna la inestabilidad así como el correspondiente diagrama de bifurcación. Nuevamente se ha encontrado un acuerdo satisfactorio entre la predicción teórica y los resultados obtenidos por simulación de Dinámica Molecular.
- La ruptura espontánea de simetría aparece como algo intrínseco a los fluidos granulares, ocurriendo en medios aislados y vibrados, densos y diluidos, con y sin campo externo. Además, tiene un origen colectivo que es íntegramente capturado por la descripción hidrodinámica.
- Las dos rupturas espontáneas de simetría consideradas, con tabique y sin tabique, son susceptibles de observación experimental. De hecho, nos consta que diversos laboratorios están en la actualidad llevando a cabo los correspondientes experimentos.

## Apéndice A

# Descripción de los algoritmos de simulación empleados

Cuando se van a cumplir 50 años desde que la primera simulación mediante ordenador de un líquido se pusiera en marcha en "Los Alamos National Laboratoires" [89], se puede afirmar de manera tajante que el campo de la simulación mediante ordenador de sistemas físicos se encuentra en su mejor momento. Ello no sólo por el aumento creciente de técnicas, algoritmos y por el desarrollo tecnológico, sino también por la enorme variedad de problemas, en todos los campos de la física moderna, que se pueden abordar de manera óptima con la inestimable ayuda de los denominados "experimentos de ordenador".

El trabajo pionero de Metropolis sentó las bases del moderno método de simulación de Monte Carlo, que se ha convertido en una herramienta muy popular entre físicos y matemáticos. Pero no es éste el único método de simulación. Si se está interesado en describir la dinámica completa del sistema, es necesario emplear otra técnica diferente: la simulación de Dinámica Molecular es el término empleado para englobar el conjunto de técnicas en las que se realiza una integración directa, más o menos exacta, de las ecuaciones de movimiento del sistema. Al igual que las técnicas de Monte Carlo, la simulación de Dinámica Molecular surge para estudiar sistemas de discos o esferas duras [130, 131] pero pronto, en un intento de reproducir el comportamiento de líquidos y gases, son aplicados a potenciales continuos más realistas. Existe gran cantidad de literatura dedicada a la simulación de sistemas moleculares. En los últimos años, sin embargo, ha resurgido el interés por la Dinámica Molecular aplicada a potenciales discontinuos de la mano del estudio y modelado de medios granulares [19, 132]. El espectro de problemas abordados es amplio y variado: estudios estáticos del ángulo de reposo de un montón de arena, de avalanchas o de un medio granular vibrado, de segregación por tamaño, del

flujo a través de tolvas, de medios granulares fluidizados...

## A.1 ¿Por qué simulamos mediante ordenador?

"Una de las grandes dificultades a las que se enfrenta cualquier teórico de hoy en día que pretenda describir sistemas físicos o químicos es el inadecuado aparato matemático a su disposición para resolver problemas que involucran muchos cuerpos. Por lo tanto, aunque las propiedades de una molécula aislada estén bien establecidas y los procesos elementales que ocurren cuando dos de éstas interactúan están descritos por leyes bien conocidas, el comportamiento de sistemas de muchas moléculas que interactúan no puede en general ser resuelto de manera analítica. Incluso el problema de tres partículas que interactúan presenta dificultades insalvables. Dado, sin embargo, que estas dificultades son matemáticas, y no conceptuales, los ordenadores han de ser el instrumento adecuado para abordarlas."

Con estas palabras, comenzaban Alder y Wainwright [130] la presentación de sus trabajos de resolución de la dinámica de sistemas de discos duros, con los que sentarían las bases del posteriormente denominado método de Dinámica Molecular. La gran mayoría de los problemas a los que la Mecánica Estadística puede hacer frente no son solubles de manera exacta. De hecho, el número de problemas no triviales que son susceptibles de una solución exacta es muy reducido. Por eso la herramienta más común para el físico estadístico a la hora de enfrentarse a un problema es la realización de un modelo que pueda resolverse pero que, a la vez, conserve las características esenciales del sistema real. Mediante simulación numérica es posible obtener resultados exactos de estos modelos y compararlos con los obtenidos en los experimentos. Así se consigue un conocimiento completo de la aproximación y de su alcance, y se puede avanzar en la consecución de idealizaciones más cercanas al problema real. En particular, los métodos de simulación permiten discriminar entre aproximaciones a la realidad bien fundadas (es decir, "buenas" aproximaciones) y otras que, si bien plausibles a priori, no van mucho más allá. Si el modelo es suficientemente bueno, el simulador se encontrará en disposición de ayudar al físico experimental tanto en la realización de nuevas pruebas más esclarecedoras como en la interpretación de los nuevos datos.

De esta posición intermedia entre los resultados de la experiencia y los modelos sobre ella, surge la denominación de "experimentos de ordenador" con la que a veces se tratan los resultados obtenidos mediante simulación, cuyo interés va más allá del meramente académico: ofrecen un camino directo desde

el detalle microscópico del sistema (masas de los átomos, interacciones entre ellos, ...) a las propiedades macroscópicas de interés experimental (ecuación de estado, coeficientes de transporte, ...).

## A.2 Dinámica Molecular de esferas duras

Ya en su artículo de 1959, Alder y Wainwright presentaban explícitamente el primer algoritmo de simulación de Dinámica Molecular de esferas duras. Y aunque la mayoría de sus publicaciones se centran en el estudio de sistemas en equilibrio, adelantan desde un principio la validez de su método para el estudio de fenómenos de transporte y de la evolución temporal del sistema. También se percataron de las grandes limitaciones del método; esencialmente, de la limitación al estudio de un número reducido de partículas, acotado por la capacidad de cálculo y la memoria que pudiese ofrecer el ordenador. Se estableció que la diferencia entre los resultados de sus simulaciones de  $N$  moléculas y los valores de un sistema infinito es del orden de  $\mathcal{O}(1/N)$  [133]. Desde un principio se planteó, para disminuir estos efectos indeseables, el uso de sistemas bidimensionales. Estos, en la mayoría de los problemas, presentan un comportamiento similar a los sistemas tridimensionales y ofrecen la ventaja de que, para un sistema con el mismo número de moléculas, manifiestan una dependencia mucho menor de las condiciones de contorno (dado que el número de moléculas en las cercanías del borde del sistema es evidentemente menor en los sistemas bidimensionales). Las condiciones de contorno a imponer dependerán, como es natural, del sistema que se simule. En el caso de sistemas macroscópicos moleculares, parece óptimo emplear condiciones periódicas de contorno. Estas son las condiciones naturales si se trata de sistemas condensados o sólidos en los que la estructura es periódica. Además, en sistemas de muy baja densidad, causan el mínimo error en las medidas de propiedades de equilibrio. Si se comparan resultados obtenidos empleando diferentes condiciones de contorno en la simulación, se puede observar una tendencia general cualitativa idéntica. La dependencia de los resultados de la condición de contorno empleada empieza a ser despreciable, como en de esperar, a medida que lo es la fracción de partículas cerca del contorno.

El algoritmo descrito por Alder y Wainwright se ha venido empleando hasta nuestros días básicamente sin alteración. Aunque ha habido intentos por desarrollar nuevos métodos de Dinámica Molecular [134] o métodos combinados de Dinámica Molecular y Monte Carlo [135], ninguno se ha revelado útil frente, por un lado, a la simplicidad del algoritmo original y, por otro, a su exactitud. Desde luego, los sistemas susceptibles de ser estudiados han pasado de unos cuantos centenares de partículas a finales de la década de los cincuenta, al millón de partículas [65] en la década de los 90. Y a este relevante aumento

de la capacidad de cálculo no sólo han contribuido el rápido desarrollo de la tecnología. También se han introducido mejoras en el algoritmo.

Las simulaciones que se han llevado a cabo en esta memoria se basan en modelos de discos duros. Nos centraremos a partir de ahora, por ello, en la descripción de algoritmos de simulación de tales sistemas. El método descrito por Alder es, desde luego, el primero de todos ellos. La naturaleza discontinua de la interacción entre las partículas de un gas de discos duros hace inadecuado el uso de métodos continuos de integración de la trayectoria dinámica, en los que las ecuaciones de movimiento del sistema se van resolviendo tomando un paso fijo de tiempo  $\Delta t$ . En el caso de tratar con cuerpos duros, lo más apropiado es hacer uso de un algoritmo dirigido por colisiones. Con este nombre queremos resaltar el hecho de que vamos a ir calculando el estado del sistema colisión a colisión, siendo el movimiento entre dos colisiones sucesivas en el sistema un desplazamiento libre de todas las partículas del fluido.

La mayor parte del tiempo de cálculo de simulación de un sistema de  $N$  discos duros, se emplea en la búsqueda, entre los  $N - 1$  vecinos de una partícula dada, de su próxima pareja de colisión. Es de esperar que todas las estrategias que intenten acelerar el proceso se centren en agilizar esta parte del cálculo. La estrategia típica para acelerar la simulación de sistemas de discos o esferas duras consiste en crear una lista de vecinos [136]. Es decir, a cada una de las partículas se le asocia un vector que contiene las partículas más próximas a ella (incluidas dentro de un radio de corte). Cuando el algoritmo busque las posibles moléculas que interaccionarán con una dada, no tendrá que comprobar las  $N - 1$  moléculas restantes del sistema, sino que tan sólo deberá repasar las componentes de la lista de vecinos. El simulador debe jugar, naturalmente, con el radio de corte (con el tamaño de la lista) y la frecuencia con que ésta se renueva, hasta alcanzar un compromiso entre exactitud y rapidez del algoritmo (ver Figura A.1). En simulaciones de sistemas muy diluidos, en los cuáles el radio de corte efectivo es muy grande y haciendo uso de un algoritmo básico [137], puede no resultar una ventaja el uso de una lista de vecinos. Para conseguir que el algoritmo continúe reflejando la dinámica exacta del sistema, la lista de vecinos debe de ser muy amplia. Y una lista de vecinos muy grande, a no ser que se utilice una estrategia de puntero adecuada (como la descrita más adelante en este apéndice), además de no representar grandes ventajas en el cálculo, carga innecesariamente la memoria de la máquina. Este tipo de estrategia, por contra, se muestra tremendamente útil en sistemas lo suficientemente densos. Una variante de esta estrategia, válida para un sistema con mayor número de moléculas, consiste en dividir la celda unidad, en la que se encuentran las  $N$  partículas a simular, en  $M$  subceldas. Así, a la hora de calcular las futuras interacciones de una partícula con el resto del sistema, sólo se inspeccionarán las celdas vecinas.

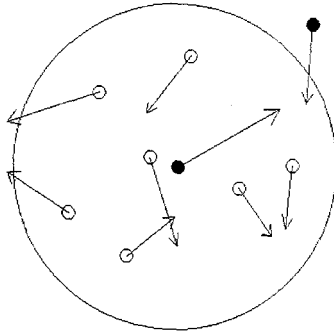


Figura A.1: Importancia de la elección del radio de corte; al buscar las próximas colisiones tan sólo dentro del entorno más próximo, se desprecian posibles colisiones. Las partículas marcadas deberían sufrir una colisión que no será detectada. El tamaño de la lista de vecinos debe ser el resultado de un compromiso entre la exactitud de la dinámica reproducida y la economía de cálculo.

El método de Alder y Wainwright llega a la década de los noventa optimizado y ofreciendo simulaciones de sistemas de muchas partículas en tiempos razonables. Con el algoritmo conducido por colisiones que presentan Allen y Tildesley [137] hemos llevado a cabo numerosas simulaciones de sistemas que abarcan un amplio espectro de densidades y números de partículas. Hemos estudiado con la ayuda de este algoritmo, en particular, el problema de la autodifusión y el de la partícula browniana granular. Por ello vamos a dedicar parte de este Apéndice a explicar detalladamente el algoritmo empleado: sus ventajas y los inconvenientes encontrados durante el tiempo en que hemos trabajado con él.

No queda aún dicho sin embargo todo lo que debíamos respecto a la simulación de discos (esferas) duros. El creciente interés de los simuladores por este tipo de sistema ha alentado la aparición de nuevos métodos de simulación que intentan acelerar el proceso, ya que acelerar la simulación implica poder estudiar sistemas con más partículas, más próximos por lo tanto a los reales. Esto es particularmente interesante cuando se estudian medios granulares, ya que el orden de magnitud del número de elementos en un medio tal es mucho menor que el número típico de moléculas en un gas. Vamos a terminar



introduciendo un algoritmo innovador con el que se consiguen mejoras de los tiempos de cálculo [69] que llegan a ser de un orden de magnitud menor y que ya había sido aplicado con éxito al estudio de los medios granulares [138]. Terminaremos este capítulo explicando en detalle la implementación del tal algoritmo y comparando resultados con el tradicional, que pasamos ahora a describir.

## A.3 Algoritmo de Allen-Tiendesley

Pretendemos diseñar un algoritmo que calcule la evolución de un gas bidimensional de discos duros que interaccionan sólo a través de colisiones que son binarias e instantáneas. Esta simplificación en la interacción es justificable en un gas muy poco denso y con una precisión infinita de cálculo. La experiencia nos muestra que son dos hipótesis perfectamente asumibles en nuestras simulaciones. Si, a lo largo de ella, ocurriese un suceso en el que tres partículas coincidieran en un instante dado, las dos colisiones se producirían una tras otra. Esto introduciría un suceso erróneo en la dinámica del sistema, ya que las velocidades resultantes tras la colisión no serían las de la colisión triple. La experiencia nos ha demostrado que la frecuencia de estos sucesos es tan baja que su efecto es completamente despreciable en la historia del sistema.

Las leyes de colisión pueden ser elásticas o inelásticas, lisas o rugosas, ... Según sean unas u otras, habremos de añadir los parámetros apropiados a los ya de por sí necesarios para la simulación: número y diámetro de las partículas, número de colisiones totales (o tiempo máximo), número de colisiones iniciales que se consideren necesarias para alcanzar la condición inicial. Se ha empleado el convenio de imagen próxima (condiciones periódicas de contorno) de forma que nuestro sistema es infinito, pero repetición en ambas direcciones del espacio de la celda unidad, en las que se encuentran las  $N$  partículas cuya dinámica se va a simular (ver Figura A.2). La celda unidad es un rectángulo de área unidad.

### A.3.1 Operaciones básicas

El objetivo esencial de este método de simulación es determinar la sucesión de colisiones, es decir: los sucesivos pares que colisionan, los tiempos de colisión y los nuevos parámetros dinámicos tras la colisión. Todo ello en orden cronológico, según el siguiente esquema:

1. Localizar la próxima colisión.

2. Mover todas las partículas hasta ese instante.
3. Efectuar la colisión.
4. Cálculo de las propiedades de interés.

### Cálculo de los tiempos de colisión

Esta es la parte de la simulación que requiere más tiempo de cálculo. En principio, todas las posibles colisiones entre los distintos pares deben tenerse en cuenta. Para que dos partículas  $i$  y  $j$  de diámetro  $\sigma$  que en el instante  $t$  se encuentran en las posiciones  $\vec{r}_i$  y  $\vec{r}_j$  con velocidades respectivas  $\vec{v}_i$  y  $\vec{v}_j$  (velocidad relativa  $\vec{g}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$ ), colisionen en el instante  $t + t_{ij}$  deben, desde luego, estar en contacto para entonces. Esto se expresa con la siguiente condición sobre sus posiciones relativas ( $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ ) en el instante inicial  $t$  y posterior  $t + t_{ij}$

$$|\vec{r}_{ij}(t + t_{ij})| = |\vec{r}_{ij}(t) + \vec{g}_{ij}t_{ij}| = \sigma. \quad (\text{A.1})$$

Si definimos el escalar  $b_{ij} = \vec{r}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij}$ , la ecuación anterior se puede expresar como una forma cuadrática del tiempo que ha de transcurrir hasta que se produzca una nueva colisión en el sistema (que llamaremos tiempo de colisión,  $t_{ij}$ )

$$g_{ij}^2 t_{ij}^2 + 2b_{ij}t_{ij} + r_{ij}^2 - \sigma^2 = 0. \quad (\text{A.2})$$

El producto  $b_{ij}$  no sólo ha sido definido para simplificar la expresión. Observemos que su uso nos permite discriminar los pares de partículas que se alejan entre sí ( $b_{ij} > 0$ ) de los que se aproximan. Un análisis más fino, nos desvela que aún para los pares de partículas aproximándose entre sí, para los que  $b_{ij} < 0$ , si además,  $b_{ij}^2 - g_{ij}^2(r_{ij}^2 - \sigma^2) < 0$  entonces, no existe colisión. En el caso contrario, obtendremos el tiempo de colisión, como solución de la ecuación anterior

$$t_{ij} = \frac{-b_{ij} - \sqrt{b_{ij}^2 - g_{ij}^2(r_{ij}^2 - \sigma^2)}}{g_{ij}^2}. \quad (\text{A.3})$$

El procedimiento seguido en el programa ha sido asignar inicialmente a cada partícula del sistema el tiempo de colisión mínimo, de todas sus colisiones en principio posibles, con el resto de las partículas. Estos tiempos han sido guardados en un vector COLTIM. Obsérvese que éste es un vector de dimensión  $N$ , el número de partículas en la celda unidad. También se ha guardado en un vector la pareja con la que, de no existir interferencias, va a colisionar cada partícula del sistema (PARTNR). Así, buscando el menor de los COLTIM sabremos qué partícula es la primera en colisionar y cuándo lo hace. Además,

de PARTNR, obtenemos la pareja que colisiona. Conocido esto dejamos evolucionar al sistema completo libremente un tiempo  $t_{ij}$  (sabemos que en ese tiempo no hay colisiones en el sistema). Y una vez transcurrido, tendremos a la pareja que colisiona en contacto, de modo que pasamos a aplicar las leyes de colisión cambiando convenientemente sus velocidades.

### Colisión inelástica

Aplicamos la dinámica a las partículas que chocan. Es evidente que en la colisión sólo cambian las velocidades del par que interacciona. Notemos con primas ( $\vec{v}'_i, \vec{v}'_j$ ) las velocidades después de la colisión y sin primas las velocidades antes ( $\vec{v}_i, \vec{v}_j$ ). Parametrizamos la inelasticidad en el gas con un coeficiente de restitución normal ( $\alpha$ ) según:

$$\vec{g}'_{ij} \cdot \hat{\sigma}_{ij} = -\alpha \vec{g}_{ij} \cdot \hat{\sigma}_{ij}, \quad (\text{A.4})$$

siendo  $\hat{\sigma}_{ij}$  el unitario que une los centros de ambos discos y  $g_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$  la velocidad relativa del par. Como el momento lineal permanece constante en la colisión, el cambio en las velocidades es:

$$\begin{aligned} \vec{v}'_i &= \vec{v}_i - \frac{1+\alpha}{2} (\vec{g}_{ij} \cdot \hat{\sigma}_{ij}) \hat{\sigma}_{ij}, \\ \vec{v}'_j &= \vec{v}_j + \frac{1+\alpha}{2} (\vec{g}_{ij} \cdot \hat{\sigma}_{ij}) \hat{\sigma}_{ij}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

La discusión para la obtención de esta regla de colisión ha sido hecha en otra parte de esta memoria, ver Apéndice B.

### Nuevos tiempos de colisión

Observemos que al producirse la colisión y cambiar el estado de la pareja, la lista de tiempos de colisión con la que se cuenta deja de ser válida. No es necesario, sin embargo, proceder a recomponer una lista COLTIM completa. De hecho, basta con calcular los nuevos tiempos de colisión de las partículas que acaban de colisionar y, de entre todas las restantes, sólo las que tenían prevista una colisión con alguna de las partículas del par que acaba de colisionar.

Una vez renovada la lista COLTIM, se procede a buscar el nuevo tiempo de colisión (el mínimo de los COLTIM), desplazar las partículas, efectuar la colisión, ... y así sucesivamente.

## Medidas

Como en todo momento las posiciones y velocidades de todas las partículas del sistema quedan almacenadas en memoria, podemos hacer las medidas deseadas en cualquier instante de la simulación.

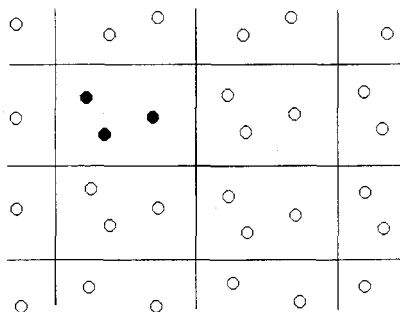


Figura A.2: La celda unidad (partículas en negro) se halla rodeada por infinitas réplicas de ella misma en ambas direcciones del espacio, constituyéndose así un sistema infinito.

### A.3.2 Condiciones de contorno

Para simular un gas libre granular fluidizado es habitual hacer uso de las condiciones periódicas de contorno. Estas implican que el sistema (la celda unidad) se repite en ambas direcciones del espacio indefinidamente, ver Figura A.2. Al abandonar un elemento la celda unidad por el borde  $y = L$ , vuelve a entrar en la celda unidad por el borde  $y = 0$  y con idéntica velocidad.

En algunas simulaciones hemos considerado un sistema encerrado por paredes. Ello implica definir la interacción de los elementos del sistema con la pared. Generalmente, por simplicidad, nos hemos limitado a considerar un choque elástico contra las paredes. En el caso de medios vibrados, la idealización consiste en considerar la pared vibrante con una amplitud de vibración ( $A$ ) muy pequeña comparada con el recorrido libre medio de las partículas, de modo que en lo que respecta a las partículas del gas, ésta parezca inmóvil. El parámetro que caracteriza a la pared en esta idealización es su velocidad  $v_b$ . La ley de colisión de la partícula con la pared vibrante es entonces:

$$v'_y = 2v_b - v_y, \quad (\text{A.6})$$

siendo  $v_y$  y  $v'_y$  la componente de la velocidad de la partícula en la dirección perpendicular a la pared antes y después de la colisión, respectivamente. La otra componente permanece inalterada en el proceso.

### A.3.3 Limitación del algoritmo en el caso de muy pocas partículas.

El algoritmo conducido por colisiones que acabamos de describir presenta algunos problemas cuando la densidad es muy baja. Supongamos por sencillez el caso en que tan solo dos partículas constituyen el sistema, dirigiéndose una contra la otra de forma que, en el caso de que se consideren condiciones periódicas de contorno, lo que tendríamos sería lo representado en la Figura A.3. Según el algoritmo expuesto, al llegar a la situación B, de la que se debe

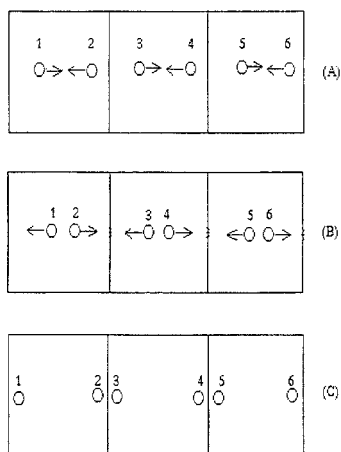


Figura A.3: Presentamos una configuración que es tratada erróneamente por el algoritmo. Las imágenes se suceden en el orden A, B, C. Los detalles se dan en el texto.

deducir una colisión entre las partículas 2 y 3, no se considera la bola 2, sino su imagen más próxima a 3 que sigue siendo 4. Lamentablemente esta bola se aleja de 3, por lo que difícilmente puede colisionar con ella. El algoritmo nos

devolverá, por lo tanto, un mensaje en el que indicará que no encuentra una nueva colisión en el sistema.

Este error se produce siempre que la densidad de esferas en la celda unidad sea tan extremadamente pequeña que, tras haber sido evaluada la colisión entre dos partículas, la próxima colisión en el sistema se vuelva a producir con alguna imagen de la partícula con la que acaba de interactuar. La probabilidad de que esto ocurra disminuye trivialmente al aumentar el número de partículas en el sistema o su diámetro. Obsérvese que este inconveniente no surgiría si integrásemos la dinámica del sistema con un paso de tiempo fijo (mucho más pequeño que el tiempo medio entre colisiones de las partículas en el sistema). De modo que estamos ante un efecto debido a que tratamos con un algoritmo conducido por colisiones. Una forma trivial de solucionar este inconveniente sería la siguiente. Calculamos la mayor distancia relativa entre dos discos. Seguidamente suponemos que esas dos partículas se están separando y se calcula cuánto tardarían en estas separadas una distancia  $L$  (longitud de la celda unidad). Con este tiempo se dejan evolucionar las partículas y se calcula de nuevo la próxima colisión. Si aplicamos este proceso cada vez que no encontremos más colisiones en el sistema, volviendo a la figura, sería como saltarnos la configuración "B" y pasar directamente de la "A" hasta la "C". Una solución más económica y sencilla sería considerar el traspaso de la frontera como una colisión contra un objeto, en este caso la frontera de la celda unidad. Pero dejaremos para la siguiente sección la discusión de los detalles de esta opción.

En las simulaciones del gas granular libre, no consideramos el uso de este o ningún otro método parecido cuando el número de partículas es superior a unas decenas, ya que en ese caso la probabilidad de que no se produzca ningún choque en el sistema es, en la práctica, nula, como hemos podido comprobar en nuestra experiencia. En realidad la aparición de un error como éste no deja de ser un hecho anecdótico, que sí hay que tener en cuenta si se está interesado en estudiar la evolución de unas cuántas partículas, pero que pasa totalmente inadvertido en todos los sistemas que hemos estudiado, máxime cuando estamos en un orden de parámetros del sistema en el que las condiciones periódicas de contorno no deben afectar a la dinámica del sistema.

## A.4 Algoritmo de Lubachevsky

Es de esperar que la simulación *standard* de Dinámica Molecular de discos duros, presentada en las páginas anteriores, se muestre profundamente ineficaz para un número muy grande moléculas. En cada paso del algoritmo, prácticamente el total de las partículas del sistema son consideradas en la elec-

ción de futuras colisiones. Podría pensarse en la construcción de una lista de vecinos, como ya hemos indicado, si la densidad del sistema es lo suficientemente alta. En cualquier caso, una estrategia encaminada a la reducción del tiempo de cálculo debe atacar en primer lugar este punto del algoritmo, ya que es el que más tiempo cuesta. Pasamos a exponer un innovador algoritmo de simulación de sistemas balísticos, entre los que se encuentran los discos duros [69]. La idea básica de la que se parte es la de posponer el examen y evaluación del estado de cada partícula del sistema hasta que sea forzosamente necesario, es decir, hasta el momento de una colisión que la involucre. Se hace uso para ello de una doble estructura de datos de forma que se almacenan dos estados físicos sucesivos. El estado de cada partícula se define por la posición, velocidad y el instante de tiempo en el que se encuentra. Obsérvese que el estado global del sistema no se conoce más que al comienzo de la simulación. En el transcurso de ésta, habrá que avanzar las partículas convenientemente si se quiere conocer el estado del sistema en un instante determinado.

Por otro lado, la celda unidad se divide en múltiples subceldas lo cual reduce el número de vecinos de una partícula dada a considerar a la hora de buscar nuevas colisiones de tal partícula. El reticulado se construye de forma que el coste de memoria sea mínimo, evitando así los inconvenientes antes enunciados. Además, al contrario que en el caso de las listas de vecinos ya descritas, no se pierde la exactitud del método, porque se tendrá en cuenta que a lo largo de su historia, la partícula no sufre tan sólo colisiones en el sentido que hemos tratado hasta ahora. Denominaremos "suceso" a una colisión, pero también a un cruce de cualquiera de las fronteras entre dos subceldas. A estos cruces, los llamaremos también colisión contra un obstáculo, siendo el obstáculo, precisamente, la frontera. Distinguiremos, por lo tanto, entre sucesos mono-particulares (cambios de subceldas, colisiones con un obstáculo) y sucesos que involucran dos partículas (colisiones entre partículas). Entrando en más detalle, tendremos tres clases de sucesos: colisiones, cruce de una subcelda y abandono de la celda unidad. Obsérvese que este último suceso es ciertamente distinto en general al cambio de una subcelda a otra, puesto que implica tener en cuenta las condiciones de contorno. Analicemos detenidamente la exactitud de la sectorización en este caso.

Supongamos que tenemos una partícula que llamaremos "A" en el centro de la celda unidad, Figura A.4. Queremos calcular sus colisiones inmediatas, para lo cual comenzamos a examinar las posibles interacciones de "A" con el resto de partículas en su misma celda. Supongamos el peor de los casos, en el que "A" no encuentra ninguna partícula en su misma celda con la que colisionar. Entonces, su próximo suceso será cruzar la pared de su subcelda e introducirse en la siguiente. Allí sí encontramos una partícula "B" con la que "A" colisiona. Si el choque se produce lejos de la frontera entre subceldas, no habrá ningún problema: El algoritmo avanza "A" hasta la frontera y una vez

allí detecta una colisión con "B" en un tiempo posterior. Si el encuentro se produce, sin embargo, justo en la frontera (dentro de la precisión del ordenador), cuando el algoritmo avance "A" hasta la frontera y quiera calcular su siguiente suceso, se encontrará que "A" y "B" están en condiciones de colisionar, de modo que establecerá como próximo suceso, la colisión entre "A" y "B", que es un suceso anterior al traspaso de la pared. Si el algoritmo busca

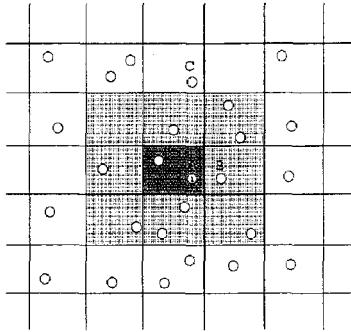


Figura A.4: La celda unidad se divide en diferentes subceldas mediante un red cuadrada. Esto permite reducir la búsqueda, a la hora de seleccionar una nueva pareja de colisión para  $i$ , a su propia celda y a las que la bordean, zonas que aparecen con diferentes sombreados en el dibujo.

el próximo suceso para "A" sólo en la subcelda que contiene a ésta, asignará un suceso incorrecto. Pero si incluye en su búsqueda también las 8 subceldas vecinas, lo hará correctamente. Ahora nótese que ninguna partícula "C" que se encuentre fuera del entorno de las ocho celdas que rodean a 5, podrá colisionar con "A" sin que se produzca antes un suceso de cruce de frontera. Se muestra así, a nuestro parecer, uno de los aspectos más interesantes del método, ya que el mallado hecho no rompe la exactitud de la integración de la dinámica del sistema y reduce el cálculo de posibles colisiones de una partícula dada a sus compañeras presentes en la misma celda en la que se encuentra la partícula y a las ocho celdas que la rodean. El número de éstas, además, puede reducirse tanto como se quiera. De hecho, hemos considerado un reticulado de la celda



unidad en nuestras simulaciones tal que el número medio de partículas por subcelda sea del orden de la unidad.

Las futuras colisiones que experimente una partícula son calculadas tan sólo a partir de los estados existentes de las otras partículas, sin entrar a considerar posibles estados futuros. Además, los candidatos para la siguiente colisión de una molécula en particular son descartados cuando se encuentra uno mejor, de forma similar a como se hace en el algoritmo de Allen y Tjeldesley. Una gran diferencia con éste es, sin embargo, que sólo se avanza en el tiempo el estado de las partículas que colisionan. Esta es la razón por la cual, en un momento dado de la simulación, nos encontremos cada uno de los discos de la celda unidad en un estado propio que corresponde, en general, a un instante de tiempo diferente al resto de las partículas. De hecho, como hemos dicho, el estado global del sistema solo se conoce explícitamente en el instante inicial de la simulación. Es sencillo sin embargo calcular, siempre que se desee, el estado del sistema completo sin más que desplazar balísticamente las partículas desde su posición en el tiempo en que se encuentran al tiempo de simulación. Obsérvese que tenemos asegurado que en ese desplazamiento no han de sufrir ninguna colisión intermedia. En la mayoría de los casos, el algoritmo procesa solo sucesos que son inevitables. La fracción de los superfluos es pequeña y, lo que es más importante, no aumenta con el número de partículas a simular, mientras que la rapidez que se gana gracias a la simplicidad es sustancial.

#### A.4.1 Organización de los datos

En una simulación típica de Dinámica Molecular de discos duros, el estado del sistema completo se caracteriza en un instante de la simulación con las posiciones y velocidades de cada una de las partículas que lo componen. Desde un punto de vista computacional, asociamos a cada partícula dos vectores, su posición y velocidad, que van cambiando en cada paso de la simulación (con el tiempo, por lo tanto). Obsérvese que el estado concreto de cada una de las partículas que componen el sistema cambia a la vez que cambian el resto de sus compañeras. Supongamos que además de la posición y velocidad de las partículas en el sistema, les asociamos el tiempo de la simulación. En el algoritmo de Allen-Tjeldesley ésto resulta innecesario, puesto que todas las partículas tendrán asociado el mismo tiempo; el tiempo en el que se encuentra la simulación. Pero esto no tiene que ser en general así. Veámoslo con un ejemplo simple: sean dos partículas,  $a$  y  $b$ , situadas en el instante inicial  $t = 0$  en los puntos  $x_0^a$  y  $x_0^b$  con velocidades  $v_0^a$  y  $v_0^b$ . Si usamos el algoritmo de Allen-Tjeldesley para resolver la evolución de este sistema de dos partículas, éste iría moviendo las partículas simultáneamente, colisión a colisión, de modo que en el instante  $t_1$  las partículas se encuentren en  $x_1^a$  y  $x_1^b$  con velocidades  $v_1^a$  y  $v_1^b$ . Obsérvese que el mismo resultado tendríamos si decidimos, por ejem-

plo, evolucionar primero la partícula  $a$  hasta el instante en que vaya a tener su próxima colisión. Este instante, por supuesto, es  $t_1$ . Entre tanto, la partícula  $b$  permanece en el instante  $t_0$ . Una vez  $a$  desplazada hasta  $x_1^a$ , nuestro algoritmo busca la colisión que va a tener  $a$ . Encontrará que  $a$  colisiona con  $b$ . Es el momento por lo tanto de “traer”  $b$  hasta el instante  $t_1$ , de forma que el algoritmo la deja evolucionar y aplica las reglas de colisión. Una vez hecho ésto, vuelve a evolucionar a una de las partículas (en realidad, nos da igual que sea  $a$  o  $b$ ) hasta la próxima colisión que vaya a sufrir y así sucesivamente. Es claro que en el ejemplo anterior, el uso de un algoritmo como el expuesto resulta artificioso e innecesario, pero veremos a continuación que existe una forma eficiente de emplear esta estrategia que justifica su uso. Vamos a describir en este punto cómo organizamos la información necesaria que requiere este algoritmo para desarrollar la dinámica del sistema.

Como hemos discutido, vamos a abandonar la idea del “estado del sistema” como algo global que conocemos en todo instante de la simulación. En su lugar, vamos a considerar el estado de las diferentes partículas que componen el sistema y su evolución independiente. A este respecto, el dato básico del algoritmo es el “suceso”. Cada partícula del sistema tiene asociada un suceso en todo instante de la simulación. Así, la partícula 1 va a cruzar una subcelda, la partícula 2 va a salir de la celda unidad, o la 5 va a chocar con la 3,... etc. En todo instante de la simulación, el algoritmo asocia a cada una de las partículas un suceso. Esto implica el cálculo del estado de la partícula en el instante del suceso, el momento en que se va a producir y qué tipo de suceso va a ser. Así, en el ejemplo mencionado anteriormente, el algoritmo asoció un suceso a  $a$  en el instante  $t_1$ , en la posición  $x_1^a$ , que consistía en chocar con  $b$ . Se resumen así las tres componentes con las que un suceso queda perfectamente determinado:

- El estado: la posición y velocidad de la partícula inmediatamente tras el suceso, (tras el choque en este caso o tras el cruce de una frontera ...). En el ejemplo, el estado de  $a$  es su posición  $x_1^a$  y su velocidad tras la colisión prevista con  $b$ .
- El tiempo que corresponde al estado, es decir, cuándo se va a producir este suceso. En el ejemplo anterior sería el tiempo  $t_1$ .
- La pareja de colisión. En el algoritmo que presentamos, se tratará de un número de 1 a  $N$ , si el suceso es un choque con cualquiera de las  $N$  partículas de la celda unidad, o algún otro valor finito si se trata de un cruce de frontera de subcelda. El valor asignado es infinito, si la partícula no tiene ningún compañero, de forma que el algoritmo sólo tiene que avanzar el estado de la partícula en cuestión hasta el tiempo apropiado.

Hemos mencionado que se va a hacer uso de una doble estructura de datos. Esto es así porque en cualquier instante de la simulación, el algoritmo asocia dos sucesos a cada componente del sistema. Uno antiguo, ya procesado, y uno nuevo que es el próximo suceso que ha de sufrir. Así, en todo instante de la simulación y para todas las partículas del sistema, se conoce dónde están en un instante determinado y con qué velocidad y dónde estarán, con qué velocidad y cuando tendrá su próxima colisión (o paso de frontera). Obsérvese que es necesario mantener esta doble estructura, puesto que habrá sin duda alguna, sucesos asignados a partículas que no lleguen a realizarse (por ejemplo, porque una colisión asignada no se llegue a producir, por cruzarse una tercera partícula posteriormente a la asignación del suceso). En ese caso, el sistema debe recuperar el suceso “antiguo” y asignar uno nuevo en las nuevas condiciones. Desde un punto de vista práctico, se usarán dos vectores complementarios  $old(1 \dots N)$  y  $new(1 \dots N)$  con elementos que pueden tomar sólo los valores 1 o 2, para etiquetar exactamente el estado antes y después de cada suceso:  $suceso(i, new(i))$  y  $suceso(i, old(i))$ , respectivamente. Obsérvese que la relación  $new(i) + old(i) = 3$  se mantiene invariante a lo largo de todo el proceso.

La información sobre el estado del sistema la recogemos en los vectores  $\vec{r}(1 \dots N, 2)$  para la posición,  $\vec{v}(1 \dots N, 2)$  para la velocidad,  $partner(1 \dots N, 2)$  que guarda el compañero de colisión o el obstáculo contra el que colisiona la partícula y  $time(1 \dots N, 2)$  que indica el tiempo al que corresponden los demás vectores.

## A.4.2 Operaciones básicas

Al ir reproduciendo la dinámica del sistema, el algoritmo repite constantemente ciertas operaciones que pueden ser agrupadas en diferentes grandes bloques a fin de darle cierta estructura. Así, hemos diferenciado el cálculo de los tiempos de colisión, la colisión en sí, el avance de las partículas y el cálculo del suceso más próximo. Pasemos a describir cada una de estas operaciones en detalle.

### Tiempos de interacción

Sean los estados  $estado_1$  de la partícula 1 en el instante  $t_1$  y  $estado_2$  de la partícula 2 que se encuentra en el instante  $t_2$ . Esta operación nos devolverá el tiempo en que la próxima interacción entre ambos se produce, ignorando el resto de componentes del sistema. En el caso de que ambas partículas no interaccionen, se devolverá una señal de tiempo infinito. Si es finito, lo

llamaremos  $t_{ij}$ , siendo *time* el tiempo de interacción de ambos componentes:

$$time = \max(t_1, t_2) + t_{ij} \quad (\text{A.7})$$

donde  $\max(t_1, t_2)$  es una función que devuelve el valor máximo entre sus argumentos, y

$$t_{ij} = \begin{cases} \frac{-b_{ij} - \sqrt{b_{ij}^2 - g_{ij}^2(r_{ij}^2 - \sigma^2)}}{g_{ij}^2} & \text{si } b_{ij} \leq 0 \text{ y } b_{ij}^2 - g_{ij}^2(r_{ij}^2 - \sigma^2) \geq 0, \\ +\infty & \text{si } b_{ij} > 0 \text{ y } b_{ij}^2 - g_{ij}^2(r_{ij}^2 - \sigma^2) < 0. \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Se habrá de tener en cuenta que para calcular este tiempo tendremos que conocer las posiciones de las partículas en el mismo instante de tiempo, antes de su colisión. Y para calcular la posición de la partícula en un instante dado de la simulación, a partir de los datos con los que contamos, tendremos que avanzar (ver la explicación de esta operación más adelante) una de las partículas desde su estado hasta el instante  $\max(t_1, t_2)$ . Queremos señalar además, que el tiempo de interacción que obtendremos está referido al instante  $\max(t_1, t_2)$ . No debemos confundirlo con el tiempo de la simulación. El tiempo de simulación se obtendrá al sumar sucesivamente los tiempos de interacción mínimos, que se calculan como se describe al final de esta sección.

A los tiempos de colisión entre dos partículas cualesquiera  $\{i, j\}$  así calculados los denominaremos  $T_{ij}$ . Obsérvese que para tomar en consideración una posible colisión de una partícula  $i$  con otra  $j$ , de la que ya hayamos calculado el tiempo  $T_{ij}$ , debe ocurrir que el  $time(j, new(j)) > T_{ij}$ , o sea, que la partícula  $j$  no tenga ya asignada una colisión en un instante anterior a la que pretendemos asignarle con  $i$ .

También se tienen que calcular los tiempos de colisión de una partícula con las fronteras de la celda que ocupa. A este tiempo lo denominaremos  $R$ . El tiempo de colisión de la partícula genérica  $i$ , es decir, el tiempo que va a transcurrir desde un suceso ya computado de  $i$  hasta el próximo será el mínimo entre  $T_{ij}$  y  $R$ . Este tiempo, el del instante en que  $i$  sufrirá su próximo suceso, será asignado al nuevo estado de  $i$ , a través de la variable  $time(i, new(i))$ . Mientras que la posición que  $i$  va a tener en nuestra simulación seguirá siendo  $\vec{r}(i, old(i))$  hasta el instante  $time(i, new(i))$ , en que, justo antes de suceder el suceso, la partícula sea avanzada.

## Colisión

Dados los estados  $estado_1$  y  $estado_2$  de dos partículas que van a interactuar, esta operación nos devolverá el nuevo estado de 1 y de 2 tras la colisión calculado mediante las leyes apropiadas.

## Avance

Desde el estado inicial  $estado_0$  de un componente en el instante  $tiempo_0$  y una instante de tiempo posterior  $tiempo_1 > tiempo_0$ , esta operación nos devuelve el  $estado_1$  del componente en el instante  $tiempo_1$ , ignorando posibles interacciones con otras componentes u obstáculos del sistema.

## Cálculo del tiempo mínimo de interacción

El algoritmo hace uso de esta operación para seleccionar, a partir de un instante dado, cuál es el próximo suceso en el sistema completo. Un método directo para encontrar el mínimo de los tiempos de colisión del conjunto total de los componentes del sistema,  $(time(i, new(i)), 1 < i < N)$ , requiere del orden de  $\mathcal{O}(N)$  operaciones por suceso. Es posible reducir este coste si se introduce una estructura jerarquizada de los tiempos en forma arbórea. El empleo de ésta se muestra una estrategia eficaz para acelerar el proceso de cálculo del mínimo de un conjunto de número dados. Para aplicarla harán falta dos vectores que serán usados como punteros y que llamaremos  $pht(1 : n)$  y  $pth(1 : n)$ . Uno es el inverso del otro, de modo que  $[pth(pht(m)) = m]$  y, explícitamente:

- $pht(m)$  es la partícula en la posición  $m$  del árbol.
- $pth(m)$  es la posición en el árbol de la partícula  $m$ .

Haciendo uso de esta construcción, si  $i_* = pht(1)$  (es decir,  $i$  es la partícula en la copa del árbol de los tiempos de colisión ordenados), el mínimo tiempo de colisión del sistema es, por lo tanto,  $time = time(i_*, new(i_*))$ . Obsérvese que siempre que uno de los valores de la tabla de tiempos cambie, la estructura jerarquizada de los tiempos debe ser actualizada convenientemente.

### A.4.3 Reticulado

Incluyendo la reiterada actualización periódica de la tabla de tiempos, el coste total en tiempo de cálculo para encontrar el siguiente suceso parece aumentar con el número de partículas involucradas como  $\mathcal{O}(\log N)$  por cada suceso. De hecho, la mayor dificultad en el método de minimización consiste en tener que calcular los  $N - 1$  tiempos de colisión con el resto de partículas o los  $k$  tiempos de colisión con algún obstáculo. Este proceso es, por tanto, de orden  $\mathcal{O}(N + k)$ . Trataremos de disminuirlo haciendo un mallado trivial de la celda unidad. Para cada subcelda, crearemos una lista (*list*) con las partículas que

están dentro de ella. Haremos uso, además, de dos vectores complementarios: un puntero ( $pl(i)$ ), que nos indicará el número de orden de la partícula  $i$  dentro de la lista correspondiente; y  $nc(list)$  que guarda el número de partículas que componen la lista  $list$ .

Al comienzo de la simulación, disponemos las partículas en las listas correspondientes. De igual forma, preparamos convenientemente los vectores  $pl(i)$  y  $nc(list)$ . A lo largo de la evolución del sistema, habrá partículas que abandonen la subcelda que ocupan, lo que coincidirá con un suceso mono-particular en el cual la partícula colisiona contra un obstáculo. Cuando esto ocurre los dos vectores,  $pl$  y  $nc$ , y la lista,  $list$ , son actualizados. Obsérvese que un cambio de celda puede ocurrir únicamente cuando se aplique un avance a una partícula.

Una vez que se pone en marcha este reticulado del sistema, el número de partículas  $j$  involucradas en el cálculo de  $T_{ij}$  (los tiempos de colisión con la partícula  $i$ , cuya estado se desea actualizar) se reduce a aquellas partículas que se encuentren en las ocho subceldas vecinas a la ocupada por  $i$ , según se muestra en la Figura A.4. Obsérvese de nuevo que el método sigue reproduciendo exactamente la dinámica del sistema, ya que para que una partícula fuera de este entorno pueda colisionar con  $i$ , tendrá que traspasar alguna de las barreras de las celdas que le rodean. Esto constituye un suceso que será considerado por el algoritmo en un instante anterior a la colisión de las partículas. Cuando eso ocurre, la partícula ya se encontrará en el entorno considerado y la colisión será perfectamente asignada en el momento preciso. En el caso de que tratemos sistemas de partículas extremadamente pequeñas comparadas con el tamaño de la celda unidad, podemos hacer la aproximación de que las partículas son puntuales. En esa aproximación basta con considerar, a la hora de calcular próximos sucesos, los bordes de la subcelda que ocupa la partícula en cuestión y el resto de partículas incluidas en la misma. Desde el punto de vista práctico, hemos podido comprobar que los errores así introducidos en la dinámica son despreciables para fracciones sólidas del orden de la milésima y una red fija de cien celdas. No obstante, al aumentar la densidad del sistema, la aproximación deja rápidamente de ser válida, por lo que no es recomendable.

### Uso de una estrategia con puntero

La organización de las subceldas explicadas anteriormente tiene como ventaja la sencillez a la hora de incluirla en el algoritmo. Por contra, requiere una gran cantidad de memoria y que el número de celdas del reticulado sea fijo. Existe una forma igualmente sencilla que permite realizar un mallado con un número de celdas variables, según la densidad del sistema y tan sólo con dos vectores de dimensión el número de partículas en el sistema. El hecho de

que el reticulado sea dependiente de la densidad del sistema, de forma que el número de celdas total sea tal que haya del orden de la unidad de partículas en cada subcelda, influye críticamente en la rapidez del algoritmo. En la Figura A.7 se muestra cómo varía la rapidez del algoritmo cuando se usa la siguiente estrategia. Definimos dos vectores, funciones del número de partículas en la celda unidad. Un vector es el vector *lista*. Su elemento  $lista(j)$  recoge una partícula que esté incluida en el instante  $t$  en la celda  $j$ . Supongamos  $k = lista(j) \neq 0$ . El otro vector, *pointer*, es tal que el elemento  $pointer(k)$  nos indica otra partícula que pertenece a la misma celda que  $k$ , es decir, la celda  $j$  en nuestro caso. Si  $pointer(k)$  es nulo, quiere decir que  $j$  tan sólo tiene como elemento la partícula  $k$ . Si  $lista(j) = 0$  es porque la celda  $j$  está vacía en el instante  $t$ . Así se engarzan las partículas que ocupan la misma celda y es posible realizar el mallado con un sustancial ahorro de memoria del ordenador. Además, se puede considerar un mallado variable para cada sistema, sin tener que redimensionar los vectores del mallado en cada simulación.

### Influencia del número de subceldas en la velocidad del algoritmo

Si disminuimos el número medio de partículas por celda, conseguimos acelerar el algoritmo, tal y como se observa en la Figura A.7, donde encontramos los resultados de la simulación con el algoritmo de Lubachevsky con un mallado de 9 partículas por celda y de 1 partícula por celda. Se puede observar que el segundo caso es más rápido aunque la pendiente de ambas rectas coincide y es menor que la pendiente del algoritmo con mallado fijo.

#### A.4.4 Colisiones triples

Análogamente a lo que ocurre con otros métodos de simulación de cuerpos duros conducidos por sucesos, el algoritmo presentado no admite la existencia de colisiones triples. Sí es posible la solución en un mismo instante de varios pares de partículas. Sin embargo, la coincidencia de tres partículas en un mismo punto dará lugar, no a una colisión ternaria en la que las partículas escapen unas de otras tras la colisión según las leyes para dichas colisiones, sino a una sucesión de dos colisiones binarias en el mismo punto. Ésta dependerá de la historia de la simulación, pudiéndose a veces suceder en un orden o en otro, dependiendo las velocidades resultantes tras la colisión críticamente del orden de choque (por lo tanto de la historia). En cualquier caso, son distintas a las resultantes de la colisión ternaria.

Como ya hemos apuntado anteriormente en este apéndice, en el caso de que tuviésemos una precisión infinita de cálculo, la probabilidad de una colisión triple instantánea sería prácticamente nula. En nuestras simulaciones podrán

producirse, en principio, aunque dadas las bajas densidades su influencia en la dinámica total del sistema es de esperar que sea despreciable. El mero hecho de poder contrastar nuestros resultados con los obtenidos de la ecuación de Boltzmann, que parte de la hipótesis de caos molecular, nos reafirma en el hecho de que las colisiones triples son perfectamente despreciables.

### A.4.5 Descripción del programa

Partimos de una configuración inicial de partículas y velocidades en la celda unidad. El primer paso es crear la lista de los componentes en cada subcelda (vectores *list*, *nc* y *pl* o *lista* y *pointer*). Se comprobará que no existe superposición inicial, devolviéndose un mensaje de error y deteniendo el programa en caso de que así sea. A partir de aquí, comienza una serie de ciclos que se irán repitiendo hasta que se alcance el tiempo de simulación establecido. Contaremos también el número de colisiones.

En primer lugar buscamos la partícula que colisionará de manera inminente. Esa será la que se encuentre en la copa del árbol de tiempos de colisión, es decir, aquella  $i_*$  tal que  $time(i_*, new(i_*))$  sea el mínimo de todos los del sistema. Conocida  $i_*$ , sabemos igualmente su compañero de colisión que notaremos por  $j = partner(i_*)$ . Si es necesario, la partícula  $i_*$  es avanzada desde su tiempo  $time(i_*, old(i_*))$  hasta el de la simulación. Eso se hará sólo si  $j > 0$ , ya que notaremos con un valor negativo del vector *partner* ( $j < 0$ ) siempre que el avance de  $i_*$  no sea necesario, porque se haya hecho ya en un instante anterior de la simulación.

Si la partícula  $i_*$  se avanza, tendremos que contar con la posibilidad de que haya que renovar las listas de ocupación, porque  $i_*$  abandone la subcelda que ocupa. En ese caso, se actualizaría tanto la lista de la celda que abandona como la lista de aquella en la que entra. Existen dos posibilidades, según  $i_*$  colisione con un obstáculo ( $j > N, j < \infty$ ) o con otra partícula ( $1 \leq j \leq N$ ). Si la colisión es contra un obstáculo, sólo nos queda intercambiar los valores de  $old(i_*)$  y  $new(i_*)$  y continuar con la búsqueda de nuevos tiempos y compañeros de colisión para  $i_*$ .

Si hay que hacer colisionar a  $i_*$  con otra partícula  $j$ , se tendrán en cuenta las leyes de colisión que imperen en cada caso. Para ello habrán sido leídos antes los parámetros necesarios (masa, diámetros, coeficientes de restitución). Tendremos que avanzar también a  $j$  desde su  $time(j, old(j))$  hasta el instante de la colisión  $t$ , con los posibles cambios en las listas de ocupación. Una vez que se termina con la colisión, también habremos de intercambiar los valores de  $old(j)$  y  $new(j)$ , llevar el  $time(j, new(j))$  hasta  $t$  y, puesto que no será necesario el avance de  $i_*$  en futuros ciclos, marcar  $partner(j, new(j)) = -i$ .



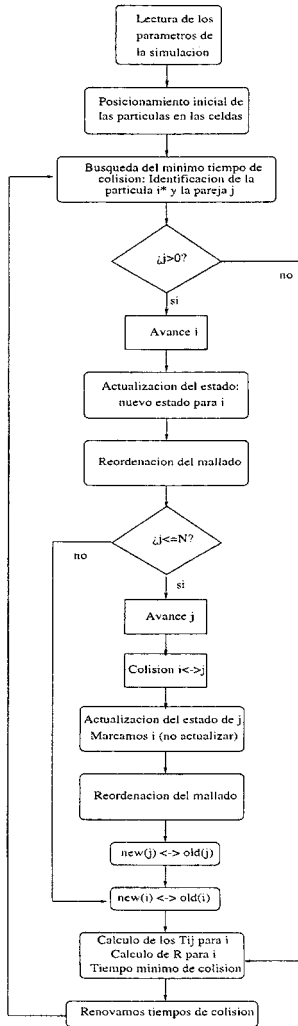


Figura A.5: Diagrama de flujo del algoritmo de Lubachevsky. La notación empleada se explica en el texto.

En este punto nos volvemos a encontrar tanto en el caso de que  $i_*$  hubiese necesitado haber sido avanzado como si no. Ahora se trata de establecer la siguiente colisión que va a sufrir  $i_*$ , el instante en que ocurrirá y contra qué partícula u obstáculo. La búsqueda de la próxima interacción con alguna vecina se hará sólo entre las partículas que ocupan la subcelda en que la colisión de  $i_*$  tuvo lugar y las que rodean a ésta más directamente. Este es un punto crucial en el algoritmo. En el algoritmo intuitivo de Allen, este cálculo implica el estudio de posibles colisiones con el resto de partículas del sistema (lo que implica un tiempo de computación del orden de  $\mathcal{O}(N)$ ), mientras que nosotros necesitaremos un ciclo del orden de  $\mathcal{O}(N/\text{num.celdas})$ . Cada vez que seleccionamos una posible partícula que va a chocar con  $i_*$  en el futuro, debemos avanzarla hasta el instante  $t$ . Se ha de tener en cuenta que este avance deberá ser consecuente con las condiciones de contorno impuestas. Tras este ciclo obtenemos el tiempo  $T_{ij}$  y la partícula que acompañará a  $i_*$  en su futura colisión. En el caso de que no haya una tal partícula, se asignará un valor infinito al compañero y también al tiempo  $T_{ij}$ . Este será el código que empleemos para reconocer que una partícula sólo debe de ser avanzada, cuando llegue el momento de que el algoritmo la evalúe.

Seguidamente se calculará el mínimo tiempo que tardará  $i_*$  en colisionar con algún obstáculo. Lo notaremos como  $R$ . Desde un punto de vista práctico, distinguimos dos tiempos  $q_1$  y  $q_2$ , de interacción con las fronteras en la dirección  $x$  e  $y$  respectivamente.  $R$  será el mínimo de estos dos tiempos. Una vez que conocemos los tiempos  $T_{ij}$  y  $R$ , el tiempo de colisión de  $i_*$  será el mínimo de los dos

$$\text{time}(i_*, \text{new}(i_*)) = \min(R, T_{ij}). \quad (\text{A.9})$$

Después de haber cambiado este tiempo de colisión, hemos de modificar consecuentemente la jerarquía de tiempos. Para ello llamamos a la subrutina apropiada.

Si  $R < T_{ij}$ , asignamos como compañero de  $i_*$  un obstáculo, o que indicamos con el valor  $\text{partner}(i_*, \text{new}(i_*)) = N + 1$ . Así, cuando procesemos el próximo suceso de  $i_*$ , el algoritmo sabrá que se trata de un suceso mono-particular y actuará en consecuencia. En cambio, si  $R > T_{ij}$ , el próximo suceso para  $i_*$  será una colisión de dos partículas. Debemos cambiar el tiempo del compañero  $j$  (si es ciertamente menor que el que ya tenga asignado). Si hubiese que cambiar el tiempo de  $j$ , tendríamos que actualizar de nuevo la jerarquía de tiempos.

Ya sólo quedará asignar a  $i_*$  y  $j$  sus nuevos compañeros de forma adecuada. Se ha dicho ya que si no se hubiese establecido colisión para  $i_*$ , se le asigna un  $j$  infinito. De especial atención debe ser el caso, ya mencionado, de que  $j$  tuviese asignada ya una colisión con otra partícula  $m$ , pero en tiempo posterior a la ahora encontrada con  $i_*$ . Después de alterar el árbol de tiempos y el vector

*partner*, tendremos una partícula  $m$  dispuesta para una colisión incorrecta. El algoritmo la marcará (lo hacemos asignándole un  $partner(m, new(m)) = \infty$ : Marca de “sólo-avance”). Cuando su tiempo de colisión llegue, el algoritmo identificará que sólo debe avanzar su estado. Una vez hecho esto, siguiendo el proceso normal, buscará el siguiente suceso para  $m$ .

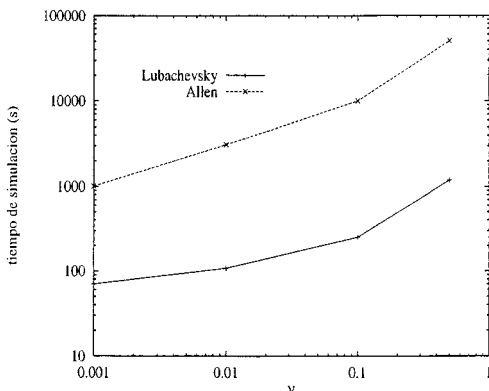


Figura A.6: Resultados de la simulación de un sistema de  $N = 3025$  discos duros elásticos. La densidad del sistema varía porque aumenta el tamaño de las partículas.

Después de que todo esto se ha hecho, se retoma el proceso desde el principio: es decir, se busca la partícula con un suceso más próximo, etc...

## A.5 Comparación de los algoritmos de simulación empleados

Vamos a mostrar algunos resultados que comparan el algoritmo que acabamos de introducir con el más simple e intuitivo, presentado aquí como algoritmo de Allen-Tiedesley. Introduciremos resultados de diferentes simulaciones hechas todas en la misma ordenador: un PC-pentium trabajando en un entorno Linux. Ambos programas han sido escritos en fortran 77 y compilados con idénticos compiladores. Hemos estudiado la duración en tiempo real de simulaciones idénticas de discos duros elásticos llevadas a cabo con ambos programas, para diferentes números de partículas a igual densidad y para sistemas

de igual número de partículas pero densidad creciente. Todas las simulaciones parten de las mismas condiciones iniciales. Situamos partículas idénticas en los vértices de un mallado cuadrado imaginario que cubre la celda unidad. Asignamos velocidades al azar de manera uniforme y dejamos que el algoritmo avance el sistema en el tiempo moviendo las partículas hasta que el mismo tiempo de simulación se alcanza en todas.

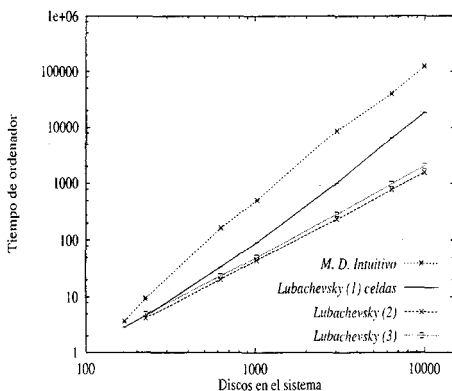


Figura A.7: Comparación de la eficiencia de diferentes algoritmos conducidos por sucesos de simulación de discos duros. Comparamos el algoritmo de DM intuitivo con el de Lubachevsky, usando para éste un mallado fijo de 100 celdas (*Lubachevsky*<sup>1</sup>), uno variable con un número tal de subceldas que haya: 9 partículas por subcelda (*Lubachevsky*<sup>2</sup>) y una partícula por celda (*Lubachevsky*<sup>3</sup>). La densidad se mantiene fija en  $\nu = 0.001$  y se varía consecuentemente el número de discos  $N$ .

En primer lugar, presentamos los resultados de varias simulaciones en las que hemos comparado el algoritmo simple de Dinámica Molecular (DM) con el de Lubachevsky, fijando para éste un mallado de 100 subceldas. Hemos fijado el número de partículas  $N = 3025$  y hemos ido variando la densidad del sistema. En la Figura A.6 se puede observar que, si bien el segundo algoritmo es mucho más eficiente que el primero, el aumento de tiempo en ambos algoritmos se produce a igual ritmo. El mismo comportamiento se aprecia si se varía el número de partículas manteniendo  $\nu$  constante. En ese caso, la pendiente de la recta es del orden de  $\mathcal{O}(N^2)$ .

Si el reticulado del sistema se optimiza, el comportamiento del algoritmo mejora considerablemente. En la Figura A.7 observamos cómo crece el tiempo de cálculo de los diferentes programas al aumentar  $N$  y dejar  $\nu$  constante.

Haciendo uso de una malla en la que el número de partículas por subcelda es bajo (*Lubachevsky*<sup>2</sup> y *Lubachevsky*<sup>3</sup>), la pendiente de la curva es del orden de  $\mathcal{O}(N \log(N))$ , mucho menor que la del algoritmo de Allen-Tiedesley o que la que resulta en el caso de usar subceldas mucho mayores (*Lubachevsky*<sup>1</sup>). Es evidente que el empleo del algoritmo conducido por sucesos ideado por Lubachevsky, con un reticulado “variable”, es la mejor opción a la hora de simular un sistema de discos duros.

## Apéndice B

# Enfriamiento libre de un gas de discos duros inelásticos

En este apéndice pretendemos mostrar la riqueza de comportamientos que se observan en el modelo de gas granular que se ha considerado en esta memoria, es decir, en un gas de discos duros inelásticos. Se pondrá de manifiesto la diversidad de estados que este sistema presenta aún en el caso en que se deje evolucionar libremente, sin someterle a la acción de campo externo alguno. El estado más simple en que el sistema evoluciona en este caso ha sido descrito hidrodinámicamente en los Capítulos 2 y 3 de esta memoria. Es por esto que le dedicaremos especial atención, en particular, a la descripción cinética del mismo. Veremos que la naturaleza eminentemente inestable de este estado obliga, en las simulaciones del sistema, a controlar exhaustivamente la evolución de las variables hidrodinámicas. Es ésta la única forma de poder contrastar los resultados teóricos con los obtenidos en la simulación.

Vamos a considerar la evolución de un sistema aislado constituido por discos duros idénticos bidimensionales de diámetro  $\sigma$  y masa  $m$  que colisionan inelásticamente. En las colisiones entre los discos se conserva la cantidad de movimiento lineal, pero no la energía. La inelasticidad aparece en las leyes de colisión a través del coeficiente de restitución  $\alpha$  (ver Ec.(2.2)). Dado que consideramos partículas lisas, podemos obviar los grados de libertad rotacionales del sistema ya que permanecen inalterados en las colisiones. Sin más que imponer la conservación de la cantidad de movimiento en la colisión y la Ec. (2.2), se llega a la siguiente expresión de las velocidades tras la colisión ( $\vec{v}'_i$ ,  $i = 1, 2$ ) en función de las velocidades antes de la colisión ( $\vec{v}_i$ ), la velocidad relativa ( $\vec{g} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$ ) y el coeficiente de restitución normal:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 - \frac{1 + \alpha}{2} (\vec{g} \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma},$$

$$\vec{v}_2^* = \vec{v}_2 + \frac{1 + \alpha}{2} (\vec{g} \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}. \quad (B.1)$$

donde  $\hat{\sigma}$  es un vector unitario en la dirección que une los centros de los dos discos en contacto (ver Figura 2.1).

En algunos casos resulta más conveniente conocer las leyes de la colisión inversa, que relacionan las velocidades  $\vec{v}_i^*$  tras cuya interacción se llega a  $\vec{v}_i$ , con la propia  $\vec{v}_i$ :

$$\begin{aligned} \vec{v}_1^* &= \vec{v}_1 - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\hat{\sigma} \cdot \vec{g}) \hat{\sigma} \\ & \qquad \qquad \qquad y \\ \vec{v}_2^* &= \vec{v}_2 + \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\hat{\sigma} \cdot \vec{g}) \hat{\sigma}. \end{aligned} \quad (B.2)$$

Cuando un sistema de discos inelásticos con estas reglas de colisión evoluciona libremente en el tiempo, su energía cinética va disminuyendo a consecuencia de las colisiones inelásticas. En el caso más sencillo, esta disminución se produce de forma que el sistema permanece homogéneo. Esta situación fue descrita analíticamente por primera vez por Haff [139] a partir de la postulación de unas ecuaciones hidrodinámicas para el gas granular. Este estado de enfriamiento homogéneo del gas granular se conoce a menudo por sus siglas en inglés "HCS". El estudio hecho por Haff fue pionero en la formulación del problema, aunque trabajos posteriores [140, 141] han puesto de manifiesto comportamientos mucho más interesantes desde una perspectiva física que una simple disminución de la temperatura del sistema. Considerar una dinámica inelástica en el gas de discos duros, implica la formación de inhomogeneidades; el enfriamiento del medio va acompañado de la formación de estructuras en el sistema. La teoría desarrollada por Haff [139], por contra, admite que no se forman estructuras a gran escala en el sistema, prediciendo entonces una evolución temporal de la temperatura granular dada por:

$$T(t) = \frac{T(0)}{(1 + t/\zeta(0))^2}, \quad (B.3)$$

donde  $\zeta(0)$  es un parámetro característico del sistema,  $T(0)$  es el valor inicial de la temperatura, y la temperatura granular  $T(t)$  se define en la Ec.(2.10).

La relación (B.3) es habitualmente conocida como Ley de Haff de evolución de la temperatura granular. El descubrimiento de las inestabilidades señaladas arriba implica un rango limitado de validez de la ecuación (B.3). Hemos podido comprobar en nuestras simulaciones que una vez que se forman estructuras dentro del sistema, las desviaciones de la temperatura respecto a la ley (B.3) son muy significativas. Más aún; aparte de estas inestabilidades en la densidad y el ímpetu del sistema, se produce otro fenómeno típico en el

enfriamiento de un medio granular: el colapso inelástico. Una característica importante de todas estas inestabilidades es que corresponden a grandes longitudes de onda, por lo que sólo tendrán la posibilidad de prosperar en sistemas suficientemente grandes. En particular, dado que la longitud de onda crítica para la inestabilidad depende del coeficiente de restitución  $\alpha$  [142, 143], cuando éste tienda a la unidad la longitud de onda crítica tenderá igualmente a infinito, y cualquier tamaño finito de sistema es asintóticamente estable en estas condiciones.

## B.1 Fenomenología del enfriamiento del gas libre

En esta sección presentamos el resultado de algunas simulaciones del enfriamiento de un medio granular para diferentes densidades y coeficientes de restitución. Pretendemos con ello ilustrar los distintos comportamientos que podemos encontrar en un sistema libre de discos duros inelásticos [144]. El procedimiento que se muestra a continuación ha sido el siguiente. Consideramos un gas de discos duros lisos (dimensión  $d = 2$ ) de diámetro  $\sigma$  en una celda cuadrada con condiciones periódicas de contorno. Nuestra unidad de longitud en el sistema será la longitud de la celda unidad ( $L = 1$ ) y la unidad de masa será la de los discos que conforman el gas ( $m = 1$ ). Habitualmente, para describir la densidad de este tipo de sistemas se hace uso de la fracción sólida, que mide la fracción de superficie ocupada por los discos que conforman el sistema:

$$\nu = \frac{\pi}{4} n \sigma^2, \quad (\text{B.4})$$

siendo  $n$  el número de discos por unidad de superficie.

El algoritmo empleado para la simulación ha sido el de Allen-Tildesley, descrito en el Apéndice A, y las condiciones iniciales para la simulación se han obtenido de la siguiente forma: se han dispuesto las  $N$  partículas del sistema en la celda unidad formando una red cuadrada. A cada una de las partículas se le ha asociado una velocidad aleatoria tomada de una distribución uniforme. Seguidamente, se ha dejado evolucionar el sistema con un coeficiente de restitución normal unidad (colisiones elásticas). Se ha considerado que un número de colisiones de  $30 \times N$  es suficiente para alcanzar un estado en el que las velocidades de las partículas se ajustan a una distribución Maxwelliana característica del equilibrio estadístico. En este punto, se han escalado las velocidades de forma que la Maxwelliana corresponda a una temperatura  $k_B T(0) = 1$ . En la Figura B.1 presentamos una configuración inicial obtenida según lo descrito. A la izquierda se han dibujado las  $N = 3025$  partículas dentro de la celda unidad. Se puede apreciar claramente la homogeneidad espacial del sistema. A la



derecha, se han incluido los histogramas obtenidos a partir de las componentes de las velocidades de las partículas en la simulación y la curva teórica a la que esperamos que se ajusten, la Maxwelliana:

$$P(v_i)dv_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{v_i^2}{2}\right) dv_i, \quad (\text{B.5})$$

siendo  $i = x, y$ .

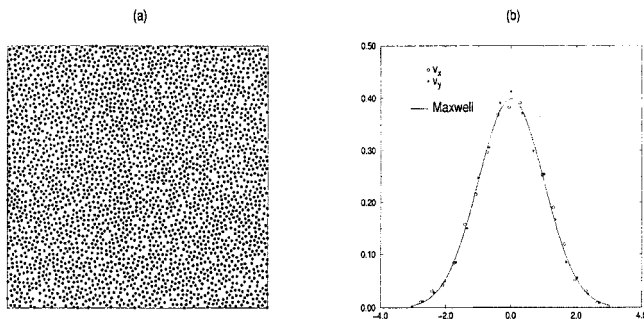


Figura B.1: Ejemplo de configuración inicial de las simulaciones. En este caso  $N = 3025$  y  $k_B T(0) = 1$ . (a) Configuración espacial; (b) Distribución inicial Maxwelliana de velocidades ( $P(v_i)\Delta v_i$ )

Cuando un medio granular (con un tamaño superior a la longitud crítica de las inestabilidades mencionadas anteriormente) se deja evolucionar libremente, va pasando por diferentes regímenes de enfriamiento que pasamos a describir someramente [144]. Nos extenderemos en la caracterización del estado de enfriamiento homogéneo, por el interés teórico que tiene la existencia de este estado y su estabilidad.

### B.1.1 Control de las inestabilidades en el gas

Es conocida la inestabilidad del estado de enfriamiento homogéneo de un gas granular [81]. Para sistemas mayores que la longitud crítica y un tiempo suficientemente grande, el sistema habrá desarrollado inhomogeneidades y será imposible describirlo mediante las ecuaciones hidrodinámicas del Capítulo 2. Será crucial, por lo tanto, controlar en nuestras simulaciones la aparición de

signos que nos muestren un alejamiento apreciable del sistema respecto al HCS. A fin de controlar la aparición y desarrollo de inestabilidades, hemos dividido la celda principal original en  $N_c$  subceldas cuadradas en las que hemos evaluado la densidad, la velocidad media y la velocidad cuadrática media. El criterio seguido para establecer el número de subceldas en que se ha dividido el sistema ha sido que el número de partículas fuese suficiente como para que los valores medios tuviesen significado estadístico y, por otro lado, que la subcelda fuese suficientemente pequeña para que las cantidades de interés permanecieran prácticamente constantes en ella.

Nos ha sido posible de este modo, establecer campos hidrodinámicos dentro de la propia celda unidad tales como el campo de velocidades macroscópicas, que denotaremos por  $\bar{u}(\vec{r}_i, t)$  para indicar explícitamente que representa la velocidad macroscópica de la celda centrada en  $\vec{r}_i$ . En cada celda habrá un número de partículas  $N(\vec{r}_i, t)$  que irá variando en el tiempo. A todas estas partículas que en el instante  $t$  se encuentren en la celda centrada en  $\vec{r}_i$  se extiende el sumatorio presente en la definición operativa de esta velocidad local:

$$\bar{u}(\vec{r}_i, t) = \frac{\sum_{i=1}^{N(\vec{r}_i, t)} \vec{v}_i}{N(\vec{r}_i, t)} \quad (\text{B.6})$$

Para controlar la aparición de inestabilidades se han realizado mediciones de otras magnitudes a lo largo de la simulación. Así, hemos considerado la diferencia entre energía cinética macroscópica de las componentes de la velocidad ( $E_{kx}, E_{ky}$ ), definidas como:

$$\begin{aligned} E_{kx} &= \sum_{i=1}^{N_c} \frac{1/2m(u_x(\vec{r}_i, t))^2}{N_c}, \\ E_{ky} &= \sum_{i=1}^{N_c} \frac{1/2m(u_y(\vec{r}_i, t))^2}{N_c}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

También se ha controlado la evolución del cociente entre la energía cinética macroscópica ( $E_k = E_{kx} + E_{ky}$ ) y la energía térmica ( $E_t$ ), siendo la definición de esta última:

$$\begin{aligned} E_t &= \sum_{i=1}^{N_c} \frac{E_t(\vec{r}_i, t)}{N_c}, \\ E_t(\vec{r}_i, t) &= \sum_{i=1}^{N(\vec{r}_i, t)} \frac{m}{2} (\vec{v}_i - \bar{u}(\vec{r}_i, t))^2. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Con la intención de controlar la aparición de inestabilidades en la densidad de partículas, estudiamos las desviaciones respecto del valor homogéneo

$n_h$  de la densidad media en el sistema,  $\Delta^*N$ , según:

$$(\Delta^*N)^2 = \sum_{i=1}^{N_c} \left( \frac{N(\vec{r}_i, t)}{L_c^2} - n_h \right)^2, \quad (B.9)$$

siendo  $L_c^2$  el área de las subceldas en que se ha subdividido el sistema.

### B.1.2 Régimen Cinético: Estado de enfriamiento homogéneo (HCS)

Cuando en la simulación de un gas de discos duros inelásticos se miden valores bajos y estacionarios de  $(\Delta^*N)^2$  y  $E_k/E_t$ , podemos asegurar que las partículas y las velocidades de éstas no están organizadas. Esto ocurre en sistemas de tamaño típico mucho menor que el crítico o, en caso contrario, para tiempos suficientemente cortos. Una “fotografía” del campo de velocidades del sistema, como la que se presenta en la Figura B.1, muestra que no existen correlaciones aparentes en el sistema. Si se mide la evolución de la temperatura, se puede comprobar que ésta decrece según la ley predicha por Haff, Ec. (B.3), como ocurre en la Figura B.3 para tiempos cortos. Veamos detenidamente cómo se puede caracterizar este estado homogéneo en el que está evolucionando el sistema desde una aproximación cinética.

#### Caracterización de la función de distribución en el HCS

La ecuación que gobierna la evolución temporal de la función de distribución en la teoría revisada de Enskog (RET) para un sistema de discos duros lisos con coeficiente  $\alpha$  constante es:

$$(\partial_t + \vec{v}_1 \cdot \nabla_1) f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) = J_E[\vec{r}_1, \vec{v}_1, t|f], \quad (B.10)$$

donde  $J_E$  es el operador de colisión de Enskog modificado,

$$J_E[\vec{r}_1, \vec{v}_1, t|f] = \sigma^{d-1} \int d\vec{v}_2 \int d\hat{\sigma} \Theta(\vec{g} \cdot \hat{\sigma})(\vec{g} \cdot \hat{\sigma}) [\alpha^{-2} g_e[\vec{r}_1, \vec{r}_1 - \vec{\sigma}] \times f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) f(\vec{r}_1 - \vec{\sigma}, \vec{v}_2, t) - g_e[\vec{r}_1, \vec{r}_1 + \vec{\sigma}] f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) f(\vec{r}_1 + \vec{\sigma}, \vec{v}_2, t)]. \quad (B.11)$$

En la expresión anterior,  $\vec{\sigma} = \sigma \hat{\sigma}$ ,  $\Theta$  es la función escalón de Heaviside, los asteriscos indican las magnitudes antes de la colisión, obtenidas a partir de la Ec.(B.2), y  $g_e[\vec{r}_1, \vec{r}_2, t|n]$  es la función de correlación de pares en equilibrio, correspondiente al campo de densidades

$$n(\vec{r}, t) = \int d\vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (B.12)$$

La RET es una ecuación altamente no lineal debido a la dependencia de  $g_e$  respecto de  $f$ . En el límite de baja densidad, sin embargo, el operador de colisión se simplifica al operador de colisión de Boltzmann,

$$J_B[\vec{r}_1, \vec{v}_1, t|f] = \sigma^{d-1} \int d\vec{v}_2 \int d\vec{\sigma} \Theta(\vec{g} \cdot \hat{\sigma})(\vec{g} \cdot \vec{\sigma}) \times \\ [\alpha^{-2} f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) f(\vec{r}_1 - \vec{\sigma}, \vec{v}_2, t) - f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) f(\vec{r}_1 + \vec{\sigma}, \vec{v}_2, t)], \quad (B.13)$$

y la ecuación (B.10), se transforma en la ecuación de Boltzmann inelástica, Ec. (2.3).

Venimos tratando el sistema en el HCS, es decir, el sistema permanece homogéneo espacialmente y la dinámica está controlada directamente por la dependencia temporal de la temperatura, cuya definición se ha dado en la ecuación (2.10). Haciendo un análisis dimensional de la ecuación y algunas consideraciones sobre la simetría que debe tener su solución, se concluye que la solución normal de la ecuación de Enskog describiendo el enfriamiento homogéneo del gas, debe tener la forma escalada,

$$f_H(\vec{v}, t) = n\hat{v}_0^{-d}(t)\phi(v/\hat{v}_0(t)), \quad (B.14)$$

donde  $\hat{v}_0(t) = (2k_B T(t)/m)^{1/2}$  es la velocidad térmica del gas en el instante  $t$ . Además, de la propia ecuación de Boltzmann, se puede establecer una ecuación de evolución de la temperatura a partir del análisis del balance de energías:

$$\partial_t T(t) = -\zeta(t)_H T(t), \quad (B.15)$$

siendo,

$$\zeta_H = \frac{m\pi^{\frac{d-1}{2}}\sigma^{d-1}(1-\alpha^2)}{4dn_H k_B T_H \Gamma(\frac{d+3}{2})} \int \int d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 |\vec{v}_1 - \vec{v}_2|^3 f_H(\vec{v}_1, t) f_H(\vec{v}_2, t), \quad (B.16)$$

y  $f_H$  la función de distribución en el HCS, ver Ec.(D.6).

Como toda la dependencia en el tiempo de la temperatura es conocida en el HCS, la ecuación (B.15) puede ser resuelta, de forma que se obtiene una ley algebraica para la evolución de la temperatura,

$$T_g(t) = \frac{T_g(0)}{\left(1 + \frac{\zeta[T_g(0)]t}{2}\right)^2}, \quad (B.17)$$

que es precisamente la dependencia temporal obtenida por Haff (B.3). Conviene llamar la atención sobre el hecho de que esta ecuación sólo es válida si el sistema se encuentra en el HCS desde el instante  $t = 0$ . Obsérvese, por último, que dada la simetría de la interacción, la única diferencia entre las soluciones de (B.15) según la ecuación de Enskog y de Boltzmann es un factor

constante (el valor de contacto de la función de correlación de pares,  $g_e$ ), que implica un factor de enfriamiento distinto. Eso no impide que, con un escalamiento apropiado, ambas soluciones coincidan en el estado de enfriamiento homogéneo.

Una vez supuesta la forma funcional (B.14) para la función de distribución y conocida la dependencia temporal de la temperatura, es posible cerrar la ecuación (B.10) en  $\phi$ . Su solución, sin embargo, está lejos de ser trivial y hasta ahora tan sólo se han conseguido aproximaciones. En particular, la función  $\phi$  se puede desarrollar en una serie de polinomios de Laguerre, conocidos en teoría cinética como polinomios de Sonine [72], que se representan  $S_{d/2-1}^{(j)}$  y cuya definición es [79]:

$$S_l^j(x) = \sum_{p=0}^j \frac{\Gamma(j+l+1)}{(j-p)!p!\Gamma(p+l+1)} (-x)^p, \quad (\text{B.18})$$

cumpliendo la condición de normalización:

$$\int_0^\infty dx x^l e^{-x} S_l^{(j)}(x) S_l^{(j')}(x) = \frac{\Gamma(j+l+1)}{j!} \delta_{j,j'}^{Kr}. \quad (\text{B.19})$$

En base a ellos podemos desarrollar la función  $\phi$  de la siguiente forma:

$$\phi(v) = \phi^{(0)}(v) \sum_{j=0}^{\infty} a_j S_{d/2-1}^{(j)}(v^2), \quad (\text{B.20})$$

siendo  $\phi^{(0)}(v) = \pi^{-d/2} e^{-v^2}$  la distribución de Maxwell-Boltzmann con una temperatura dependiente del tiempo.

De la condición de normalización y la definición de temperatura, se deduce que los primeros coeficientes del desarrollo (B.20) son nulos,  $a_0 = 1$  y  $a_1 = 0$ . Además, si se desprecian contribuciones no lineales a los momentos (la conocida como primera aproximación de Enskog), se puede dar una expresión analítica para el coeficiente  $a_2$  en función del coeficiente de restitución [145],

$$a_2 = \frac{16(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{81-17\alpha+30\alpha^2-30\alpha^3}. \quad (\text{B.21})$$

El hecho de que  $a_2$  esté acotado por el valor  $a_2^{max} = 0.2$  ha servido para justificar la aproximación de la solución de la ecuaciones de Enskog y de Boltzmann en el estado de enfriamiento homogéneo por una distribución de Maxwell-Boltzmann. El valor de este argumento está limitado no sólo por haber considerado los tres primeros términos del desarrollo de Sonine, sino también porque debemos tener en cuenta que el cálculo del propio coeficiente

$a_2$  se ha hecho en la aproximación de Enskog. Queremos resaltar por último, que si bien en principio el desarrollo en polinomios de Sonine de la función de distribución no es convergente, en el sentido de que no tenemos asegurado que el término  $a_{l+1} < a_l$ , existen evidencias de que en el caso particular del HCS sí lo es [146], al menos para valores no muy bajos del coeficiente de restitución normal ( $\alpha > 0.6$ ).

Se pueden encontrar pistas del alejamiento de la función de distribución de la forma Gaussiana mediante la medición del cuarto momento de la velocidad. De la expresión de los polinomios (B.18) y de la forma de la función de distribución (B.14), se concluye que

$$\frac{\langle v^4 \rangle_H}{2\langle v^2 \rangle_H^2} = 1 + a_2, \quad (\text{B.22})$$

siendo

$$\langle v^l \rangle_H = \frac{1}{n} \int d\vec{v} v^l f_H(\vec{v}, t). \quad (\text{B.23})$$

Obsérvese que  $a_2$  mide precisamente el alejamiento del valor de  $\frac{\langle v^4 \rangle_H}{2\langle v^2 \rangle_H^2}$  respecto al resultado gaussiano.

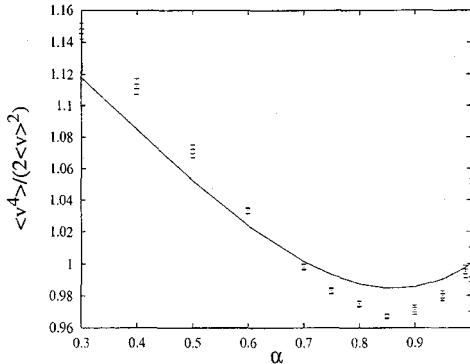


Figura B.2: Medidas del cuarto momento de la distribución escalado según se indica, obtenidas en la simulación de un sistema con  $N = 6400$ , temperatura inicial unidad y fracción de superficie  $\nu = 5 \cdot 10^{-5}$ . Los detalles de la simulación son los descritos en el texto. Todos los valores mostrados están por encima del valor crítico del coeficiente de restitución. Se presentan los resultados promediados sobre 10 trayectorias con sus bandas de error. La línea continua es el valor teórico en la aproximación de Sonine, Ec.(B.22).

En la Figura B.2 presentamos los resultados de la simulación de un sistema de discos lisos y los comparamos con la expresión teórica de  $a_2$ , Ec.(B.21). Se observa que los puntos medidos siempre quedan por debajo de la predicción teórica para  $\alpha > 0.7$  y que el error relativo es apreciablemente alto, especialmente para valores bajos de  $\alpha$ , para los que la discrepancia es mayor. El hecho de haber considerado un sistema muy diluido nos ha permitido llegar hasta valores del coeficiente cercanos a cero.

Los resultados de nuestras medidas de  $a_2$  coinciden con los presentados en [146] donde además, se presenta un estudio de la evolución dinámica de los coeficientes en el desarrollo en polinomios de Sonine de la función de distribución, del que se concluye que tan sólo son necesarias unas pocas colisiones por partícula para que el sistema alcance un estado en el que los coeficientes del desarrollo son estacionarios en el tiempo y la dependencia temporal total de la función de distribución ocurre a través del decaimiento algebraico de la temperatura (B.15), con un factor de enfriamiento que depende de los valores asintóticos de los coeficientes del desarrollo.

### Estabilidad del estado de enfriamiento homogéneo.

La estabilidad lineal del HCS ha sido estudiada mediante la obtención de ecuaciones de Navier-Stokes en la aproximación lineal [147, 143, 129, 102]. Este análisis ha mostrado que las inestabilidades aparecen para valores del número de onda menores que un cierto valor crítico  $k^*$ . En un sistema con condiciones periódicas de contorno, el número de ondas más pequeño posible es  $k_m = 2\pi/L$  (siendo  $L$  la longitud de la celda unidad). Consecuentemente, el número de ondas crítico se puede asociar a una longitud crítica del sistema,  $L_c = \frac{2\pi}{k^*}$ . Si consideramos en nuestras simulaciones un sistema con un tamaño  $L > L_c$ , sabremos que este sistema no es estable frente a fluctuaciones espaciales de la velocidad y desarrollará correlaciones de largo alcance. Si, por el contrario, consideramos sistemas de tamaños menores que el crítico, es de esperar que sean asintóticamente estables y que no desarrollen inestabilidades, permaneciendo en el HCS. En la referencia [102] se hace un análisis detallado de la estabilidad hidrodinámica del estado de enfriamiento homogéneo y se establece una condición de estabilidad. En base a esta condición, en [147] se estima la longitud crítica

$$L_c = \frac{2\sqrt{\pi}}{n\sigma\sqrt{\epsilon_0(2-\epsilon_0)}}, \quad (\text{B.24})$$

utilizando un modelo de ecuación cinética. En ella aparece el parámetro de inelasticidad  $\epsilon_0 = \frac{(1-\alpha^2)}{2}$ . Hemos hecho uso de esta estimación para asegurar que el sistema que consideramos es estable. Aún así, hemos controlado que

efectivamente el sistema permanezca estable en la práctica midiendo la evolución de la desviación cuadrática media de la densidad local y el cociente entre las energías cinética y térmica. Si ambas magnitudes permanecen acotadas, podemos asegurar que no se desarrollan inestabilidades en la simulación y que el gas se mantiene en el estado de enfriamiento homogéneo.

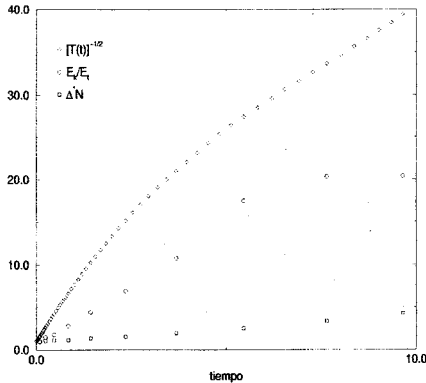


Figura B.3: Desarrollo de inestabilidades en un gas granular. Las unidades y los detalles de la simulación son descritos en el texto. El sistema de la figura tiene  $N=3025$  partículas inelásticas con coeficiente de restitución  $\alpha = 0.7$  y la densidad es  $\nu = 0.058$ . La línea continua representa la Ley de Haff, Ec.(B.3). Todas las curvas se han escalado con el correspondiente valor inicial.

### B.1.3 Región de flujo tangencial

Transcurrido un cierto lapso de tiempo, en una simulación de un sistema con un tamaño superior al crítico, se produce un aumento en la magnitud  $E_k/E_t$  y el comportamiento de la energía cinética total se desvía de la ley (B.3). Todo ello se observa en la Figura B.3, donde se han incluido la evolución temporal de las tres magnitudes usadas para controlar la aparición de inestabilidades en el sistema. Observemos, además, que desde el momento en que se rompe apreciablemente la homogeneidad, no tiene sentido hablar de una temperatura global del mismo propiamente dicha, ya que nos encontramos con un sistema formado por grupos de partículas más o menos independientes. En



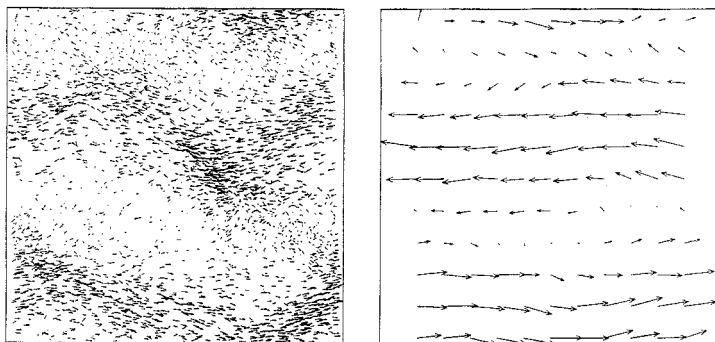


Figura B.4: Velocidades de las partículas (izquierda) y campo de velocidades macroscópicas (derecha) en el régimen de flujo tangencial. Los detalles de simulación son idénticos a los de las figuras anteriores. El sistema tiene  $N = 3025$  partículas con  $\alpha = 0.85$ . Su densidad es  $\nu = 0.058$ .

la Figura B.4 mostramos el sistema en esta fase de enfriamiento. Lo hacemos de dos formas diferentes. En la figura de la izquierda hemos tomado una instantánea del sistema y representamos las velocidades de todas las partículas en la celda unidad. Se observa claramente que se han formado dos bandas de partículas en el gas que se desplazan en direcciones opuestas. Tras esta organización de la cantidad de movimiento se produce una reorganización de la masa claramente apreciable que da lugar al siguiente régimen de enfriamiento bien diferenciado. En la figura de la derecha, hemos representado el campo de velocidades macroscópicas del sistema en el régimen de flujo tangencial. Se puede observar claramente el flujo tangencial en el sistema. Esto es congruente con la conservación de la cantidad de movimiento total. En ambas figuras, la longitud de la flecha es proporcional a la velocidad de la partícula (izquierda) o de la celda (derecha).

### B.1.4 Formación de agregados

Dado el carácter inestable del estado en que se encuentra el sistema de las Figuras B.4, al dejarlo evolucionar en el tiempo, éste lo abandona para pasar a un régimen inhomogéneo en el que las partículas tienden a formar agregados (Figura B.5). Obsérvese que esto coincidirá con un aumento considerable de la magnitud ( $\Delta^*N$ ) en las simulaciones. Estos cúmulos de partículas no son entes estáticos sino que, muy al contrario, presentan una gran actividad como

consecuencia de las colisiones entre las partículas, pudiendo ocurrir que se desplacen, rompan, rehagan,..., con la característica general de que su longitud (tamaño) va creciendo en el tiempo. Este crecimiento, junto con las condiciones periódicas de contorno y las ligaduras impuestas en la simulación, hacen que el sistema vuelva a pasar, para tiempos aún mayores, del régimen de formación de agregados a un régimen de flujo tangencial, correspondiente esta vez a los brazos de dos agregados enfrentados. Existen dos explicaciones posibles a la

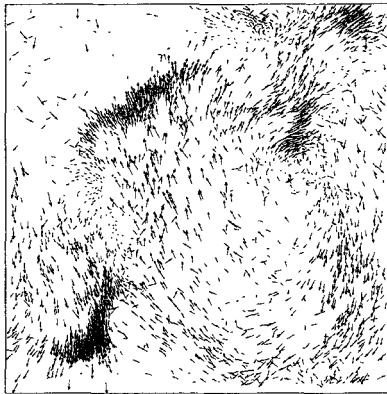


Figura B.5: Formación de agregados en el gas. En este caso, como en la Figura B.3,  $N = 3025$ ,  $\alpha = 0.7$  y  $\nu = 0.058$ . Los detalles de simulación son idénticos a los empleados en las figuras anteriores. La longitud de cada flecha es proporcional a la velocidad de la partícula que se sitúa en su punto de aplicación. La formación de grumos de partículas es evidente, mostrando claramente la inhomogeneidad no sólo de la velocidad sino también del campo de densidades.

aparición de agregados en el gas. Por un lado, puede deberse a inestabilidades no lineales consecuencia del acoplo entre los campos hidrodinámicos. Por otro lado, puede ser consecuencia de la inestabilidad lineal en la densidad predicha de las ecuaciones hidrodinámicas en la aproximación lineal. En cualquier caso, la descripción de la formación de los agregados en un sistema inhomogéneo está más allá de las posibilidades de la hidrodinámica lineal [142].

### B.1.5 Colapso inelástico

Para ciertos tamaños del sistema y grados de inelasticidad, aparece en la simulación el fenómeno denominado colapso inelástico [144]. Consiste en una singularidad asociada al hecho de que algunas partículas experimentan un número infinito de colisiones en un tiempo finito. Se han realizado diversos estudios sobre el colapso inelástico en una [148, 46, 149] y en dos [148, 150] dimensiones. De ellos se desprende que es un fenómeno de naturaleza eminentemente monodimensional, en el sentido de que involucra cadenas lineales de partículas. Se ha tratado de delimitar los fronteras entre los diferentes regímenes [144] (tomando como parámetros el tamaño del sistema y la inelasticidad de las colisiones) y de llegar a expresiones para el grado de inestabilidad crítica a la que aparece el colapso inelástico en el sistema.

En la actualidad es generalmente aceptado que la importancia para la descripción hidrodinámica del sistema de este fenómeno es limitada. De hecho, es un fenómeno que desaparece si se considera un coeficiente de restitución dependiente de la velocidad relativa que se anula cuando ésta tiende a cero [151]. Esta dependencia es muy plausible, en el sentido de que parece modelar las colisiones entre granos reales de forma más exacta que si se considera un coeficiente de restitución constante, independiente de la velocidad con la que chocan.

Nuestras simulaciones, que se sitúan siempre en las cercanías del HCS, se limitan a controlar que el sistema no salga de él, es decir, se mantenga en el régimen cinético. Por ello, no es de esperar la aparición de colapso. Aún así, se ha tenido en cuenta la posibilidad; el programa contiene un algoritmo de control, de manera que, en el caso de que ocurriese, se detiene y retorna un mensaje de error.

## Apéndice C

# Ecuación de Boltzmann-Enskog-Lorentz para un medio granular

La ecuación de Boltzmann es válida para fluidos simples constituidos por moléculas idénticas y sin estructura a densidades muy bajas. No es en general aplicable, por tanto, a procesos de difusión que requieren de una mezcla de componentes mediante los cuales las partículas del soluto se difunden por el disolvente. No obstante existe un caso de difusión especialmente simple, cuando las partículas del disolvente y del soluto son mecánicamente idénticas. Veremos que en este caso es trivial modificar la ecuación de Boltzmann para describir al sistema en el límite apropiado de densidades.

El fenómeno de transporte macroscópico que describe la evolución de esta especie diluida dentro del disolvente se denomina *autodifusión*. Si la especie 1 es lo suficientemente diluida, las interacciones entre partículas del tipo 1 serán despreciables. Por ello, el movimiento de esta especie se reducirá al movimiento de una partícula en un fluido de partículas idénticas a ella. Es interesante observar que, aunque no es posible hacer un estudio determinista de tal partícula en el fluido, sí es posible hacer un tratamiento estadístico del problema del que se pueda obtener información relevante. Para ello es esencial encontrar una ecuación para la función de distribución de la partícula que difunde, que representaremos por  $f_s(\vec{r}, \vec{v}; t)$ . Tal ecuación se conoce como la *ecuación de Boltzmann-Lorentz*. Observemos que, en el límite en el que la dilución de la especie 1 es infinita,  $f_s(\vec{r}, \vec{v}; t)$  describe las propiedades de una partícula dada en un fluido de partículas idénticas.

Usaremos la notación  $f_2(\vec{r}, \vec{v}; t)$  para la función de distribución de la especie 2 en la mezcla. Por otro lado, un sistema formado sólo por moléculas de la especie 2, podrá ser descrito en el límite de baja densidad, como fluido

simple inelástico que es, por la ecuación inelástica de Boltzmann. Si llamamos  $f(\vec{r}, \vec{v}; t)$  a la función de distribución de la especie 2 considerada en solitario, ésta habrá de satisfacer:

$$(\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla)f(\vec{r}, \vec{v}, t) = J_B[\vec{r}, \vec{v}, t|f, f], \quad (C.1)$$

siendo  $J_B$  el operador de Boltzmann inelástico [110], Ec.(B.13).

A partir de aquí se pueden reproducir, paso a paso, los argumentos de Boltzmann para el cálculo de la evolución temporal de la función de distribución de no equilibrio. Existen ciertas consideraciones, sin embargo, que simplifican el proceso:

- La probabilidad de colisión entre dos partículas de la especie 1 es extremadamente pequeña comparada con la probabilidad de colisión entre partículas de diferentes especies. En concreto, lo es en un factor  $n_1/n_2$ , el cociente de las concentraciones.
- De igual manera, la función de distribución de las moléculas de la especie 2 será sólo ligeramente perturbada de su estado de equilibrio (por el mismo factor  $n_1/n_2$ ) debido a las poco frecuentes colisiones entre partículas de la especie 2 con partículas de la especie 1. Por eso la Ec.(C.1) permanecerá aproximadamente válida para todo instante y

$$f_2(\vec{r}, \vec{v}; t) = f(\vec{r}, \vec{v}; t) + \mathcal{O}\left(\frac{n_1}{n_2}\right). \quad (C.2)$$

Porque estamos en el límite ( $n_1/n_2 \rightarrow 0$ ), vamos a identificar  $f_2(\vec{r}, \vec{v}; 0)$ , función de distribución de la especie 2 en la mezcla, con la solución de la ecuación de Boltzmann para esta especie considerada como un gas inelástico simple  $f(\vec{r}, \vec{v}; t)$ .

Sea un volumen  $\Gamma$  del espacio fásico de las partículas marcadas. Vamos a seguir la evolución de este volumen fásico en el tiempo. La variación en el tiempo del número de partículas en ese volumen es la integral del flujo de moléculas a través de la superficie  $S$  que lo engloba, lo que se expresa:

$$\partial_t \int_{\Gamma} d\vec{x} f_s(\vec{r}, \vec{v}; t) = - \int_S d\vec{S} \cdot \vec{J} = - \int_{\Gamma} d\vec{x} \nabla \cdot \vec{J}, \quad (C.3)$$

donde  $\vec{x} = (\vec{r}, \vec{v})$  representa un punto en el espacio fásico,  $d\vec{x} = d\vec{r}d\vec{v}$ , hemos aplicado el Teorema de Green e introducido el flujo de partículas marcadas:

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \vec{x} f_s(\vec{r}, \vec{v}; t), \\ \nabla &= \left( \frac{\partial}{\partial \vec{r}}, \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right), \end{aligned} \quad (C.4)$$

siendo  $\dot{\vec{x}} = (\vec{v}, \vec{v})$  la velocidad del punto  $\vec{x}$ .

Si consideramos un volumen infinitesimal ( $\Gamma \rightarrow 0$ ) en la Ec.(C.3), podemos expresar esta igualdad localmente como:

$$\partial_t f_s(\vec{r}, \vec{v}; t) + \nabla \cdot \vec{J} = 0. \quad (C.5)$$

La variación temporal de la función de distribución que recoge la ecuación anterior es la producida por el flujo de las partículas a través de  $S$  como consecuencia de su desplazamiento libre por el espacio fásico. No se ha considerado hasta ahora la variación producida por la existencia de colisiones entre las moléculas del fluido. Por ello, en general, hay que añadir a la ecuación de balance una contribución que proviene de las colisiones:

$$\partial_t f_s(\vec{r}, \vec{v}; t) + \vec{v} \cdot \nabla f_s(\vec{r}, \vec{v}; t) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col}, \quad (C.6)$$

donde se ha hecho uso de (C.4) y nos hemos restringido a los casos exentos de campos externos, en que estamos interesados.

## C.1 Término de colisión

Procedamos a calcular este término de colisión, que a partir de ahora notaremos  $J_c[\vec{r}, \vec{v}, t | f_s, f]$ . El cambio en el número de partículas dentro del volumen fásico  $\Delta\vec{r}\Delta\vec{v}$ , alrededor del punto  $(\vec{r}, \vec{v})$  y en el intervalo de tiempo  $(t, t + \Delta t)$ , debido a las interacciones entre las partículas dentro de la mezcla será, según todo lo dicho hasta ahora:

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} \Delta\vec{r}\Delta\vec{v}\Delta t = J_c[\vec{r}, \vec{v}, t | f_s, f] \Delta\vec{r}\Delta\vec{v}\Delta t. \quad (C.7)$$

En el límite de bajas densidades, parece lógico admitir que las colisiones que existen en el fluido sean binarias e instantáneas. Esto nos permite expresar el flujo de partículas como diferencia de dos contribuciones bien diferenciadas:

$$J_c[\vec{r}, \vec{v}, t | f_s, f] = C'' - C', \quad (C.8)$$

siendo:

- $C' \Delta\vec{r}\Delta\vec{v}\Delta t$  el número de colisiones binarias en el intervalo de tiempo  $\Delta t$ , en las que una molécula dentro del volumen  $(\vec{r}, \vec{r} + \Delta\vec{r}; \vec{v}, \vec{v} + \Delta\vec{v})$  es dispersada tras la colisión a cualquier otra velocidad distinta de  $\vec{v}$ .

- $C'' \Delta \vec{r} \Delta \vec{v} \Delta t$  el número de colisiones binarias en el intervalo de tiempo  $\Delta t$ , en las que una molécula dentro del volumen fásico  $\Delta \vec{r}$  alrededor del punto  $\vec{r}$ , con una velocidad arbitraria  $\vec{v}^*$  antes de colisionar, termina tras la colisión con una velocidad dentro del rango  $(\vec{v}, \vec{v} + \Delta \vec{v})$ .

Ahora bien; para conseguir una expresión explícita de las contribuciones  $C'$  y  $C''$  se requiere una hipótesis más delicada. Está claro que, por asumir colisiones binarias, necesitaremos conocer el número de pares de moléculas en el elemento  $\Delta \vec{r}$  que van a colisionar en el intervalo de tiempo  $\Delta t$ . Para alcanzar ese nivel de información a partir de la que disponemos se debe asumir la hipótesis de Caos Molecular (*Stoßzahlansatz*). Dicha hipótesis consiste en admitir que el número de pares de moléculas en el elemento  $\Delta \vec{r}$  con velocidades respectivas en el rango  $(\vec{v}, \vec{v} + \Delta \vec{v})$  y  $(\vec{v}_1, \vec{v}_1 + \Delta \vec{v}_1)$ , que participan en una colisión está dado por:

$$f_s(\vec{r}, \vec{v}; t) \Delta \vec{r} \Delta \vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}_1; t) \Delta \vec{r} \Delta \vec{v}_1. \quad (C.9)$$

Observemos que esta expresión es congruente con la hipótesis hecha de que predominen las colisiones entre las partículas de las especies 1 y 2 sobre las colisiones entre partículas de la especie 1. Por ello, queramos recalcar,  $f(\vec{r}, \vec{v}_1; t)$  representa la función de distribución de las partículas no marcadas como fluido libre y es la solución de la ecuación inelástica de Boltzmann (C.1).

A partir de la definición de sección eficaz  $\sigma(\Omega; g)$ , el número de moléculas desviadas por un objetivo en el ángulo sólido  $d\Omega$  en el intervalo de tiempo  $\Delta t$  es:

$$dN = f(\vec{r}, \vec{v}_1; t) \Delta \vec{v}_1 \sigma(\Omega; g) g d\Omega \Delta t, \quad (C.10)$$

habiéndose utilizado la velocidad relativa  $\vec{g} = \vec{v} - \vec{v}_1$  y el ángulo sólido de deflexión  $d\Omega$ . Si se tiene en cuenta que cualquier cambio en la velocidad de una partícula incidente afecta a la velocidad de la partícula blanco (debido a la conservación del momento en la colisión), se comprueba que  $C' \Delta \vec{r} \Delta \vec{v} \Delta t$  se consigue multiplicando la Ec.(C.10) por el número de partículas blanco  $f_s(\vec{r}, \vec{v}; t) \Delta \vec{r} \Delta \vec{v}$  e integrando para todos los posibles ángulos de deflexión y todas las velocidades de partículas incidente  $\vec{v}_1$ . En definitiva:

$$C' \Delta \vec{r} \Delta \vec{v} \Delta t = \int d\Omega \int d\vec{v}_1 \sigma(\Omega; g) g [f_s(\vec{r}, \vec{v}; t) f(\vec{r}, \vec{v}_1; t) \Delta \vec{r} \Delta \vec{v} \Delta t]. \quad (C.11)$$

Para calcular  $C''$ , seguimos razonamientos análogos. Consideramos una molécula con una velocidad inicial dada  $\vec{v}^*$  y buscamos todas las posibles colisiones que conducen a esta partícula hasta una velocidad final dada  $\vec{v}$ . Es decir, nos fijamos en la colisión inversa a (B.1):

$$C'' \Delta \vec{r} \Delta \vec{v} \Delta t = \int d\Omega \int d\vec{v}_1^* d\vec{v}^* \sigma(\Omega; g^*) g^* [f_s(\vec{r}, \vec{v}^*; t) f(\vec{r}, \vec{v}_1^*; t) \Delta \vec{r} \Delta t] \quad (C.12)$$

La integral en la velocidad de la ecuación anterior se extiende a los valores tales que llevan a una velocidad "final"  $\vec{v}$  en el intervalo  $(\vec{v}, \vec{v} + \Delta\vec{v})$ . A fin de simplificar las ecuaciones (C.11) y (C.12), vamos a particularizar la expresión de la sección eficaz para el caso de esferas duras. Además, consideramos los volúmenes en el espacio fásico como diferenciales de volumen, de modo que hacemos tender  $\Delta\vec{r} \rightarrow d\vec{r}$  y  $\Delta\vec{v} \rightarrow d\vec{v}$ . Con ello:

$$C' d\vec{r} d\vec{v} \Delta t = \sigma^{d-1} \int d\hat{\sigma} \int d\vec{v}_1 d\vec{v} \Theta(-\vec{g} \cdot \hat{\sigma}) |\vec{g} \cdot \hat{\sigma}| [f_s(\vec{r}, \vec{v}; t) f(\vec{r}, \vec{v}_1; t)] d\vec{r} \Delta t,$$

$$C'' d\vec{r} d\vec{v} \Delta t = \sigma^{d-1} \int d\hat{\sigma} \int d\vec{v}_1^* d\vec{v}^* \Theta(-\vec{g}^* \cdot \hat{\sigma}) |\vec{g}^* \cdot \hat{\sigma}| [f_s(\vec{r}, \vec{v}^*; t) f(\vec{r}, \vec{v}_1^*; t)] d\vec{r} \Delta t, \quad (C.13)$$

siendo  $\hat{\sigma}$  un vector unitario a lo largo de la línea que va desde el centro de la partícula 1 al de la partícula marcada con la que hace contacto, como en la Figura 2.1, y  $\Theta$  es la función escalón de Heaviside. Las velocidades antes de la colisión son indicadas con asteriscos ( $\vec{v}^*, \vec{v}_1^*$ ) y, por definición, dan lugar tras ella al par  $(\vec{v}, \vec{v}_1)$ .

A continuación nos interesa expresar ambas integrales de la ecuación (C.13) en las mismas variables. Para ello, hacemos uso de la relación que existe entre ellas (B.2), de la que se obtiene fácilmente el Jacobiano de la transformación:

$$\frac{\partial(\vec{v}^*, \vec{v}_1^*)}{\partial(\vec{v}, \vec{v}_1)} = \frac{1}{\alpha}. \quad (C.14)$$

Haciendo el cambio de variable  $\vec{v}^* \rightarrow \vec{v}$  y usando la ecuación (2.2), podemos escribir el término colisional de la ecuación (C.13) de la siguiente forma:

$$J_c[\vec{r}, \vec{v}, t | f_s, f] = \sigma^{d-1} \int d\hat{\sigma} \Theta(\vec{g}^* \cdot \hat{\sigma}) |\vec{g}^* \cdot \hat{\sigma}| \times [\alpha^{-2} f_s(\vec{r}, \vec{v}^*; t) f(\vec{r}, \vec{v}_1^*; t) - f_s(\vec{r}, \vec{v}; t) f(\vec{r}, \vec{v}_1; t)]. \quad (C.15)$$

Sustituyendo este flujo colisional en la ecuación de balance (C.6), obtenemos por fin la ecuación de Boltzmann-Lorentz inelástica:

$$(\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla) f_s(\vec{r}, \vec{v}, t) = \Lambda(\vec{r}, \vec{v}, t) f_s(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (C.16)$$

siendo  $\Lambda$  el operador de Boltzmann-Lorentz:

$$\Lambda(\vec{r}, \vec{v}, t) f_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \equiv J_c[\vec{r}, \vec{v}, t | f_s, f] = \sigma^2 \int d\vec{v}_1 \int d\hat{\sigma} \Theta(g \cdot \hat{\sigma}) g \cdot \hat{\sigma} \times [\alpha^{-2} f_s(\vec{r}, \vec{v}^*, t) f(\vec{r}, \vec{v}_1^*, t) - f_s(\vec{r}, \vec{v}, t) f(\vec{r}, \vec{v}_1, t)]. \quad (C.17)$$

El uso de un método de simulación de discos duros implica considerar un sistema en el que la densidad no es asintóticamente pequeña, como requiere la



ecuación de Boltzmann. Es de esperar por ello la aparición de efectos debidos a la densidad. La ecuación de Enskog ofrece una generalización de la ecuación de Boltzmann para un sistema de esferas o discos duros a densidades más altas. Aplicada a nuestro problema, la ecuación de Boltzmann-Enskog-Lorentz se lee [34, 79]:

$$(\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla) f_s(\vec{r}, \vec{v}, t) = g_e(\sigma) \Lambda(\vec{r}, \vec{v}, t) f_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (C.18)$$

La diferencia con la ecuación (C.17) es la aparición de la función de correlación de pares de equilibrio del sistema a densidad  $n$  y a una distancia  $\sigma$  que hemos representado por  $g_e(\sigma)$ . El operador de Boltzmann  $\Lambda$  sigue dado por (C.17). Es conveniente señalar que para llegar a esta expresión se ha hecho uso de la homogeneidad del sistema, ya que, en otro caso, habría que considerar la densidad local  $n_s(\vec{r}, t)$  en la función de correlación.

Comparando (C.18) con (C.16), deducimos que los resultados de la ecuación de Enskog serán, convenientemente escalados, similares a los de la ecuación de Boltzmann. Por ello los resultados de ésta pueden ser fácilmente trasladados a la de Enskog. Esto nos ha permitido comparar con garantías nuestros resultados de la dinámica del sistema con otras simulaciones llevadas a cabo con métodos de resolución numérica de la ecuación de Boltzmann.

## Apéndice D

### Cálculo de $\nu_D$ y $f_s^{(1)}$

En este apéndice tratamos algunos de los cálculos intermedios que conducen a la expresión del coeficiente de autodifusión (3.28). La notación empleada es la que se introdujo en el Capítulo 2. Para evaluar las integrales de en la velocidad que involucra el operador lineal de colisión  $\Lambda$  de la ecuación (C.17), es conveniente usar las relaciones,

$$\begin{aligned} \int d\vec{v} Y(\vec{v}) \Lambda [X(\vec{v}) f_M(\vec{v})] &= \sigma^{d-1} \int d\vec{v} \int d\vec{v}_1 \times \\ &\int d\vec{\sigma} \Theta(\vec{g} \cdot \vec{\sigma}) (\vec{g} \cdot \vec{\sigma}) Y(\vec{v}) [\alpha^{-2} X(\vec{v}^*) f_M(\vec{v}^*) f_h(\vec{v}_1^*) - X(\vec{v}) f_M(\vec{v}) f_H(\vec{v}_1)] \\ &= \sigma^{d-1} \int d\vec{v} \int d\vec{v}_1 \int d\vec{\sigma} \Theta(-\vec{g} \cdot \vec{\sigma}) |\vec{g} \cdot \vec{\sigma}| X(\vec{v}) f_M(\vec{v}) f_M(\vec{v}_1) [Y(\vec{v}') - Y(\vec{v})], \end{aligned} \quad (D.1)$$

donde  $\vec{v}'$  es la velocidad tras la colisión de la partícula marcada,

$$\vec{v}' = \vec{v} - \frac{1 + \alpha}{2} (\vec{\sigma} \cdot \vec{g}) \vec{\sigma}. \quad (D.2)$$

Empleando la identidad (D.2) en la ecuación (3.23), aproximando antes  $\vec{B}(\vec{v})$  por el primer término en su expansión en los polinomios de Sonine,

$$\vec{B}(\vec{v}) \propto \vec{v} f_M(\vec{v}), \quad (D.3)$$

se llega a la relación

$$\nu_D = -\frac{m\sigma^{d-1}}{ndk_B T_H} \frac{1 + \alpha}{2} \int d\vec{v} \int d\vec{v}_1 f_M(\vec{v}) f_H(\vec{v}_1) \int d\vec{\sigma} \Theta(-\vec{g} \cdot \vec{\sigma}) (-\vec{g} \cdot \vec{\sigma})^2 (\vec{v} \cdot \vec{\sigma}). \quad (D.4)$$

La parte angular de esta integral se puede efectuar, resultando:

$$\nu_D = \frac{m\sigma^{d-1}}{ndk_B T_H} \frac{1 + \alpha}{2} \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right)} \int d\vec{v} \int d\vec{v}_1 f_M(\vec{v}) f_H(\vec{v}_1) g(\vec{g} \cdot \vec{v}). \quad (D.5)$$

A continuación haremos uso de la expresión explícita de la función de distribución  $f_H$  en la primera aproximación de Sonine [72, 145],

$$f_H(\vec{v}_1, t) = f_M(\vec{v}_1, t) \left\{ 1 + \frac{c^*(\alpha)}{4} \left[ \left( \frac{m}{2k_B T_H} \right)^2 v_1^4 - \frac{(2+d)m}{2k_B T_H} v_1^2 + \frac{(2+d)d}{4} \right] \right\}, \quad (D.6)$$

tratándose  $c^*(\alpha)$  de la función definida en la ecuación (2.28) y  $f_M$  la función Maxwelliana a una temperatura  $T_H$  que depende del tiempo,

$$f_M(\vec{v}_1) = n \left( \frac{m}{2\pi k_B T_H(t)} \right)^{d/2} e^{-\frac{m\vec{v}_1^2}{2k_B T_H(t)}}. \quad (D.7)$$

En esta aproximación de la función de distribución, las integrales de la velocidad que nos interesan se pueden transformar, mediante el cambio de variables  $\{\vec{v}, \vec{v}_1\} \rightarrow \{\vec{g}, \vec{G} = \frac{\vec{v} + \vec{v}_1}{2}\}$ , en el producto de dos integrales gaussianas que son resolubles y conducen a la expresión final:

$$\nu_D = \frac{2(1+\alpha)\pi^{\frac{d-1}{2}}}{d\Gamma(d/2)} \left( \frac{k_B T_H(t)}{m} \right)^{1/2} n \sigma^{d-1} \left[ 1 - \frac{c^*(\alpha)}{64} \right]. \quad (D.8)$$

Sustituyendo esta ecuación y (3.7) en (3.25) se llega directamente a la expresión del coeficiente de autodifusión (3.28).

Por otro lado, la contribución en primer orden de los gradientes a la función de distribución, Ec.(3.18), toma la siguiente forma en la primera aproximación de Sonine:

$$f_s^{(1)}(\vec{r}, \vec{v}, t) = c_D f_M(\vec{v}) \vec{v} \cdot \nabla n_s(\vec{r}, t). \quad (D.9)$$

Obsérvese que según la notación allí empleada, identificamos:

$$B(\vec{v}) = c_D f_M(\vec{v}) \vec{v}. \quad (D.10)$$

El coeficiente  $c_D$  puede ser expresado en términos del coeficiente de autodifusión usando esta expresión en la ecuación (3.21) del Capítulo 3,

$$D = -\frac{c_D}{d} \int d\vec{v} v^2 f_M(\vec{v}) = -\frac{c_D n k_B T_H(t)}{m}, \quad (D.11)$$

siendo, por tanto, la función de distribución en el primer orden de los gradientes:

$$f_s^{(1)}(\vec{r}, \vec{v}, t) = -\frac{Dm}{nk_B T_H(t)} f_M(\vec{v}) \vec{v} \cdot \nabla n_s(\vec{r}, t). \quad (D.12)$$

# Apéndice E

## Partícula browniana en un gas granular

### E.1 Derivación de la ecuación de Fokker-Planck

#### E.1.1 Expansión del operador de Boltzmann-Lorentz

En este apéndice vamos a describir una expansión formal de la ecuación (3.39) tomando como parámetro adimensional el cociente de masas  $\Delta = m_g/m$ . Para ello, es conveniente expresar el operador de colisión  $J_c$  en término de su adjunto. Sea  $H(\vec{v})$  una función arbitraria de  $\vec{v}$  y consideremos la integral,

$$I[H] = \int d\vec{v} H(\vec{v}) J_c[\vec{v}|F, f] = \sigma_0^{d-1} \int d\vec{v} \int d\vec{v}_1 H(\vec{v}) \int d\hat{\sigma} \Theta(\vec{g} \cdot \hat{\sigma})(\vec{g} \cdot \hat{\sigma}) [\alpha^{-2} F(\vec{v}^*) f(\vec{v}_1^*) - F(\vec{v}) f(\vec{v}_1)]. \quad (\text{E.1})$$

Las dependencias espaciales y temporales de las funciones han sido omitidas para simplificar la notación. Cambiamos las variables en el primer término de la derecha atendiendo al Jacobiano de la transformación que relaciona las velocidades antes y después la colisión, Ec.(2.1), y a la definición de coeficiente de restitución normal, Ec.(2.2), para obtener:

$$I[H] = \sigma_0^{d-1} \int d\vec{v} \int d\vec{v}_1 F(\vec{v}) f(\vec{v}_1) \int d\hat{\sigma} \Theta(\vec{g} \cdot \hat{\sigma})(\vec{g} \cdot \hat{\sigma}) [H(\vec{v} - \delta\vec{v}) - H(\vec{v})], \quad (\text{E.2})$$

donde hemos identificado, a partir de las leyes de colisión (3.41),

$$\delta\vec{v} = \frac{(1 + \alpha)\Delta}{1 + \Delta} (\vec{g} \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}. \quad (\text{E.3})$$

Si admitimos que el parámetro  $\Delta$  es tal que  $|\delta\vec{v}| \ll 1$ , es decir,  $\Delta \ll 1$ , tiene sentido plantear un desarrollo de  $H(\vec{v} - \delta\vec{v})$  en torno a  $\vec{v}$  en potencias de  $\delta\vec{v}$  manteniendo tan sólo sus órdenes más bajos,

$$H(\vec{v} - \delta\vec{v}) = H(\vec{v}) - \left[ \frac{\partial H(\vec{v} - \delta\vec{v})}{\partial \vec{v}} \right] \vec{v} \cdot \delta\vec{v} + \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} H(\vec{v} - \delta\vec{v}) \right] : \delta\vec{v}\delta\vec{v}. \quad (\text{E.4})$$

Desarrollo que, sustituido en (E.2) y tras algunas integraciones por partes y gaussianas, conduce a

$$I[H] \simeq \int d\vec{v} H(\vec{v}) \left\{ \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot [\vec{A}(\vec{v})F(\vec{v})] + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} : [\mathcal{N}(\vec{v})F(\vec{v})] \right\}, \quad (\text{E.5})$$

habiéndose agrupado,

$$\vec{A}(\vec{v}) = \frac{(1 + \alpha)\Delta \pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma_0^{d-1}}{(1 + \Delta)\Gamma(\frac{d+3}{2})} \int d\vec{v}_1 f(\vec{v}_1) g\vec{g}, \quad (\text{E.6})$$

$$\mathcal{N}(\vec{v}) = \left[ \frac{(1 + \alpha)\Delta}{1 + \Delta} \right]^2 \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma_0^{d-1}}{\Gamma(\frac{d+5}{2})} \times \int d\vec{v}_1 f(\vec{v}_1) \left[ \frac{d+3}{2a} g^3 \mathcal{I} + \frac{3}{2} g \left( \vec{g}\vec{g} - \frac{1}{d} g^2 \mathcal{I} \right) \right]. \quad (\text{E.7})$$

Aquí hemos usado  $\mathcal{I}$  para representar al tensor unitario de segundo orden. Como  $H(\vec{v})$  es una función cualquiera de  $\vec{v}$ , comparando las ecuaciones (E.2) y (E.5), identificamos el desarrollo del operador de colisión:

$$J_c[\vec{v}|F, f] \simeq \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot [\vec{A}(\vec{v})F(\vec{v})] + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} : [\mathcal{N}(\vec{v})F(\vec{v})] + \mathcal{O}(\Delta^3). \quad (\text{E.8})$$

## E.1.2 Estado de enfriamiento homogéneo

Vamos a particularizar  $\vec{A}$  y  $\mathcal{N}$  a este estado a fin de identificar claramente la dependencia de estos de  $\Delta$ . Primero introducimos las velocidades térmicas,

$$\check{\vec{v}} = \frac{\vec{v}}{v_0(t)}, \quad \check{\vec{v}}_1 = \frac{\vec{v}_1}{v_g(t)}, \quad (\text{E.9})$$

donde  $v_g(t) = [2K_B T_g(t)/m_g]^{1/2}$  y  $v_0(t) = [2k_B T(t)/m]^{1/2}$ , siendo  $T(t)$  la temperatura de la partícula marcada, definida en Ec.(3.52), y  $T_g$  la del gas. También escalamos la velocidad relativa,  $\check{\vec{g}} = \vec{v} - \vec{v}_1$ , de forma análoga:

$$\check{\vec{g}} = \frac{\vec{g}}{v_0(t)} = \check{\vec{v}} - \left[ \frac{T_g(t)}{T(t)} \right]^{1/2} \Delta^{-1/2} \check{\vec{v}}_1. \quad (\text{E.10})$$

Hecho esto, las velocidades relevantes a la hora de determinar las propiedades de la partícula marcada y su evolución temporal son del orden de las velocidades térmicas tanto para la browniana como para el gas que la rodea. Obsérvese que no hay ninguna razón *a priori* para suponer que  $T_g(t)$  y  $T(t)$  son del mismo orden de magnitud. Veremos que, de hecho, no es ese siempre el caso.

Al introducir en las ecuaciones la forma particular de la función de distribución en el estado de enfriamiento homogéneo, Ec.(3.42), y haciendo uso de (E.10), una expansión formal en el parámetro  $\frac{T}{T_g}\Delta$  de las ecuaciones (E.6) y (E.7), conduce a:

$$\vec{A}(\vec{v}, t) \simeq \gamma(t)\vec{v}, \quad \mathcal{N}(\vec{v}, t) \simeq 2\tilde{\gamma}\mathcal{I}, \quad (\text{E.11})$$

donde

$$\gamma(t) = (1 + \alpha) \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma_0^{d-1}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})d} n_g \left( \frac{2k_B T_g}{m} \right)^{1/2} \Delta^{1/2} \int d\vec{v} \phi(v) v, \quad (\text{E.12})$$

$$\tilde{\gamma}(t) = (1 + \alpha) \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma_0^{d-1}}{2\Gamma(\frac{d+3}{2})d} n_g \left( \frac{2k_B T_g}{m} \right)^{3/2} \Delta^{1/2} \int d\vec{v} \phi(v) v^3. \quad (\text{E.13})$$

En el límite elástico,  $\alpha = \alpha_g = 1$ , el estado de enfriamiento homogéneo es el estado de equilibrio usual con temperatura constante y  $\phi(v) = \pi^{-d/2} e^{-v^2}$ . Entonces, las ecuaciones anteriores se reducen a:

$$\begin{aligned} \gamma_e(T_g) &= \frac{4\pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma_0^{d-1}}{\Gamma(\frac{d}{2})d} n_g \left( \frac{2k_B T_g}{m} \right)^{1/2} \Delta^{1/2}, \\ \tilde{\gamma}_e(T_g) &= \frac{k_B T_g}{m} \gamma_e(T_g). \end{aligned} \quad (\text{E.14})$$

Esta última ecuación es la conocida relación de disipación-fluctuación de la partícula browniana [90]. Volviendo al gas granular en el estado de enfriamiento homogéneo, podemos aprovechar el resultado elástico para escribir las ecuaciones (E.12) y (E.13) de forma compacta:

$$\gamma(t) = \gamma_e[T_g(t)]a(\alpha), \quad (\text{E.15})$$

$$\tilde{\gamma}(t) = \gamma_e[T_g(t)]a(\alpha)b(\alpha) \frac{k_B T_g(t)}{m}, \quad (\text{E.16})$$

siendo:

$$a(\alpha) = \frac{(1 + \alpha)\Gamma(d/2)}{2\Gamma(\frac{d+1}{2})} \int d\vec{v} \phi(v) v, \quad (\text{E.17})$$

$$b(\alpha) = \frac{1 + \alpha}{d + 1} \frac{\int d\vec{v} \phi(v) v^3}{\int d\vec{v} \phi(v) v}. \quad (\text{E.18})$$

La función de distribución reducida para el gas de partículas en el estado homogéneo tiene una débil dependencia en  $\alpha_g$  que está asociada a la desviación de  $\phi(v)$  de la forma Maxwelliana. En el límite elástico,  $\alpha = \alpha_g = 1$ , esta desviación desaparece y ambas funciones,  $a(\alpha)$  y  $b(\alpha)$ , se reducen a la unidad.

Haciendo uso de las ecuaciones (E.8), (E.11) y (E.15 – E.18) en la ecuación (3.39), se obtiene una ecuación de Fokker-Planck,

$$(\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla) F(\vec{r}, \vec{v}, t) = \gamma_e [T_g(t)] a(\alpha) \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left[ \vec{v} + \frac{k_B T_g(t)}{m} b(\alpha) \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right] F(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (\text{E.19})$$

### E.1.3 Límite de validez de la ecuación

Para clarificar el contexto del límite de Fokker-Planck en el cual la ecuación anterior ha sido derivada, es conveniente considerar la evolución temporal de la temperatura  $T(t)$ , de la Ec.(3.52). Tras multiplicar la ecuación (E.19) por  $v^2$ , integrar e identificar la temperatura de la browniana, se llega a la siguiente relación entre para ésta y  $T_g$ :

$$[\partial_t + 2\gamma_e(T_g)a(\alpha)]T(t) = 2\gamma_e(T_g)a(\alpha)b(\alpha)T_g(t), \quad (\text{E.20})$$

que, tras emplear la ecuación de evolución de la temperatura en el estado de enfriamiento homogéneo (E.21), se puede transformar en una ecuación para  $T/T_g$ :

$$[\partial_t + 2\gamma_e(T_g)a(\alpha) - \zeta(T_g)] \frac{T(t)}{T_g(t)} = 2\gamma_e(T_g)a(\alpha)b(\alpha). \quad (\text{E.21})$$

Empleando la siguiente escala temporal,

$$t^*(t) = a(\alpha) \int_0^t dt' \gamma_e [T_g(t')], \quad (\text{E.22})$$

y el parámetro adimensional

$$\epsilon = \frac{\zeta[T_g(t)]}{2a(\alpha)\gamma_e[T_g(t)]}, \quad (\text{E.23})$$

la solución general de la ecuación anterior se puede calcular de manera sencilla resolviéndola por el método de variación de constantes para la variable  $T(t)/T_g(t)$ , resultando:

$$\frac{T(t)}{T_g(t)} = e^{-2(1-\epsilon)t^*} \frac{T(0)}{T_g(0)} + b(\alpha)(1-\epsilon)^{-1} [1 - e^{-2(1-\epsilon)t^*}]. \quad (\text{E.24})$$

Nótese que, como  $\zeta$  y  $\gamma_e$  tienen la misma dependencia respecto de  $T_g$ ,  $\epsilon$  es una constante en el tiempo. Tomando el límite  $t \rightarrow \infty$  en (E.24), se desprende

que la solución asintótica depende fuertemente del parámetro  $\epsilon$ . Para  $\epsilon < 1$ , el cociente se hace constante,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{T(t)}{T_g(t)} = b(\alpha)(1 - \epsilon)^{-1}, \quad (\text{E.25})$$

mientras que para  $\epsilon \geq 1$ , crece sin límite. Este comportamiento se entiende fácilmente ya que  $\epsilon$  mide la velocidad de enfriamiento del gas comparada con la relajación de la temperatura de la partícula marcada. Como la derivación hecha para la ecuación de Fokker-Planck requiere que el parámetro  $(T/T_g)\Delta$  sea pequeño, está claro que se restringe a sistemas con  $\epsilon < 1$ . Una inspección más detallada de  $\zeta(T_g), \gamma_e(T_g)$  y  $a(\alpha)$  indica que esta condición implica los límites  $\Delta \rightarrow 0$  y  $\alpha_g \rightarrow 1$ , escalados según la fórmula  $\epsilon_0$ , Ec.(3.48). En este sentido, la ecuación (3.44) surge de (E.21), usando

$$\lim_{\alpha_g \rightarrow 1} b(\alpha) = \lim_{\alpha_g \rightarrow 1} a(\alpha) = a_0(\alpha) = \frac{1 + \alpha}{2}. \quad (\text{E.26})$$

## E.2 Estado de enfriamiento homogéneo de la partícula browniana

Supongamos la existencia de un estado de la browniana análogo al de enfriamiento homogéneo para el gas, para el que consecuentemente proponemos la forma funcional (3.58),

$$F_H(\vec{v}, t) = \Omega^{-1} v_0^{-d}(t) \Phi\left(\frac{v}{v_0}(t)\right), \quad (\text{E.27})$$

en función de la velocidad térmica  $v_0 = [\frac{2k_B T(t)}{m}]^{1/2}$ . Al sustituir esta forma en la ecuación de Fokker-Planck hacemos uso de las identidades:

$$\frac{\partial F_H}{\partial t} = \Omega^{-1} \left\{ (-d) \hat{v}_0^{-d-1} \Phi\left(\frac{v}{\hat{v}_0(t)}\right) + \vec{v} \hat{v}_0^{-d-2} \Phi'\left(\frac{v}{\hat{v}_0(t)}\right) \right\} \frac{\partial \hat{v}_0}{\partial t}, \quad (\text{E.28})$$

$$\frac{\partial F(\vec{v}, t)}{\partial v} = \Omega^{-1} \hat{v}_0^{-d-1} \Phi'\left(\frac{v}{\hat{v}_0}\right), \quad (\text{E.29})$$

$$\frac{\partial \hat{v}_0}{\partial t} = \frac{1}{2T(t)} \hat{v}_0(t) \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (\text{E.30})$$

para agrupar

$$\frac{\partial F_H(\vec{v}, t)}{\partial t} = -d \frac{1}{2T} \frac{\partial T}{\partial t} F_H(\vec{v}, t) + \frac{1}{2T(t)} \frac{\partial T}{\partial t} \vec{v} \cdot \frac{\partial F_H(\vec{v}, t)}{\partial \vec{v}} = \frac{1}{2T} \frac{\partial T}{\partial \vec{v}} [\vec{v} T(\vec{v}, t)]. \quad (\text{E.31})$$



De forma que (3.44) se transforme en:

$$-\frac{1}{2T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} [\vec{v}T(\vec{v}, t)] = \mathcal{L}[T_g] F_H(\vec{v}, t). \quad (\text{E.32})$$

Sustituyendo la forma funcional de  $\mathcal{L}[T_g]$ , Ec.(3.44), y la de la temperatura  $T(t)$ , Ec.(3.54), obtenemos:

$$\left\{ -\gamma_e a_0^2 \frac{T}{T_g} + \gamma_e a_0 \right\} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} [\vec{v}F_H(\vec{v}, t)] = \gamma_e a_0(\alpha) \left[ \vec{v} + \frac{k_B T_g}{n} a_0(\alpha) \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right] F_H(\vec{v}, t). \quad (\text{E.33})$$

Simplificando esta ecuación convenientemente y agrupando los términos, llegamos a la Ec.(3.60). Se puede comprobar que la distribución Gaussiana (3.61) es solución de esta ecuación, por lo que efectivamente la forma funcional  $F_H(\vec{v}, t)$  de la Ec.(3.61) cumple la ecuación del estado de enfriamiento homogéneo de la partícula marcada.

## E.3 Ecuaciones de evolución de los campos hidrodinámicos

### E.3.1 Velocidad

Definimos la velocidad media de la browniana  $\vec{u}(t)$  de la forma habitual:

$$\vec{u}(t) = \int d\vec{r} \int d\vec{v} \vec{v} F(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (\text{E.34})$$

Vamos a buscar la ecuación de evolución de la velocidad a partir de la de evolución de  $F(\vec{r}, \vec{v})$ , Ec.(3.44),

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = \int d\vec{r} \int d\vec{v} \vec{v} \left\{ -(\vec{v} \cdot \nabla) + \gamma_e(T_g) a_0(\alpha) \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \vec{v} + \frac{k_B T_g}{m} a_0^2 \gamma_e(T_g) \frac{\partial^2}{\partial \vec{v}^2} \right\} F(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (\text{E.35})$$

Teniendo en cuenta que  $F$  es finita, de modo que se ha de anular como condición de contorno para los valores infinitos de las posiciones y velocidades, e integrando por partes, llegamos a la ecuación (3.51):

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -\gamma_e(T_g) a_0(\alpha) \int d\vec{r} \int d\vec{v} \vec{v} F(\vec{r}, \vec{v}, t) = -\gamma_e(T_g) a_0(\alpha) \vec{u}. \quad (\text{E.36})$$

### E.3.2 Temperatura

Partimos de la ecuación (3.49), definición de la temperatura de la partícula browniana;

$$\frac{d}{2}k_B T = \int d\vec{r} \int d\vec{v} \frac{1}{2} m (\vec{v} - \vec{u})^2 F(\vec{r}, \vec{v}, t) = \int d\vec{r} \int d\vec{v} \frac{1}{2} m (\vec{v}^2 - \vec{u}^2) F(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (E.37)$$

Diferenciando esta ecuación respecto al tiempo y teniendo en cuenta que  $F(\vec{r}, \vec{v}, t)$  está normalizada a la unidad:

$$\frac{d}{2} \frac{\partial k_B T(t)}{\partial t} = \frac{m}{2} \left\{ \frac{\partial \langle v^2 \rangle}{\partial t} - 2\vec{u} \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \right\}. \quad (E.38)$$

Vamos a necesitar, ver Ec.(3.44), calcular la integral:

$$\int d\vec{r} \int d\vec{v} v^2 \left\{ -(\vec{v} \cdot \nabla) + \gamma_e(T_g) a_0(\alpha) \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \vec{v} + \frac{k_B T_g}{m} a_0^2 \gamma_e(T_g) \frac{\partial^2}{\partial \vec{v}^2} \right\} F(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (E.39)$$

Teniendo en cuenta la homogeneidad de  $F$ , la definición de sus momentos e integrando por partes, se establecen los siguientes resultados útiles:

$$\int d\vec{v} v^2 \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \vec{v} F(\vec{v}) = -2 \int d\vec{v} v^2 F(\vec{v}) = -2 \langle v^2 \rangle, \quad (E.40)$$

$$\int d\vec{v} v^2 \frac{\partial^2}{\partial \vec{v}^2} F(\vec{v}) = 2d, \quad (E.41)$$

$$\int d\vec{r} \nabla F = 0, \quad (E.41)$$

que, una vez aplicados a (E.39), simplifican considerablemente la ecuación hasta,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle v^2 \rangle = -2\gamma_e a_0 \langle v^2 \rangle + 2d \frac{k_B T_g}{m} a_0^2 \gamma_e(T_g). \quad (E.42)$$

Sustituyendo (E.42) y (E.36) en (E.38) obtenemos:

$$\frac{d}{2} \frac{\partial k_B T}{\partial t} = \frac{m}{2} \left\{ -2\gamma_e(T_g) a_0(\alpha) \langle v^2 \rangle + \frac{2dk_B T_g}{m} a_0^2 \gamma_e(T_g) + 2\gamma_e(T_g) a_0 u^2 \right\}. \quad (E.43)$$

Con la segunda igualdad de la definición (E.37) podemos dejar la ecuación dependiente tan sólo de las temperaturas del gas y de la partícula marcada:

$$\begin{aligned} \frac{d}{2} \frac{\partial k_B T}{\partial t} &= \\ \frac{m}{2} \left\{ -2\gamma_e(T_g) a_0(\alpha) \left[ \frac{d}{m} k_B T + u^2 \right] + \frac{2dk_B T_g}{m} a_0^2 \gamma_e(T_g) + 2\gamma_e(T_g) a_0 u^2 \right\} & \quad (E.44) \\ &= -d\gamma_e(T_g) a_0(\alpha) k_B T + dk_B T_g a_0^2(\alpha) \gamma_e(T_g). \end{aligned}$$

Estamos interesados en la evolución temporal del cociente de temperaturas. Por ello, calculamos su derivada:

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t T_g(t)} = \frac{1}{T_g} \frac{\partial T(t)}{\partial t} + T(t) \left[ -\frac{1}{T_g^2} \right] \frac{\partial T_g}{\partial t}. \quad (\text{E.45})$$

Introducimos seguidamente la dependencia temporal de  $T_g$ , según la ecuación (B.15),

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t T_g(t)} = \frac{1}{T_g} \frac{\partial T(t)}{\partial t} + \zeta(T_g) \frac{T(t)}{T_g(T)}. \quad (\text{E.46})$$

Aprovechando el resultado (E.45), y reordenando un poco la ecuación, establecemos la relación

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} + (2\gamma_e a_0(\alpha) - \zeta) \right] \frac{T(t)}{T_g(t)} = 2\gamma_e a_0^2(\alpha), \quad (\text{E.47})$$

que puede simplificarse formalmente haciendo uso de la definición del parámetro  $\epsilon_0$ , Ec.(3.48),

$$\epsilon_0 = \frac{\zeta}{2a_0(\alpha)\gamma_e(T_g)}. \quad (\text{E.48})$$

De esta forma obtenemos por fin la ecuación que estábamos buscando, Ec.(3.52), de evolución del cociente de las temperaturas de la browniana y el gas que la circunda:

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} + 2\gamma_e a_0(\alpha)(1 - \epsilon_0) \right] \frac{T(t)}{T_g(t)} = 2\gamma_e(T_g) a_0^2(\alpha). \quad (\text{E.49})$$

### E.3.3 Solución de las ecuaciones hidrodinámicas

#### Velocidad

A fin de hacer explícita la dependencia temporal en la ecuación de evolución de la velocidad media de la browniana, sustituimos  $\gamma_e(T_g(t))$  por su expresión (3.46) en el estado de enfriamiento homogéneo:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = -a_0(\alpha)\gamma_e(T_g(0)) \frac{1}{1 + \frac{\zeta(0)}{2}t} \vec{u}, \quad (\text{E.50})$$

habiéndose considerado la evolución de la temperatura del gas en el HCS, Ec.(B.17).

Para resolver esta ecuación, consideramos cada componente y separamos las variables de integración a cada lado de la igualdad,

$$\frac{1}{u_i} \frac{du_i}{dt} = -\gamma(T_g(0)) a_0(\alpha) \frac{dt}{1 + \frac{\zeta(0)}{2}t}. \quad (\text{E.51})$$

Integrando cada una de las ecuaciones y haciendo la identificación de  $\epsilon_0$ , Ec.(3.48), se establece la dependencia algebraica de la velocidad respecto al tiempo:

$$\bar{u}(t) = \bar{u}(0) \left( 1 + \frac{\zeta(0)}{2} t \right)^{-\frac{1}{\epsilon_0}}. \quad (\text{E.52})$$

### Temperatura

Como en el apartado anterior, hacemos explícita la dependencia temporal en la ecuación (3.52) tras sustituir la dependencia temporal de  $T_g(t)$  en la expresión de  $\gamma_e(T_g)$ , y consideramos la variable  $y(t) = T(t)/T_g(t)$ , cuya ecuación de evolución es, por tanto:

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{2\gamma_e a_0(\alpha)(1 - \epsilon_0)}{1 + \frac{\zeta(0)}{2} t} y + \frac{2\gamma_e a_0(\alpha)^2}{1 + \frac{\zeta(0)}{2} t}. \quad (\text{E.53})$$

Ésta es sencilla de resolver por el método de variación de constantes. Se llega así a la ecuación (3.54), tras identificar el operador  $U(t)$ , definido en (3.55).

## Apéndice F

# Energía intercambiada entre una pared vibrante y el fluido granular

### F.1 Cálculo de la potencia suministrada por la pared

Vamos a mostrar un argumento sencillo que permite calcular la potencia que suministra la pared vibrante al sistema de la Figura 4.1. Para ello, considérense las reglas de colisión de las partículas con ella:

$$\begin{aligned}\vec{v}'_{\perp} &= \vec{v}_{\perp}, \\ \vec{v}'_x &= 2v_b - v_x,\end{aligned}\tag{F.1}$$

siendo la dirección del eje de las  $x$  perpendicular a la pared y  $\vec{v}_{\perp}$  la componente de la velocidad en las direcciones del plano de ésta. Como siempre, las primas representan las velocidades tras la colisión. Obsérvese que los razonamientos que vamos a seguir a continuación también son válidos en el caso de los sistemas de las Figuras 5.5 y 5.9, por lo que las conclusiones que de ellos obtengamos, serán también aplicables a estos últimos.

Haciendo uso de estas reglas, el cambio de la cantidad de momento y de la energía de las partículas que colisionan en función de la velocidad de la pared vibrante  $v_b$  son

$$\Delta p_x = 2m(v_b - v_x)\tag{F.2}$$

y

$$\Delta E = \frac{1}{2}m(\vec{v}'^2 - \vec{v}^2) = 2m(v_b - v_x)v_b,\tag{F.3}$$

respectivamente. Comparando ambas expresiones es fácil encontrar una relación entre ellas:

$$\Delta E = v_b \Delta p_x. \quad (\text{F.4})$$

La potencia que suministra la pared al sistema total se podrá calcular entonces sumando las contribuciones de todas las colisiones que se producen a lo largo del tiempo. Obsérvese que este sumatorio debe incluir tan sólo a las partículas que tienen una velocidad menor que la de la pared, porque de otra forma no alcanzan a chocar con ella:

$$P_b = \int_{v_x < v_b} d\vec{v} |v_x - v_b| S f(\vec{r}, \vec{v}) \Delta E. \quad (\text{F.5})$$

En esta expresión  $f$  es la función de distribución de las partículas del sistema y  $S$  la superficie de la pared (la longitud en el caso bidimensional). Por último, a partir de la interpretación cinética de la presión  $p$ ,

$$p = \int_{v_x < v_b} d\vec{v} |v_x - v_b| f(\vec{r}, \vec{v}) \Delta p_x, \quad (\text{F.6})$$

y recordando la relación (F.4), establecemos la expresión de la potencia introducida al sistema a través de la pared vibrante:

$$p = \frac{P_b}{v_b S} = \frac{Q}{v_b}, \quad (\text{F.7})$$

donde hemos hecho uso del flujo de energía  $Q$ .

## F.2 Potencia disipada en el fluido granular

Veremos en esta sección que es posible obtener una expresión de la temperatura en la región del gas granular de la Figura 4.1 más próxima a la pared vibrante ( $T_0$ ) a partir del balance de energía que se produce en el estado estacionario. La energía que la pared vibrante introduce en el sistema se disipa debido a las colisiones inelásticas entre los granos. En esta situación, la potencia disipada en cada uno de los compartimentos puede ser calculada en la aproximación dinámica. Para ello, partimos de la definición,

$$D = \int d\vec{r} \frac{d}{2} n k_B T \zeta^{(0)} = \frac{d k_B}{2} \xi^*(\alpha) p \int d\vec{r} n(x) \frac{T(x)}{\eta_0(x)}, \quad (\text{F.8})$$

donde se ha hecho uso de la velocidad de enfriamiento, definida en la Ec.(2.29). Usando la ecuación de estado, la dependencia de  $\eta_0(T)$  respecto a la temperatura y la naturaleza monodimensional de ésta última en el problema, la expresión anterior se puede simplificar,

$$D = \frac{d \xi^*(\alpha) p^2 S T^{1/2}}{2 \eta_0} \int_0^L dx T^{-1/2}(x), \quad (\text{F.9})$$

siendo  $S$  la superficie de la pared que vibra. Antes de seguir con nuestro razonamiento, es conveniente observar que el cociente  $T_0^{1/2}/\eta_0$  es en realidad una constante del sistema, por lo que ha podido ser extraída de la integral anterior.

Si se tiene en cuenta la relación que existe entre  $x$  y la variable adimensional  $\xi$  (ver Ec.(5.2)) y la definición del recorrido cuadrático medio, Ec.(4.12), es fácil comprobar que la integral de la ecuación anterior es similar a ésta otra:

$$I = \int_0^{\xi_m} d\xi \frac{1}{\sqrt{a(\alpha)}C\sigma^{d-1}n(\xi)} T^{-1/2}(\xi) = \frac{k_B}{\sqrt{a(\alpha)}C\sigma^{d-1}p} \int_0^{\xi_m} d\xi T^{1/2}(\xi), \quad (\text{F.10})$$

donde se ha hecho uso de nuevo de la ecuación de estado y se ha introducido la presión del sistema  $p$ , que se considera constante en nuestra aproximación. Sustituyendo a continuación la expresión del perfil de temperatura, Ec.(4.33), la integral resultante es inmediata:

$$I = \frac{k_B}{\sqrt{a(\alpha)}C\sigma^{d-1}p} \int_0^{\xi_m} \frac{\cosh(\xi_m - \xi)}{\cosh \xi_m} = \frac{k_B T_0^{1/2}}{C\sqrt{a(\alpha)}\sigma^{d-1}p} \tanh \xi_m. \quad (\text{F.11})$$

Y la expresión de la potencia disipada en el sistema resulta, por lo tanto:

$$D = \frac{d\xi^*(\alpha)pS T^{1/2}}{2} \frac{k_B T_0^{1/2}}{\eta_0 C\sqrt{a(\alpha)}\sigma^{d-1} \tanh \xi_m}. \quad (\text{F.12})$$

Es posible establecer una relación entre esta potencia y la velocidad de la pared vibrante. Del balance de energía que se establece en el estado estacionario entre la que le suministra la pared,  $v_b p S$  según se vio en la sección anterior de este mismo apéndice, y la que se disipa,  $D$ , resulta:

$$T_0^{1/2} = \frac{2C\sqrt{a(\alpha)}\sigma^{d-1}v_b}{d\xi^*(\alpha)k_B} \frac{\eta_0}{T^{1/2} \tanh \xi_m}. \quad (\text{F.13})$$

Y sustituyendo el valor de  $\eta_0$  en función de los parámetros del sistema, Ec.(2.23), encontramos la expresión para la temperatura del gas granular en la pared vibrante en función de los parámetros que definen al sistema:

$$T_0^{1/2} = \frac{(d+2)C\sqrt{a(\alpha)}\Gamma(d/2)\pi^{-\frac{d-1}{2}}m^{1/2}}{4d\xi^*(\alpha)k_B^{1/2}} \frac{v_b}{\tanh \xi_m}. \quad (\text{F.14})$$

### F.2.1 Sistema con dos compartimentos

A partir de los resultados anteriores, vamos a calcular la potencia que se disipa por unidad de tiempo en el sistema de la Figura 5.5. Ésta es igual a la

que le suministra la pared, que puede separarse en sus contribuciones a uno y otro lado de la pared divisoria:

$$P_b = v_b S p^{(i)} + v_b S p^{(d)}. \quad (\text{F.15})$$

Como existe equilibrio termodinámico entre ambos compartimentos, la presión en ambos lados debe ser la misma y lo mismo cabe decir sobre las temperaturas en las cercanías de la pared. Hacemos uso de la ecuación (4.34) y de la condición  $\xi_m^{(i)} + \xi_m^{(r)} = 2\xi_m$ , para expresar la potencia disipada en función del parámetro de orden:

$$P_b = \frac{v_b S k_B e^2}{c\sigma^{d-1} L \sqrt{a(\alpha)}} [\tanh \xi_m^{(i)} + \tanh \xi_m^{(d)}]^2 \times \left[ \frac{2\xi_m^{(i)} + \sinh(2\xi_m^{(i)})}{\cosh^2 \xi_m^{(i)}} + \frac{2(2\xi_m - \xi_m^{(i)}) + \sinh(2(2\xi_m - \xi_m^{(i)}))}{\cosh^2(2\xi_m - \xi_m^{(i)})} \right] \quad (\text{F.16})$$

Consideremos a continuación la función  $h(\xi) = g(\xi) + g(2\xi_m - \xi)$  donde,

$$g(\xi) = \frac{2\xi + \sinh(2\xi)}{\cosh^2 \xi} [\tanh \xi + \tanh(2\xi_m - \xi)]^2, \quad (\text{F.17})$$

y cuya derivada es,

$$\frac{dh(\xi)}{d\xi} = \frac{-2\xi \sinh(4\xi_m - 2\xi) - (2\xi_m - \xi) \sinh(2\xi)}{2(\sinh \xi_m)^2}. \quad (\text{F.18})$$

Se puede observar entonces que  $\frac{dh(\xi)}{d\xi} = 0$  para  $\xi = \xi_m$ , pues en ese caso se anula el numerador. Es más, se puede comprobar que  $\xi = \xi_m$  es un mínimo de esta función. De modo que para cualquier valor  $0 < \xi < 2\xi_m$  se cumple,  $h(\xi) > h(\xi_m)$ , dándose el caso  $h(\xi) = h(\xi_m)$  si y solo si  $\xi = \xi_m$ .

En función de  $h(\xi)$ , podemos expresar la potencia disipada,

$$P_b = \frac{v_b S k_B e^2}{c\sigma^{d-1} L \sqrt{a(\alpha)}} \times h(\xi). \quad (\text{F.19})$$

Aplicando ahora las propiedades de la función  $h(\xi)$ , se comprueba que la energía disipada por las colisiones en cualquier situación asimétrica de las partículas en los compartimentos es mayor que la que se produce en el caso simétrico, si las temperaturas en las cercanías de la pared vibrante se consideran iguales. Esto es válido, por supuesto, en el régimen de equilibrio hidrodinámico, en el que la presión en ambos compartimentos es la misma, puesto que es a él al que se restringe el desarrollo teórico propuesto.



### F.2.2 Sistema con tres compartimentos

La potencia disipada en el sistema completo de la Figura 5.9 es la suma de las potencias que se disipan en cada uno de los compartimentos. Por otro lado hemos visto que la potencia que suministra la pared vibrante al sistema se puede descomponer igualmente en las contribuciones,

$$P_b = \sum_{i=1}^3 P_b^{(i)}. \quad (F.20)$$

Estas contribuciones se pueden calcular haciendo uso de los resultados obtenidos en este mismo apéndice, Ec.(F.16):

$$P_b = \frac{v_b S k_B e^2}{C \sigma^{d-1}} \frac{1}{\left[ \sum_{i=1}^3 \tanh \xi_m^{(i)} \right]^2} \sum_{i=1}^3 \frac{2\xi_m^{(i)} + \sinh[2\xi_m^{(i)}]}{\cosh^2[\xi_m^{(i)}]}. \quad (F.21)$$

Igualando la potencia disipada a la potencia que suministra la pared en el estado estacionario y haciendo uso de la expresión (F.12) para cada compartimento, podemos establecer una expresión para  $T_0$  similar a la de la ecuación (F.14) válida para problema con dos compartimentos,

$$T_0^{1/2} = \frac{(d+2)C \sqrt{a(\alpha)} \Gamma(d/2) \pi^{-\frac{d-1}{2}} m^{1/2}}{4d \xi^*(\alpha) k_B^{1/2}} \frac{1}{\tanh \xi_m^{(1)} + \tanh \xi_m^{(2)} + \tanh \xi_m^{(3)}}. \quad (F.22)$$

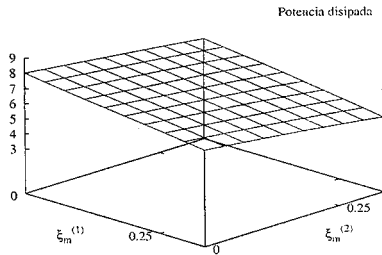


Figura F.1: Forma funcional de la potencia disipada en el sistema con tres compartimentos, en función de los valores de la variable escalada  $\xi$  en dos de ellos.

El significado de las variables es el mismo que antes. Recordemos además que las variables  $\xi_m^{(i)}$  están ligadas por la condición de que se conserve el número total de partículas, Ec.(5.11). Por ello, tanto la potencia disipada como la temperatura del gas  $T_0$  son funcionales tan sólo de dos de las variables  $\xi_m^{(i)}$ . En la Figura F.1 representamos la función (F.21) como función de  $\xi_m^{(1)}$  y  $\xi_m^{(2)}$ . Se puede observar con toda claridad que la función presenta un máximo en la región asimétrica, en la que  $\xi_m^{(1)} = \xi_m^{(2)} < 1/3$ , frente a los valores  $\xi_m^{(1)} = \xi_m^{(2)} = 1/3$  y  $\xi_m^{(1)} = \xi_m^{(2)} > 1/3$ . Dado que el sistema muestra en las simulaciones una tendencia espontánea a la configuración asimétrica en la que dos de los compartimentos están relativamente vacíos, comprobamos que el sistema tiende naturalmente a la configuración en la que la potencia que se disipa es máxima.

# Apéndice G

## Aproximación WKB

Las ecuaciones diferenciales del tipo,

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} + f(x)\phi = 0, \quad (G.1)$$

pueden resolverse analíticamente de forma aproximada mediante el método WKB, llamado así según las iniciales de los científicos que propusieron su uso en el campo de la mecánica cuántica, G. Wentzel, H.A. Kramers y L. Brioullin. Aunque nos restringiremos al problema monodimensional, el método puede usarse en problemas tridimensionales si el potencial tiene simetría esférica y se puede establecer una ecuación diferencial radial. Obsérvese que la ecuación (6.28) del Capítulo 6 es un ejemplo particular del tipo de ecuación diferencial que admite el tratamiento que pasamos a explicar.

La idea básica del método es simple: supongamos el caso particular de que la función  $f(x)$  fuese constante. En ese caso la solución de (G.1) es conocida, siendo  $e^{\pm i\sqrt{f}x}$ . Esto sugiere que, si  $f$  deja de ser constante, pero varía muy lentamente con la variable independiente, podríamos intentar buscar soluciones de la ecuación con la forma  $\phi(x) = e^{iu(x)}$ , donde  $u(x)$  es una función que no es lineal en  $x$ . Consideremos a continuación la expansión de esta función en un parámetro  $\epsilon$  que haremos tender a cero posteriormente. En este caso,

$$\phi(x) = e^{i \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n u_n(x)}. \quad (G.2)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (G.1), encontramos la siguiente serie de ecuaciones,

$$\epsilon \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n u_n''(x) + \left( \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n u_n'(x) \right)^2 + f(x) = 0. \quad (G.3)$$

Separando cada uno de los órdenes del parámetro  $\epsilon$ , se obtiene una cadena de ecuaciones diferenciales en la que la ecuación de orden  $n$  está acoplada con la inmediatamente anterior, siendo las dos primeras ecuaciones de esta serie:

$$u_0'^2 = -f(x), \tag{G.4}$$

$$u_0'' + 2u_0'u_1' = 0, \tag{G.5}$$

cuyas soluciones son, respectivamente; si  $f(x)$  es positiva:

$$u_0(x) = \pm i \int_0^x dx' \sqrt{f(x')} + c_1, \tag{G.6}$$

$$u_1 = -\frac{1}{2} \ln(\sqrt{f(x)}) + c_2. \tag{G.7}$$

y

$$u_0(x) = \pm \int_0^x dx' \sqrt{f(x')} + c_1, \tag{G.8}$$

$$u_1 = -\frac{1}{2} \ln(\sqrt{f(x)}) + c_2, \tag{G.9}$$

si  $f$  es negativa en su dominio. En ambos casos,  $c_1$  y  $c_2$  son dos constantes cualesquiera. Los dobles signos señalados en las ecuaciones vienen a representar dos familias de soluciones independientes. Sustituyendo estas expresiones en la expansión propuesta, Ec. (G.2), y truncando ahí el desarrollo obtenemos una solución aproximada a la ecuación (G.1). Combinando las soluciones convenientemente, tendremos que para el caso en que  $f$  sea positiva:

$$\phi(x) \simeq e^{u_0^+(x)+u_1(x)} = \frac{d_1}{f^{1/4}} \exp \left\{ i \int_0^x dx' \sqrt{f(x')} \right\} + \frac{d_2}{f^{1/4}} \exp \left\{ -i \int_0^x dx' \sqrt{f(x')} \right\}. \tag{G.10}$$

Mientras que en el otro caso,

$$\phi(x) \simeq e^{u_0^-(x)+u_1(x)} = \frac{d_1}{f^{1/4}} \exp \left\{ \int_0^x dx' \sqrt{f(x')} \right\} + \frac{d_2}{f^{1/4}} \exp \left\{ - \int_0^x dx' \sqrt{f(x')} \right\}. \tag{G.11}$$

Es nuestra esperanza que la aproximación hecha converja al valor correcto de  $u(x)$ . Para que esto ocurra, se debe cumplir que  $|u_1(0)| \ll |u_0(x)|$ . Dado que ambas funciones son crecientes en  $x$ , podemos trasladar esta condición a las derivadas, de modo que también se tiene que cumplir  $|u_1'(x)| \ll |u_0'(x)|$ . Esto último se puede expresar de manera sencilla, a partir de las ecuaciones (G.6)

y (G.7), con ayuda de una nueva función  $g(x)$  que definimos a continuación a partir de  $f(x)$ :

$$g(x) = \sqrt{f(x)}. \quad (\text{G.12})$$

Teniendo en cuenta esta definición, la aproximación hecha nos restringe al caso

$$|g'(x)| \ll |g(x)^2|. \quad (\text{G.13})$$

Físicamente, la aproximación será válida en la región en que  $f(x)$  varía con suficiente lentitud. En particular, esta condición se rompe claramente en el caso de que  $g(x)$  se anule. Por ello, en el entorno de un cero de la función se ha de realizar un tratamiento más exacto, para lo cual se hace uso de las conocidas como *fórmulas de conexión*, que pasamos a describir.

## G.1 Fórmulas de conexión

Supongamos un punto  $a$  en el que la función  $f(x)$  se anula. Caben entonces claramente dos posibilidades: que la función sea positiva para puntos  $x < a$  o que sea negativa. Consideraremos el primer caso, aunque los resultados que obtendremos son fácilmente trasladables al segundo.

Si suponemos la validez de la aproximación WKB salvo en el entorno próximo al cero de la función, conocemos que la forma asintótica de la función  $\phi$ , solución de la ecuación (G.1), es:

$$\phi(x) = \frac{A}{i\sqrt{g(x)}} \exp \left[ -\int_a^x dx' g(x') \right] + \frac{B}{i\sqrt{g(x)}} \exp \left[ \int_a^x dx' g(x') \right] \quad \text{para } x \gg a, \quad (\text{G.14})$$

y

$$\phi(x) = \frac{C}{\sqrt{g(x)}} \exp \left[ -i \int_a^x dx' g(x') \right] + \frac{D}{\sqrt{g(x)}} \exp \left[ i \int_a^x dx' g(x') \right] \quad \text{para } x \ll a. \quad (\text{G.15})$$

El límite inferior de las integrales en los exponentes ha sido elegido arbitrariamente, porque nos conviene para que el significado de las amplitudes  $A, B, C$  y  $D$  no sea ambiguo. A continuación nos preguntamos cómo están relacionados los coeficientes  $C$  y  $D$  con los otros dos,  $A$  y  $B$ , si ambas expresiones representan el mismo estado. Para establecer la relación, deberemos resolver la ecuación de una forma más precisa. Aunque esto es susceptible de realizarse siempre de manera numérica, pretendemos hacer un desarrollo analítico, para

lo que supondremos que la función  $f$ , en un entorno suficientemente cercano a  $x = a$ , se comporta linealmente:

$$f(x) \simeq g(x - a), \quad (\text{G.16})$$

siendo  $g$  una constante positiva. La ecuación (G.1) para ésta,

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + g(x - a)\phi = 0, \quad (\text{G.17})$$

se transforma de forma apropiada con la translación  $z = -g^{1/3}(x - a)$ , en

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} - z\phi = 0, \quad (\text{G.18})$$

siendo sus soluciones las funciones de Airy [152],  $Ai(z)$  y  $Bi(z)$ , cuyas expresiones asintóticas en la región de valores positivos y muy grandes de  $z$  son:

$$Ai(z) \simeq \frac{1}{2}\pi^{-1/2}z^{-1/4}e^{-\varsigma}, \quad (\text{G.19})$$

y

$$Bi(z) \simeq \pi^{-1/2}z^{-1/4}e^{\varsigma}. \quad (\text{G.20})$$

Donde,

$$\varsigma = \frac{2}{3}|z|^{3/2}. \quad (\text{G.21})$$

Para valores grandes de  $z$  negativos, las funciones en cambio tienden a:

$$Ai(z) \simeq \pi^{-1/2}|z|^{-1/4} \cos\left(\varsigma - \frac{\pi}{4}\right), \quad (\text{G.22})$$

$$Bi(z) \simeq -\pi^{-1/2}|z|^{-1/4} \sin\left(\varsigma - \frac{\pi}{4}\right). \quad (\text{G.23})$$

Se puede comprobar que, salvo en la zona en la que  $z \simeq 0$ , estas expresiones concuerdan muy bien con los valores asintóticos obtenidos mediante la aproximación WKB. Comparando las expresiones asintóticas de las funciones de Airy, con las soluciones (G.14) y (G.15), comprobamos que necesitamos conocer el valor de la integral:

$$\int_x^a dxg(x). \quad (\text{G.24})$$

Teniendo en cuenta la forma de la función que consideramos, Ec.(G.16), y las definiciones de  $z = g^{1/3}(x - a)$  y  $\varsigma$ , Ec.(G.21), es fácil llegar a:

$$\int_x^a dxg(x) = \frac{2}{3}g^{1/2}(a - x)^{3/2} = \frac{2}{3}|z|^{3/2} = \varsigma, \quad (\text{G.25})$$

que vale para  $z < 0$ .

Haciendo uso de esto, podemos escribir la ecuación (G.14) en función de los valores asintóticos de las funciones de Airy,

$$\phi = \frac{2A\pi^{1/2}}{g^{1/2}} Ai(z) + \frac{B\pi^{1/2}}{g^{1/2}} Bi(z). \quad (G.26)$$

En el caso contrario, cuando  $z > 0$  y  $f < 0$

$$\int_x^a dx \imath g(x) = \frac{2}{3} g^{1/2} (x-a)^{3/2} = \frac{2}{3} |z|^{3/2} = \zeta. \quad (G.27)$$

Identificando las constantes que multiplican a las funciones de Airy en la expresión (G.26) y llevándolas al límite asintótico opuesto, tenemos que, según la forma asintótica de las funciones de Airy en el límite  $x \ll a$ ,

$$\phi(x) \simeq \frac{2A\pi^{1/2}}{g(x)^{1/2}} \pi^{-1/2} |z|^{-1/2} \cos\left(\zeta - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{B\pi^{1/2}}{g^{1/2}} \pi^{-1/2} \sin\left(\zeta - \frac{\pi}{4}\right). \quad (G.28)$$

Recordando la expresión (G.15) podemos establecer la relación que une a las relaciones asintóticas a uno y otro lado del punto  $a$ :

$$\begin{aligned} \frac{2A}{\sqrt{g}} \cos\left(\int_x^a g(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{B}{\sqrt{g}} \sin\left(\int_x^a g(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \Rightarrow \\ \frac{A}{\imath\sqrt{g(x)}} \exp\left(-\int_a^x \imath g(x') dx'\right) + \frac{B}{\imath\sqrt{g(x)}} \exp\left(\int_a^x \imath g(x') dx'\right). \end{aligned} \quad (G.29)$$

En el caso de que el cero de la función  $f(x)$  fuese tal, que  $f$  fuese positiva para valores por debajo de él,  $x < a$ , se puede hacer un desarrollo similar, estableciéndose entonces la siguiente fórmula de conexión:

$$\begin{aligned} \frac{A}{\imath\sqrt{g(x)}} \exp\left(-\int_x^b \imath g(x') dx'\right) + \frac{B}{\imath\sqrt{g(x)}} \exp\left(\int_x^b \imath g(x') dx'\right) \Rightarrow \\ \frac{2A}{\sqrt{g(x)}} \cos\left(\int_b^x g(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{B}{\sqrt{g(x)}} \sin\left(\int_b^x g(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned} \quad (G.30)$$

Obsérvese que es esencial ser cuidadoso a la hora de usar estas fórmulas de conexión. Es peligroso, en particular, despreciar la contribución de alguno de los términos de la solución asintótica en alguna de las regiones, aún cuando su contribución sea pequeña, ya que su importancia puede ser vital en la zona opuesta. Por otro lado, las fórmulas de conexión no son válidas si existen dos ceros de la función  $f$  próximos entre sí. Esto ocurre, por ejemplo, si el cero se encuentra en las cercanías de un extremo de la función. En estos casos, hay que recurrir a métodos más precisos de resolución de la ecuación. Por último indiquemos, que hemos asumido en todo momento que  $g(x)$  es una función analítica o, respectivamente, que lo es  $f$ .

## G.2 Resolución de la ecuación (6.28)

### G.2.1 Solución oscilatoria

Estamos en el caso  $f(\xi_x) > 0$ , siendo  $0 < \xi_x < \xi_x^*$ . Dada la naturaleza de  $f(\xi_x)$ , Ec.(6.29), esto implica que  $f(0) > 0$ . Definimos,  $g(\xi_x) = \sqrt{f(\xi_x)}$ , de modo que la ecuación (6.28) se transforme,

$$\frac{d^2\phi(\xi_x)}{d\xi_x^2} + g(\xi_x)^2\phi(\xi_x) = 0, \quad (\text{G.31})$$

cuya solución WKB, según (G.15), tendrá la forma,

$$\phi(\xi_x) = \frac{c_1}{\sqrt{g(\xi_x)}} \exp \left[ i \int_0^{\xi_x} d\xi'_x g(\xi'_x) \right] + \frac{c_2}{\sqrt{g(\xi_x)}} \exp \left[ -i \int_0^{\xi_x} d\xi'_x g(\xi'_x) \right]. \quad (\text{G.32})$$

De la definición de  $g(\xi_x)$  se desprende que,

$$g'(\xi_x) = \frac{1}{2f^{1/2}(\xi_x)} f'(\xi_x), \quad (\text{G.33})$$

y como  $f(\xi_x^*) = 0$ , deducimos que  $g'(\xi_x^*) = 0$ . Con estos resultados la ecuación de contorno (6.24) aplicada a (G.31) conduce a la siguiente relación entre las constantes,

$$c_2 = c_1 \left\{ \exp \left[ i \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x g(\xi_x) \right] \right\}^2. \quad (\text{G.34})$$

Y llamando  $A = \exp \left[ i \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x g(\xi_x) \right]$  es fácil obtener,

$$\phi(\xi_x) = \frac{2A}{\sqrt{g(\xi_x)}} \cos \left[ \int_{\xi_x}^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) \right]. \quad (\text{G.35})$$

A continuación debemos aplicar la otra condición de contorno, Ec.(6.16). Para ello vamos a necesitar hacer uso de,

$$\phi(0) = \frac{2A}{\sqrt{g(0)}} \cos \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x), \quad (\text{G.36})$$

$$\phi'(\xi_x) = -\frac{Ag'(\xi_x)}{g(\xi_x)^{3/2}} \cos \int_{\xi_x}^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) + \frac{2A}{\sqrt{g(\xi_x)}} g(\xi_x) \sin \int_{\xi_x}^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x). \quad (\text{G.37})$$

Con su ayuda llegamos a la siguiente expresión, al aplicar la ecuación de contorno formulada en la relación (6.15),

$$[2g(0) \tanh \xi_x^* + g'(0)] \cos \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) - 2g(0)^2 \sin \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) = 0. \quad (\text{G.38})$$



Manipulando esta ecuación y haciendo uso de (G.33) tenemos,

$$\tan \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) = \frac{1}{2g(0)^3} \left[ 2(\tanh \xi_x^*)f(0) + \frac{f'(0)}{2} \right]. \quad (G.39)$$

Tras aplicar la definición de  $f$ , Ec.(6.29), y efectuar su derivada, llegamos por fin a la relación de consistencia (6.35),

$$\tan \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) = \frac{3 \tanh \xi_x^*}{g^3(0) \cosh^2 \xi_x^*}. \quad (G.40)$$

En el caso de que la pared fuese térmica, la ecuación de contorno a imponer en  $x = 0$  habría de ser  $\phi(0) = 0$ , en lugar de (6.16), de modo que, según la ecuación (G.35), la condición es:

$$\cos \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) = 0 \quad (G.41)$$

cuyas soluciones son los valores naturales  $q = 0, 1, \dots$  que cumplen

$$\int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) = (2q + 1) \frac{\pi}{2}. \quad (G.42)$$

## G.2.2 Solución exponencial

Corresponde al caso  $f(\xi_x) < 0$ , siendo  $0 < \xi_x < \xi_x^*$ . De forma análoga al caso anterior, la forma funcional de  $f(\xi_x)$ , recogida en la Ec.(6.29), implica que  $f(\xi_x^*) < 0$ . Definimos,  $h(\xi_x) = \sqrt{-f(\xi_x)}$ , de modo que la ecuación (6.28) se transforme,

$$\frac{d^2 \phi(\xi_x)}{d\xi_x^2} - h(\xi_x)^2 \phi(\xi_x) = 0, \quad (G.43)$$

cuya solución WKB, según (G.14), tendrá la forma,

$$\phi(\xi_x) = \frac{c_1}{\sqrt{h(\xi_x)}} \exp \left[ \int_0^{\xi_x} d\xi'_x h(\xi'_x) \right] + \frac{c_2}{\sqrt{h(\xi_x)}} \exp \left[ - \int_0^{\xi_x} d\xi'_x h(\xi'_x) \right]. \quad (G.44)$$

También ahora, vamos a necesitar conocer la expresión explícita de la derivada de la función  $h(\xi_x)$ :

$$h'(\xi_x) = - \frac{1}{2h(\xi_x)} f'(\xi_x). \quad (G.45)$$

Dado que  $f(\xi_x^*) = 0$ , deducimos que  $h'(\xi_x^*) = 0$ . Con estos resultados la ecuación de contorno (6.24) aplicada a la relación (6.31) conduce a la siguiente relación entre las constantes,

$$c_2 = c_1 \left\{ \exp \left[ \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x) \right] \right\}^2. \quad (G.46)$$

Llamando  $B = c_1 \exp \left[ i \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x h(\xi_x) \right]$  es fácil obtener,

$$\phi(\xi_x) = \frac{2B}{\sqrt{h(\xi_x)}} \cosh \left[ \int_{\xi_x}^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x) \right]. \quad (\text{G.47})$$

A continuación debemos aplicar la otra condición de contorno, Ec. (6.16). Para ello necesitaremos calcular,

$$\phi(0) = \frac{2B}{\sqrt{h(0)}} \cos \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x), \quad (\text{G.48})$$

$$\begin{aligned} \phi'(\xi_x) = & -\frac{Bh'(\xi_x)}{h(\xi_x)^{3/2}} \cosh \int_{\xi_x}^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x) \\ & - \frac{2B}{\sqrt{h(\xi_x)}} h(\xi_x) \sinh \int_{\xi_x}^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x). \end{aligned} \quad (\text{G.49})$$

Con ayuda de estas expresiones y tras aplicar la ecuación de contorno (6.15), encontramos la siguiente relación:

$$[-2h(0) \tanh \xi_x^* - h'(0)] \cos \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x) - 2h(0)^2 \sinh \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x) = 0, \quad (\text{G.50})$$

que aún puede ser simplificada. Tras hacer uso de (G.45) en la ecuación anterior y modificarla un poco obtenemos:

$$\tanh \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x) = \frac{1}{2h(0)^3} \left[ 2(\tanh \xi_x^*) f(0) + \frac{f'(0)}{2} \right]. \quad (\text{G.51})$$

Acudimos seguidamente a la definición de  $f$ , Ec.(6.29), y tomamos su derivada, para llegar a la ecuación de consistencia (6.40),

$$\tanh \int_0^{\xi_x^*} d\xi_x h(\xi_x) = \frac{3 \tanh \xi_x^*}{h^3(0) \cosh^2 \xi_x^*}. \quad (\text{G.52})$$

Si la pared que excita el sistema fuese térmica, la ecuación de contorno impuesta en  $x = 0$  habría sido  $\phi(0) = 0$  en lugar de (6.16) y de la ecuación (G.47), la condición a cumplir por  $\xi_x^*$  ha de ser:

$$\cosh \int_0^{\xi_x^*} d\xi'_x h(\xi'_x) = 0, \quad (\text{G.53})$$

que no tiene solución.

### G.2.3 Cambio de signo.

Cuando la función  $f(\xi_x)$  cambia de signo en el intervalo,  $0 < \xi_x < \xi_x^*$ , hay que acudir a las fórmulas de conexión para construir la solución WKB. Obsérvese que como  $f$  es monótonamente creciente, solo se puede anular cuando  $f(0) < 0$  y  $f(\xi_x^*) > 0$  luego, de los dos tipos de fórmulas de conexión vistas, la Ec.(G.29) es la válida en este caso.

Sea  $x = a$  el punto del intervalo de interés en el que la función se anula,  $f(a) = 0$ . Sabemos que para puntos  $x \gg a$ , la solución WKB es oscilatoria y tiene la forma,

$$\phi(\xi_x) = \frac{c_1}{\sqrt{g(\xi_x)}} \exp \left[ i \int_0^{\xi_x} d\xi'_x g(\xi'_x) \right] + \frac{c_2}{\sqrt{g(\xi_x)}} \exp \left[ -i \int_0^{\xi_x} d\xi'_x g(\xi'_x) \right]. \quad (\text{G.54})$$

En el límite opuesto,  $x \ll a$ , la función es exponencial,

$$\phi(\xi_x) = \frac{d_1}{\sqrt{h(\xi_x)}} \exp \left[ \int_0^{\xi_x} d\xi'_x h(\xi'_x) \right] + \frac{d_2}{\sqrt{h(\xi_x)}} \exp \left[ - \int_0^{\xi_x} d\xi'_x h(\xi'_x) \right], \quad (\text{G.55})$$

donde  $c_1, c_2, d_1, d_2$  son constantes cualesquiera y las funciones  $f$  y  $h$  han sido definidas anteriormente. La solución de la ecuación debe cumplir en el punto  $\xi_x = \xi_x^*$  la condición de contorno expresada en la ecuación (6.15), por lo que debemos imponer a (G.54) que sea compatible con ella. De las secciones anteriores sabemos que esto conduce a que la solución WKB para  $x \gg a$  sea,

$$\phi(\xi_x) = \frac{2A}{\sqrt{g(\xi_x)}} \cos \left[ \int_{\xi_x}^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) \right]. \quad (\text{G.56})$$

Por conveniencia, vamos a reescribir la ecuación anterior partiendo el intervalo de integración y aplicando una fórmula trigonométrica apropiada,

$$\phi(\xi_x) = \frac{2A}{\sqrt{g(\xi_x)}} \cos \left[ \int_a^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x) - \int_a^{\xi_x} d\xi'_x g(\xi'_x) \right] = \frac{2A}{\sqrt{g(\xi_x)}} [\cos \theta_m \cos \theta + \sin \theta_m \sin \theta], \quad (\text{G.57})$$

donde hemos introducido la notación,

$$\theta_m = \int_a^{\xi_x^*} d\xi'_x g(\xi'_x), \quad (\text{G.58})$$

$$\theta = \int_a^{\xi_x} d\xi'_x g(\xi'_x). \quad (\text{G.59})$$

Obsérvese que, llegados a este punto, para aplicar la fórmula de conexión (G.29) con mayor sencillez, estaremos interesados en expresar  $\phi$  en la región  $x \gg a$  con la siguiente forma,

$$\phi(\xi_x) = \frac{2M}{\sqrt{g(\xi_x)}} \cos \theta + \frac{2N}{\sqrt{g(\xi_x)}} \sin \theta, \quad (\text{G.60})$$

lo que, como se puede comprobar, se consigue tomando las siguientes constantes,

$$M = \frac{A}{\sqrt{2}} (\cos \theta_m + \sin \theta_m), \quad (\text{G.61})$$

$$N = \sqrt{2} A (\cos \theta_m - \sin \theta_m). \quad (\text{G.62})$$

La fórmula de conexión (G.29) nos asegura que la forma asintótica de la función en el rango  $\xi_x \ll a$  es,

$$\phi(\xi_x) = \frac{M}{\sqrt{h(\xi_x)}} \exp \left[ - \int_{\xi_x}^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right] + \frac{N}{\sqrt{h(\xi_x)}} \exp \left[ \int_{\xi_x}^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right]. \quad (\text{G.63})$$

Si aplicamos en  $x = 0$  la condición de contorno de una pared térmica,  $\phi(0) = 0$ , entonces,

$$\phi(\xi_x) = M \exp \left[ - \int_0^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right] + N \exp \left[ \int_0^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right]. \quad (\text{G.64})$$

Tras sustituir las expresiones de  $M$  y  $N$  en función de  $\theta$  y  $\theta_m$  y después de hacer algunas operaciones con ayuda de nuevas identidades trigonométricas,

$$\cos \theta_m + \sin \theta_m = \sqrt{2} \cos \left( \frac{\pi}{4} - \theta_m \right), \quad (\text{G.65})$$

$$\cos \theta_m - \sin \theta_m = \sqrt{2} \sin \left( \frac{\pi}{4} - \theta_m \right) \quad (\text{G.66})$$

se llega a la condición:

$$\tan \left( \frac{\pi}{4} - \theta_m \right) = - \frac{1}{2} \exp \left[ - 2 \int_0^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right]. \quad (\text{G.67})$$

En el caso de que la pared en  $x = 0$  vibre, según la condición de contorno de la ecuación (6.16), la relación que debe cumplir la solución (G.60) en el plano de la pared es:

$$\begin{aligned} & - \tanh \xi_x^* \times \left[ \frac{M}{\sqrt{h(0)}} \exp \left( - \int_0^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right) + \frac{N}{\sqrt{h(0)}} \exp \left( \int_0^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right) \right] \\ & - \frac{M}{2h^{3/2}(0)} h'(0) \exp \left( - \int_0^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right) + \frac{M}{h(0)^{1/2}} h(0) \exp \left( - \int_0^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right) \\ & - \frac{N}{2h^{3/2}(0)} h'(0) \exp \left( \int_0^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right) - \frac{N}{h(0)^{1/2}} h(0) \exp \left( \int_0^a d\xi'_x h(\xi'_x) \right) ] = 0. \end{aligned} \quad (\text{G.68})$$

Haciendo uso de nuevo de las ecuaciones (G.65) y (G.66),  $M$  y  $N$  se pueden relacionar de manera sencilla

$$\frac{M}{N} = \frac{1 \cos \theta_m + \sin \theta_m}{2 \cos \theta_m - \sin \theta_m} = \frac{1}{2} \cot \left( \frac{\pi}{4} - \theta_m \right). \quad (\text{G.69})$$

Sustituyendo esta relación en la ecuación (G.68), y tras un pequeño desarrollo de la expresión, que incluye tener en cuenta la forma explícita de  $f(0)$  y  $f'(0)$ , llegamos a la relación de consistencia que estábamos buscando:

$$\frac{1}{2} \cot \left( \frac{\pi}{4} - \theta \right) \frac{6 \tanh \xi_x^* + 2h^3(0) \cosh^2 \xi_x^*}{6 \tanh \xi_x^* - 2h^3(0) \cosh^2 \xi_x^*} = \exp \left[ -2 \int_0^a d\xi_x' h(\xi_x') \right], \quad (\text{G.70})$$

que coincide con la presentada en la ecuación (6.43).

# Bibliografía

- [1] H. J. Schlichting y V. Nordmeier, *MNU* **49**, 323 (1996).
- [2] J. V. Cleef, *American Scientist* **79**, 304 (1991).
- [3] H. A. Janssen, *Zeitschr. d. Vereines deutscher Ingenieure* **39**, 1045 (1895).
- [4] P. G. de Gennes, en *Granular matter* (Summer School on Complex Systems, Varenai, 1996).
- [5] P. Dantu, en *Proc. Of the 4th International Conf. On Soil Mech. and Foundation Eng.* (Butterworths Scientific Publications, London, 1957). Vol. 1, pp. 144–148.
- [6] T. Wakabayashi, en *Proc. of the 9th Japan National Congress for Appl. Mech.* (Science Council of Japan, Tokyo, Japan, 1960), pp. 133–140.
- [7] M. Ammi, D. Bideau y J. P. Troadec, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **20**, 424 (1987).
- [8] C. Liu, H. M. Jaeger y S. R. Nagel, *Phys. Rev. A* **43**, 7091 (1991).
- [9] C. Liu y S. R. Nagel, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2301 (1992).
- [10] S. Torquato, T. M. Truskett y P. G. Debenedetti, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2064 (2000).
- [11] A. Mehta y S. F. Edwards, *Physica A* **157**, 1091 (1989).
- [12] H. J. Herrmann, *J. Phys. II France* **3**, 427 (1993).
- [13] K. Kruszelnicki, *New Scientist* **21**, 27 (1996).
- [14] D. J. Hornbaker *et al.*, *Nature* **387**, 765 (1997).
- [15] P. Bak, C. Tang y K. Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987).
- [16] H. M. Jaeger y S. R. Nagel, *Science* **255**, 1523 (1992).

- [17] R. P. Behringer, *Nonlinear Science Today* **3**, 1 (1993).
- [18] M. Faraday, *Philos. Trans. R. Soc. London* **52**, 299 (1831).
- [19] H. J. Herrmann, *Physica A* **191**, 263 (1992).
- [20] S. Luding *et al.*, *Phys. Rev. E* **49**, 1634 (1994).
- [21] S. Luding *et al.*, *Phys. Rev. E* **50**, R1762 (1994).
- [22] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y F. Moreno, *Phys.Rev.E* **62**, 5339 (2000).
- [23] *Dynamics: models and Kinetic methods for non-equilibrium many body systems*, editado por J.Karkheck (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2000).
- [24] G. Barker y M. Grimson, *New Scientist* **26**, 37 (1990).
- [25] H. M. Jaeger, J. B. Knight, C. Liu y S. R. Nagel, *MRS Bulletin* May 1994 25 (1994).
- [26] D. Kestenbaum, *New Scientist* 25 (1997).
- [27] J. Eggers, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5322 (1999).
- [28] J. J. Brey, F. Moreno, R. García-Rojo y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **65**, (2001).
- [29] S. Luding, E. Clément, J. Rajchenbach y J. Duran, *Europhys. Lett.* **36**, 247 (1996).
- [30] S. McNamara y S. Luding, en *IUTAM Symposium on Segregation in Granular Flows*, editado por T. Rosato (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999).
- [31] J. T. Jenkins y S. C. Cowin, en *Mechanics Applied to the Transport of Bulk Materials*, editado por S. C. Cowin (Am. Soc. Mech. Eng., New York, 1979).
- [32] P. K. Haff, *J. Fluid Mech.* **134**, 401 (1983).
- [33] J. T. Jenkins y S. B. Savage, *J. Fluid Mech.* **130**, 187 (1983).
- [34] J. J. Brey, J. W. Dufty y A. Santos, *J. Stat. Phys.* **87**, 1051 (1997).
- [35] T. P. C. van Noije y M. H. Ernst, *Physica A* **251**, 266 (1998).

- [36] I. Goldhirsch, en *Physics of dry granular media - NATO ASI Series*, editado por H. J. Herrmann, J.-P. Hovi y S. Luding (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998), p. 371.
- [37] T. G. Drake, *J. of Geophysical Research* **95**, 8681 (1990).
- [38] J. Lee, *Phys. Rev. E* **49**, 281 (1994).
- [39] O. Pouliquen y R. Gutfraind, *Phys. Rev. E* **53**, 552 (1996).
- [40] L. P. Kadanoff, *Rev.Mod.Phys.* **71**, 435 (1999).
- [41] S.McNamara, en *Dynamics: Models and Kinetic Methods for Nonequilibrium Many-Body Systems*, editado por J. Karkheck (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2000), pp. 267–278.
- [42] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Fluids A* **4**, 496 (1992).
- [43] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Rev. E* **50**, 28 (1994).
- [44] P. Constantin, E. L. Grossman y M. Mungan, *Physica D* **83**, 409 (1995).
- [45] E. L. Grossman y M. Mungan, *Phys. Rev. E* **53**, 6435 (1996).
- [46] T. Zhou y L. P. Kadanoff, *Phys. Rev. E* **54**, 623 (1996).
- [47] D. Goldman *et al.*, *Phys. Rev. E* **57**, 4831 (1998).
- [48] S. Luding y S. McNamara, *Granular Matter* **1**, 113 (1998).
- [49] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, D. Cubero y R. García-Rojo, *Phys. Fluids* **12**, 876 (2000).
- [50] J. Brey, M.J.Ruiz-Montero, R.García-Rojo y J. W.Dufty, *Phys.Rev.E* **60**, (1999).
- [51] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y F. Moreno, *Phys.Rew.E* **63**, (2001).
- [52] S. E. Esipov y T. Pöschel, *J. Stat. Phys.* **86**, 1385 (1997).
- [53] M. de S. Vieira, *Phys. Rev. A* **46**, 6288 (1992).
- [54] D. Deepak, *Physica A* **186**, 82 (1992).
- [55] P. Bak y K. Chen, *Spektrum der Wissenschaft* (1991).
- [56] I. M. Jánosi, Tesis Doctoral, 1991.
- [57] M. Chown, *New Scientist* **11**, 34 (1997).



- [58] F. Spahn, J. M. Hertzsch y N. V. Brilliantov, *Chaos, Solitons & Fractals* **5**, 1945 (1995).
- [59] J. Schmidt, H. Salo, F. Spahn y O. Petschman, *Icarus* **153**, 316 (2001).
- [60] T. Zhou, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3755 (1998).
- [61] K. der Weele, D. der Meer, M. Versluis y D. Lohse, *Europhys. Lett.* **53**, 328 (2001).
- [62] *Physics of dry granular media - NATO ASI Series E 350*, editado por H. J. Herrmann, J.-P. Hovi y S. Luding (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998).
- [63] S. Luding y H. J. Herrmann, *Chaos* **9**, 673 (1999).
- [64] S. F. Foerster, M. Y. Louge, H. Chang y K. Allia, *Phys. Fluids* **6**, 1108 (1994).
- [65] S. Chen, Y. Deng, X. Nie y Y. Tu, *Phys. Lett. A* **269**, 218 (2000).
- [66] E. Clément y J. Rajchenbach, *Europhys. Lett.* **16**, 133 (1991).
- [67] J. M. Huntley, *Phys. Rev. E* **58**, 5168 (1998).
- [68] H. J. Herrmann, en *3rd Granada Lectures in Computational Physics*, editado por P. L. Garrido y J. Marro (Springer, Heidelberg, 1995), pp. 67 - 114.
- [69] B. D. Lubachevsky, *Int. J. in Computer Simulation* **2**, 373 (1992).
- [70] S. Luding, en *Physics of dry granular media - NATO ASI Series E350*, editado por H. J. Herrmann, J.-P. Hovi y S. Luding (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998), p. 285.
- [71] F. G. Bridges, A. Hatzes y D. Lin, *Nature* **309**, 333 (1984).
- [72] A. Goldshtein y M. Shapiro, *J. Fluid Mech.* **282**, 75 (1995).
- [73] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim y A. Santos, *Phys. Rev. E* **58**, 4638 (1998).
- [74] V. Garzo y J. Dufty, *Phys. Rev. E* **60**, 5706 (1999).
- [75] M. Huthmann y A. Zippelius, *Phys. Rev. E* **56**, 6275 (1998).
- [76] C. K. K. Lun *et al.*, *J. Fluid. Mech.* **140**, 223 (1984).
- [77] J. T. Jenkins, *Arch. Ration. Mech. Anal.* **87**, 355 (1985).

- [78] N. Sela y I. Goldhirsch, *J. Fluid Mech.* **361**, 41 (1998).
- [79] P. Resibois y M. de Leener, *Classical Kinetic Theory of Fluids* (Wiley, New York, 1977).
- [80] J. Brey y D. Cubero, en *Granular gases*, editado por S. Luding y T. Pöschel (Springer, Berlin, 2001).
- [81] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Phys. Rev. E* **54**, 3664 (1996).
- [82] S. McNamara y S. Luding, *Phys. Rev. E* **58**, 2247 (1998).
- [83] J. J. Brey y D. Cubero, *Phys. Rev. E* **57**, 2019 (1998).
- [84] H. Beijeren y M.H.Ernst, *Physica A* **68**, 437 (1973).
- [85] G. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Clarendon press, Oxford, 1994).
- [86] J. Brey, M.J.Ruiz-Montero, D.Cubero y R.García-Rojo, *Phys. Fluids* , in press.
- [87] E. Helfand, *Phys. Rev.* **119**, 1 (1960).
- [88] M.P.Allen y D.J.Tiendesley, *Computer simulation of liquids* (Oxford Science, Bristol, 1994).
- [89] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M.Y. Rosenbluth y A. H. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1986 (1953).
- [90] A.Einstein, *Annalen der Physik* **17**, 549 (1905).
- [91] N. Kampen, *Stochastic processes in physics and chemistry* (Elsevier, Amsterdam, 1992).
- [92] R. Mantegna y S. Stanley, *Econophysics* (Cambridge Univ.Press, Cambridge, 2000).
- [93] H. J. Herrmann y S. Luding, *Continuum Mechanics and Thermodynamics* **10**, 189 (1998).
- [94] A. Goldshtein y M. Shapiro, *J. Fluid Mech.* **54**, 47 (1987).
- [95] J. McLenan, *Introduction to Non-equilibrium Statistical Mechanics* (Prentice-Hall, New Jersey, 1989).
- [96] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, R. García-Rojo y J.W.Dufty, *Phys. Rev. E* **60**, 7174 (2000).

- [97] S. Warr, J. M. Huntley y G. T. H. Jacques, *Phys. Rev. E* **52**, 5583 (1995).
- [98] J. S. Olafsen y J. S. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4369 (1998).
- [99] E. Falcon, S. Fauve y C. Laroche, en *Granular gases*, editado por S. Luding y T. Pöschel (Springer, Berlin, 2001).
- [100] D. Yunson, H. Li y L.P.Kadanoff, *Phys.Rev.Let.* **74**, 4 (1995).
- [101] E. L. Grossman, T. Zhou y E. Ben-Naim, *Phys. Rev. E* **55**, 4200 (1997).
- [102] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim y A. Santos, *Phys. Rev. E* **58**, 4638 (1998).
- [103] P. Sunthar y V. Kumaran, *Phys. Rev. E* **64**, 041303 (2001).
- [104] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Rev. E* **53**, 5089 (1996).
- [105] E. Clément y L. Labous, en *Granular gases*, editado por S. Luding y T.Pöschel (Springer, Berlin, 2001).
- [106] F. Melo, P. B. Umbanhowar y H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3838 (1995).
- [107] R. Wildman, J. M. Huntley y J.-P. Hansen, *Phys. Rev. E* **60**, 7066 (1999).
- [108] P. Sunthar y V. Kumaran, *Phys. Rev. E* **64**, 041303 (2001).
- [109] J. T. Jenkins, en *Non-Classical Continuum Mechanics*, editado por R. J. Knops y A. A. Lacey (Cambridge University Press, Cambridge, 1986).
- [110] J. J. Brey, J. W. Dufty y A. Santos, *J. of Stat. Phys.* **87**, 1051 (1997).
- [111] R. L. Brown, *The Institute of Fuel* **13**, 15 (1939).
- [112] K. Ahmad y I. J. Smalley, *Powder Technol.* **8**, 69 (1973).
- [113] G. C. Barker, A. Mehta y M. J. Grimson, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2194 (1993).
- [114] G. Baumann, I. Jánosi y D. E. Wolf, *Europhys. Lett.* **27**, 203 (1994).
- [115] S. Chakraborty, P. R. Nott y J. R. Prakash, *Euro. Phys. J. E* **4**, 265 (2000).
- [116] P. K. Haff y B. T. Werner, *Powder Technol.* **48**, 239 (1986).
- [117] E. Clément, J. Rajchenbach y J. Duran, *Europhys. Lett.* **30**, 7 (1995).

- [118] W. Cooke, S. Warr, J. M. Huntley y R. C. Ball, *Phys. Rev. E* **53**, 2812 (1996).
- [119] S. Luding, O. Strauß y S. McNamara, en *IUTAM Symposium on Segregation in Granular Flows*, editado por T. Rosato (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999).
- [120] D. der Meer, K. der Weele y D. Lohse, *Phys.Rev.E* **63**, 61304 (2001).
- [121] K. der Weele, D. der Meer, M.Versluis y D. Lohse, *Europhys. Lett.* **53**, 328 (2001).
- [122] E. Livne, B. Meerson y P.V.Sasorov, *Phys. Rev. E* **65**, (2002).
- [123] M. Argentina, M.G.Cleve y R. Soto, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 0443011 (2002).
- [124] S. McNamara y J.-L. Barrat, *Phys. Rev. E* **55**, 7767 (1997).
- [125] C. Bender y S.A.Orszag, *Advanced Mathematical methods for scientists and engineers* (Springer, New York, 1999).
- [126] J. J. Brey, M.J.Ruiz-Montero, F.Moreno y R.García-Rojo, **65**, (2001).
- [127] B.Meerson, T. Pöschel, P.V.Sasorov y T. Schwager, cond-mat/0208286 (sin publicar).
- [128] H. Haken, *Synergetics* (Springer, Berlin, 1978).
- [129] I. Goldhirsch y G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1619 (1993).
- [130] B. J. Alder y T. E. Wainwright, *J. Chem. Phys.* **31**, 459 (1959).
- [131] J.J.Erpenbeck y W.W.Wood, en *Statistical Mechanics*, editado por B. J.Berne (Plenum, New York, 1977).
- [132] D. E. Wolf, en *Computational Physics*, editado por K. H. Hoffmann y M. Schreiber (Springer, Heidelberg, 1996).
- [133] W. G. Hoover y B. Alder, *J. Chem. Phys.* **46**, 686 (1967).
- [134] W. McNeil y W. Madden, *J.Chem.Phys.* **76**, 6221 (1982).
- [135] J. J. Erpenbeck y W. W. Wood, en *Statistical mechanics* (Plenum Press, NY, 1977), pp. 1-40.
- [136] L. Verlet, *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967).
- [137] M. P. Allen y D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford University Press, Oxford, 1987).



- [138] S. Luding, M. Huthmann, S. McNamara y A. Zippelius, *Phys. Rev. E* **58**, 3416 (1998).
- [139] P. K. Haff, *J. Fluid Mech.* **134**, 401 (1983).
- [140] R. Brito y M.H.Ernst, *Europhys.Lett.* (1998).
- [141] J.M.Salazar y L.Brenig, *Phys.Rev.E* **59**, 2093 (1999).
- [142] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero y D. Cubero, *Phys. Rev. E* **54**, 3664 (1996).
- [143] P.Deltour y J.L.Barrat, *J.Phys I* **7**, 137 (1997).
- [144] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Rev. E* **53**, 5089 (1996).
- [145] T. P. C. van Noije y M. H. Ernst, *Granular Matter* **1**, 57 (1998).
- [146] M. Huthmann, J. A. G. Orza y R. Brito, *Granular matter* **2**, 189 (2000).
- [147] J. Brey, M. Montero y F. Moreno, *Phys. Fluids.* **10**, 2976 (1998).
- [148] P. Constantin, E. Grossman y M. Mungan, *Physica D* **83**, 409 (1995).
- [149] E. Grossman y M. Mungan, *Phys.Rev.E* **53**, 6435 (1996).
- [150] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Rev. E* **50**, R28 (1994).
- [151] D.Goldman *et al.*, *Phys.Rev. E* **57**, 4831 (1998).
- [152] M. Abramowitz y I. Stegun, *Handbook of mathematical functions* (Dover, New York, 1970).

*The Coming of Wisdom with Time*

THOUGH leaves are many, the root is one;  
Through all the lying days of my youth  
I swayed my leaves and flowers in the sun;  
Now I may wither into the truth.

**W.B. Yeats (1865-1939).**  
The Green Helmet and Other Poems, 1912.

# UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Reunido el Tribunal integrado por los abajo firmantes

en el día de la fecha, para juzgar la Tesis Doctoral de

D. RAMON GARCIA ROJO

titulada HIDRODINAMICA Y RUPTURA ESPONTANEA DE

SIMETRIA EN FLUIDOS GRANULARES

acordó otorgarle la calificación de SOBRESALIENTE CON LAUDE  
POR UNANIMIDAD

Sevilla, 14 de MARZO 1903

El Vocal



El Vocal,



El Vocal,



El Doctorado,

El Presidente



El Secretario,

