

UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

Facultad de Ciencias

Departamento de Física

ESTUDIO MEDIANTE LA TEORÍA CINÉTICA
DE MEDIOS GRANULARES EN RÉGIMEN
DE FLUJO RÁPIDO

Memoria presentada por Antonio Astillero Vivas
para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas.

***Edita: Universidad de Extremadura
Servicio de Publicaciones***

Caldereros 2. Planta 3ª
Cáceres 10071
Correo e.: publicac@unex.es
<http://www.unex.es/publicaciones>

Estudio mediante la teoría cinética de medios granulares en régimen de flujo rápido.

Memoria presentada por
Antonio Astillero Vivas
para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas

Dirigida por los profesores

- Dr. D. Andrés Santos Reyes
Catedrático de Física Teórica
Universidad de Extremadura
- Dr. D. Vicente Garzó Puertos
Catedrático de Física Teórica
Universidad de Extremadura

Departamento de Física
Facultad de Ciencias
Universidad de Extremadura
marzo de 2007

Dr. D. Andrés Santos Reyes, Catedrático de Universidad del Departamento de Física de la Universidad de Extremadura, y Dr. D. Vicente Garzó Puertos, Catedrático de Universidad del Departamento de Física de la Universidad de Extremadura,

CERTIFICAMOS:

que la presente memoria, titulada “ESTUDIO MEDIANTE LA TEORÍA CINÉTICA DE MEDIOS GRANULARES EN RÉGIMEN DE FLUJO RÁPIDO” ha sido realizada por D. Antonio Astillero Vivas bajo nuestra dirección en el Departamento de Física de la Universidad de Extremadura.

Y para que conste, y en cumplimiento de la legislación vigente, firmamos la presente en Badajoz a 1 de marzo de 2007.

Dr. Andrés Santos Reyes

Dr. Vicente Garzó Puertos

A Patri.

Agradecimientos

Un día tomando café con los compañeros, uno de ellos comentó que cuando se echa un vistazo a la tesis doctoral de alguien una de las primeras cosas que se suele mirar son los agradecimientos. Pensando detenidamente en ello creo que llevaba bastante razón. La realización de una tesis doctoral supone un gran esfuerzo y requiere de gran constancia y dedicación, tanto por la persona que la realiza como por las personas que lo rodean. Espero que cuando alguien en el futuro lea estos agradecimientos medite unos instantes acerca de ello. Son numerosas las personas que, de forma directa o indirecta, han contribuido a la realización de este trabajo. A todas ellas quiero expresarles mi más sincera gratitud. En particular:

- a mis directores de tesis, los doctores D. Andrés Santos Reyes y D. Vicente Garzó Puertos. Gracias por su ayuda, por su disponibilidad y por su paciencia, pero sobre todo, gracias por su amistad. Aunque suene a tópico, este trabajo no habría sido posible sin ellos.
- a todos los miembros del grupo de Física Estadística: Santos, Juan, Antonio, Fran y René.
- a los compañeros del Área de Arquitectura y Tecnología de Computadores del Centro Universitario de Mérida, por su paciencia y comprensión.
- a Patri. Gracias.
- a mi madre y hermanos. También a mi padre.
- a la Junta de Extremadura, por la concesión de una beca predoctoral de formación de personal investigador.
- a la Fundación Ramón Areces, por la concesión de una beca para la realización de tesis doctoral.
- al proyecto *Materia fuera del equilibrio: medios desordenados y fluidos granulares*, financiado por el Ministerio de Educación y Ciencia.

Índice general

| | |
|---|----------|
| 1. Introducción | 1 |
| 1.1. Acerca de los medios granulares | 1 |
| 1.2. Flujos granulares rápidos y teoría cinética | 2 |
| 2. ¿Puede un sistema de esferas duras elásticas imitar las propiedades de transporte de un gas granular? | 5 |
| 2.1. Introducción | 5 |
| 2.2. Modelo de esferas duras elásticas + fricción | 11 |
| 2.2.1. Propiedades básicas de la ecuación de Boltzmann | 11 |
| 2.2.2. El modelo | 14 |
| 2.3. Coeficientes de transporte de Navier–Stokes | 16 |
| 2.3.1. Tensor de esfuerzos y flujo de calor | 16 |
| 2.3.2. Autodifusión | 19 |
| 2.3.3. Comparación de los coeficientes de transporte de los gases IHS y EHS + fricción | 21 |
| 2.4. Modelos cinéticos | 24 |
| 2.4.1. Modelo BGK | 24 |
| 2.4.2. Modelo elipsoidal estadístico | 26 |
| 2.4.3. Solución de los modelos BGK y ES en el caso del flujo tangencial uniforme | 28 |

| | |
|--|-----------|
| 3. Extensión del modelo EHS + fricción a sistemas multicomponentes, a fluidos densos y a modelos de Maxwell | 35 |
| 3.1. Introducción | 35 |
| 3.2. Gases diluidos multicomponentes | 35 |
| 3.2.1. Propiedades generales | 35 |
| 3.2.2. Modelo EHS + fricción | 39 |
| 3.2.3. Límite browniano | 41 |
| 3.2.4. Modelos cinéticos | 42 |
| 3.3. Gases granulares densos | 43 |
| 3.3.1. Ecuación de Enskog para esferas duras inelásticas | 43 |
| 3.3.2. Modelo EHS + fricción | 45 |
| 3.3.3. Modelos cinéticos | 45 |
| 3.4. Modelos de Maxwell inelásticos | 46 |
| 3.4.1. Coeficientes de transporte | 47 |
| 3.4.2. Modelo de partículas de Maxwell elásticas + fricción | 48 |
| | |
| 4. Flujo tangencial uniforme en gases disipativos | 51 |
| 4.1. Introducción | 51 |
| 4.2. Algunas definiciones de tiempos característicos | 52 |
| 4.3. Flujo tangencial uniforme (USF) | 53 |
| 4.4. Simulaciones de Monte Carlo | 59 |
| 4.4.1. Problema transitorio inhomogéneo | 59 |
| 4.4.2. Problema transitorio homogéneo | 62 |
| 4.5. Resultados | 64 |
| 4.5.1. Problema transitorio inhomogéneo | 64 |
| 4.5.2. Problema transitorio homogéneo | 70 |
| 4.5.3. Estado estacionario | 83 |

| | |
|---|------------|
| 5. Comportamiento hidrodinámico de un gas granular en el flujo tangencial uniforme | 93 |
| 5.1. Introducción | 93 |
| 5.2. Un modelo reológico sencillo basado en el modelo cinético BGK . | 96 |
| 5.3. Simulaciones de Monte Carlo | 102 |
| 5.4. Resultados y discusión | 104 |
| | |
| 6. Coeficientes de transporte para mezclas de Maxwell inelásticas | 113 |
| 6.1. Introducción | 113 |
| 6.2. Modelos de Maxwell inelásticos para una mezcla binaria | 115 |
| 6.3. Estado de enfriamiento homogéneo | 119 |
| 6.4. Solución de la ecuación de Boltzmann para IMM mediante el método de Chapman–Enskog | 125 |
| 6.5. Coeficientes de transporte de Navier–Stokes | 128 |
| 6.6. Comparación con los coeficientes de transporte de IHS | 133 |
| | |
| 7. Conclusiones y perspectivas | 141 |
| 7.1. Modelo de esferas duras elásticas sometidas a fricción (capítulos 2 y 3) | 141 |
| 7.2. Gases disipativos y flujo tangencial uniforme (capítulos 4 y 5) . | 144 |
| 7.3. Mezclas de Maxwell inelásticas (capítulo 6) | 148 |
| | |
| Apéndices | 151 |
| | |
| A. Momentos colisionales en el modelo de Maxwell inelástico | 151 |
| | |
| B. Obtención de los coeficientes de transporte de Navier–Stokes en el modelo de Maxwell inelástico | 157 |
| B.1. Flujo de masa | 157 |
| B.2. Tensor de presiones | 159 |
| B.3. Flujo de calor | 160 |

| | |
|---------------|-----|
| Publicaciones | 163 |
| Bibliografía | 165 |

Índice de figuras

- 2.1. Representación de la dinámica microscópica del gas de esferas duras inelásticas (IHS, panel izquierdo) y del gas de esferas duras elásticas sometido a una fuerza de fricción (EHS, panel derecho). Para $t = 0^-$ los dos sistemas se encuentran en el mismo microestado y las partículas A y B están a punto de colisionar. En el sistema IHS, las partículas A y B retroceden inmediatamente la una de la otra después de la colisión (para $t = 0^+$) con una velocidad relativa menor que la que tenían antes de colisionar, con lo que la energía cinética promedio disminuye, $E(0^+) < E(0^-)$. A lo largo del intervalo de tiempo δt no tiene lugar ninguna colisión y las partículas se mueven de modo balístico, de modo que $E(\delta t) = E(0^+)$. En el sistema EHS, la colisión entre las partículas A y B es elástica, con lo cual $E(0^+) = E(0^-)$. Sin embargo, durante el paso de tiempo δt todas las partículas experimentan la acción de la fuerza de fricción y, por lo tanto, $E(\delta t) < E(0^+)$. Obsérvese que para $t = \delta t$ los microestados respectivos en los sistemas IHS y EHS son diferentes, a pesar de que la pérdida de energía $E(0^-) - E(\delta t)$ es la misma en ambos sistemas. 8
- 2.2. Representación de β_η (---), β_κ (···) y β_D (-····-) en función del coeficiente de restitución normal α para el caso tridimensional ($d = 3$). 22
- 2.3. Representación de la viscosidad tangencial (reducida) $\eta/(nT/\nu_0)$, la conductividad térmica (reducida) $\kappa/(nT/m\nu_0)$, el coeficiente de transporte (reducido) $\mu/(T^2/m\nu_0)$ y el coeficiente de autodifusión (reducido) $D/(nT/m\nu_0)$ para un gas tridimensional IHS (—) y el sistema equivalente EHS con $\beta = \beta_\eta$ (---), $\beta = \beta_\kappa$ (···), $\beta = \beta_D$ (-····-) y $\beta = 1$ (-····-) en función del coeficiente de restitución normal α . Obsérvese que en la gráfica superior, la curva del sistema IHS prácticamente se superpone con la curva del sistema EHS con $\beta = \beta_\eta$. Lo mismo sucede en la gráfica inferior con la curva IHS y la curva EHS con $\beta = \beta_D$. . . 23

- 2.4. Flujo tangencial uniforme (“uniform shear flow”, USF). 29
- 2.5. Representación de la viscosidad tangencial no newtoniana correspondiente al estado estacionario de un gas de esferas duras inelásticas en el flujo tangencial uniforme, en función del coeficiente de restitución normal α (gráfica de la izquierda) y del gradiente de velocidad reducido a/ν_0 (gráfica de la derecha). Las curvas representan las predicciones comunes de los modelos cinéticos BGK y ES, ecuaciones (2.94) y (2.95), con $\beta = \beta_\eta$ (líneas segmentadas) y $\beta = \beta_D = (1 + \alpha)/2$ (líneas continuas). Los círculos corresponden a nuestros resultados de simulación. 31
- 2.6. Momentos de cuarto y sexto grado de un gas IHS en condiciones de flujo tangencial uniforme en función del coeficiente de restitución normal α , una vez alcanzado el estado estacionario. Ambos momentos se encuentran referidos a sus respectivos valores de equilibrio local. Las curvas representan las predicciones de los modelos cinéticos BGK y ES con $\beta = \beta_\eta$ (líneas continuas) y $\beta = \beta_D = (1 + \alpha)/2$ (líneas segmentadas). Los círculos corresponden a nuestros resultados de simulación. 33
- 3.1. Representación de la viscosidad tangencial (reducida) $\eta/(nT/\nu_0)$, la conductividad térmica (reducida) $\kappa/(nT/m\nu_0)$, el coeficiente de transporte (reducido) $\mu/(T^2/m\nu_0)$ y el coeficiente de autodifusión (reducido) $D/(nT/m\nu_0)$ para un gas tridimensional IMM (—) y el sistema equivalente EMM con $\beta = \beta_\eta = \beta_\kappa$ (- - -), $\beta = \beta_D$ (- · - · -) y $\beta = 1$ (- · - · -) en función del coeficiente de restitución normal α . Obsérvese que en la gráfica superior, la curva del sistema IMM coincide con la curva del sistema EMM con $\beta = \beta_\eta = \beta_\kappa$. Lo mismo sucede en la gráfica inferior con la curva IMM y la curva EMM con $\beta = \beta_D$ 49
- 4.1. Número acumulado de colisiones por partícula en función del tiempo para IHS [$s(t)$, línea continua] y EHS [$s'(t)$, línea segmentada] en el caso $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$. La línea continua fluctuante representa la razón $s'(t)/s(t)$ con su correspondiente escala en el eje vertical derecho. Los datos han sido obtenidos tomando como condición inicial la función de distribución (4.9). 65
- 4.2. Perfiles hidrodinámicos para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$, para los tiempos $t/\tau^0 = 0.13, 0.5, 1, 1.5$ y 2 . Los datos han sido obtenidos tomando como condición inicial la función de distribución (4.9) (curvas sin símbolos) o (4.10) (curvas con símbolos). 66

4.3. Evolución de la velocidad media, la densidad y la temperatura en torno a $y = 0$ e $y = L/2 - (3/2)\delta y$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso de $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$. El tiempo es medido por el número acumulado de colisiones por partícula (s) para el gas IHS y por la misma cantidad, pero dividida por β , (s'/β) en el caso EHS. Los datos han sido obtenidos tomando como condición inicial la función de distribución (4.9). 68

4.4. Evolución de \bar{T}/T^0 (gráfica superior), $-\bar{P}_{xy}/\bar{nT}$ y $(\bar{P}_{xx}-\bar{P}_{yy})/\bar{nT}$ (gráfica inferior) para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso de $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$. El tiempo es medido por el número acumulado de colisiones por partícula (s) para el gas IHS y por la misma cantidad, pero dividida por β , (s'/β) en el caso EHS. Los datos han sido obtenidos tomando como condición inicial la función de distribución (4.9). 69

4.5. Número acumulado de colisiones por partícula en función del tiempo para IHS [$s(t)$, líneas continuas] y para EHS [$s'(t)$, líneas segmentadas], en el último caso dividido por $\beta = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$, para $\alpha = 0.5, 0.7$ y 0.9 . El panel de la izquierda corresponde a un gradiente de velocidad $a\tau^0 = 4$ mientras que el de la derecha lo hace a $a\tau^0 = 0.1$. Las líneas de puntos representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Obsérvese en el panel de la derecha que las curvas correspondientes a IHS, EHS y BGK para $\alpha = 0.9$ son prácticamente indistinguibles. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17). 71

4.6. Evolución de la razón entre el número acumulado de colisiones por partícula y la misma magnitud obtenida en la aproximación de equilibrio local para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.5, 0.9$ y $a\tau^0 = 0.1, 4$. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17). 72

4.7. Evolución de T/T^0 , $-P_{xy}/nT$ y $(P_{xx} - P_{yy})/nT$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.9$ con $a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$. Las líneas de puntos representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Obsérvese en el panel superior que las curvas correspondientes a IHS, EHS y BGK son prácticamente indistinguibles. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17). 74

- 4.8. Evolución de T/T^0 , $-P_{xy}/nT$ y $(P_{xx} - P_{yy})/nT$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.5$ con $a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$. Las líneas de puntos representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17). 75
- 4.9. Evolución de \bar{T}/T^0 (panel superior), $-\bar{P}_{xy}/\bar{n}\bar{T}$ y $(\bar{P}_{xx} - \bar{P}_{yy})/\bar{n}\bar{T}$ (panel inferior) en el caso IHS para $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$. Las líneas segmentadas y segmento puntuadas corresponden al problema transitorio inhomogéneo con las condiciones iniciales (4.9) y (4.10), respectivamente, mientras que las líneas continuas pertenecen al problema transitorio homogéneo con la condición inicial (4.17). 76
- 4.10. Viscosidad tangencial reducida (transitoria) $\eta^*(t) \equiv \eta(t)/\eta_0(t)$ frente al gradiente de velocidad reducido (transitorio) $a^*(t) \equiv a\tau_\eta(t)$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso $\alpha = 0.5$. Las líneas punteadas representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. El círculo, cuadrado y rombo representan los puntos correspondientes al estado estacionario para IHS, EHS y BGK, respectivamente. En cada caso, la curva situada a la izquierda del símbolo corresponde a $a\tau^0 = 0.1$, mientras que la situada a la derecha corresponde a $a\tau^0 = 4$ 77
- 4.11. Evolución de la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$, el cuarto cumulante a_2 y el sexto cumulante $-a_3$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.9$ con $a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17). 79
- 4.12. Evolución de la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$, el cuarto cumulante a_2 y el sexto cumulante $-a_3$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.5$ con $a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17). 80
- 4.13. Evolución de las razones R_0 , R_1 , R_2 y R_3 [ver ecuación (4.20)] para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso $\alpha = 0.5$ con $a\tau^0 = 4$. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17). 81

- 4.14. Valores correspondientes al estado estacionario del gradiente de velocidad reducido $a^* = a\tau_\eta$, la tensión tangencial reducida $-P_{xy}/nT$ y las diferencias de tensiones normales reducidas $(P_{xx} - P_{yy})/nT$ y $(P_{zz} - P_{yy})/nT$ en función del coeficiente de restitución normal α . Los símbolos pertenecen a resultados de simulación para IHS y EHS y dos valores distintos del gradiente de velocidad, mientras que las líneas punteadas representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Nótese que $P_{zz,s} = P_{yy,s}$ en el modelo BGK. Los símbolos en forma de rombo representan resultados de simulación del sistema EHS con la constante de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ en el caso $\alpha = 0.5$, $a\tau^0 = 4$ 84
- 4.15. Valores estacionarios de la viscosidad tangencial reducida $\eta^* = \eta/\eta_0$ y de las funciones viscométricas $-\Psi_1 = (P_{xx} - P_{yy})/nTa^{*2}$ y $\Psi_2 = (P_{zz} - P_{yy})/nTa^{*2}$ en función del gradiente de velocidad reducido a_s^* . Los símbolos pertenecen a resultados de simulación para IHS y EHS y dos valores distintos del gradiente de velocidad, mientras que las líneas punteadas representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Nótese que $\Psi_{2,s} = 0$ en el modelo BGK. Los símbolos en forma de rombo representan resultados de simulación del sistema EHS con la constante de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ en el caso $\alpha = 0.5$, $a\tau^0 = 4$ 86
- 4.16. Valores estacionarios de la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$, el cuarto cumulante a_2 y el sexto cumulante $-a_3$ en función del coeficiente de restitución normal α . Los símbolos pertenecen a resultados de simulación para IHS y EHS y dos valores distintos del gradiente de velocidad, mientras que las líneas punteadas representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Los símbolos en forma de rombo representan resultados de simulación del sistema EHS con el coeficiente de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ en el caso $\alpha = 0.5$, $a\tau^0 = 4$ 87
- 4.17. Representaciones lineales de las funciones de distribución de velocidades marginales $g_x^{(+)}(C_x)$, $g_y^{(+)}(C_y)$ y $F(C)$ para $\alpha = 0.9$ (paneles de la izquierda) y $\alpha = 0.5$ (paneles de la derecha). Las líneas continuas y segmentadas corresponden a resultados de simulación para IHS y EHS, respectivamente, las segmento punteadas representan las predicciones del modelo BGK y las puntuadas son las distribuciones de equilibrio (local). 89

- 4.18. Representaciones logarítmicas de las funciones de distribución de velocidades marginales $g_x^{(+)}(C_x)$, $g_y^{(+)}(C_y)$ y $F(C)$ para $\alpha = 0.9$ (paneles de la izquierda) y $\alpha = 0.5$ (paneles de la derecha). Las líneas continuas y segmentadas corresponden a resultados de simulación para IHS y EHS, respectivamente, las segmentos puntuadas representan las predicciones del modelo BGK y las puntuadas son las distribuciones de equilibrio (local). 90
- 5.1. Viscosidad tangencial reducida $\eta^*(t)$, funciones viscométricas $-\Psi_1(t)$ y $\Psi_2(t)$, y número de colisiones por partícula frente al gradiente de velocidad reducido $a^*(t)$ para $\alpha = 0.5$ en los dos casos de calentamiento ($a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$). En los tres primeros paneles, el círculo representa el punto correspondiente al estado estacionario (a_s^*, η_s^*) , mientras que la línea sólida delgada corresponde a las funciones hidrodinámicas, ecuaciones (5.43) y (5.44), obtenidas a partir de nuestro modelo reológico simplificado. Nótese que en dicho modelo $\Psi_2(t) = 0$ 105
- 5.2. Igual que en la figura 5.1, pero para los dos casos de enfriamiento ($a = 0.01/\tau^0$ y $a = 0.1/\tau^0$). Obsérvese la escala logarítmica en los ejes horizontales y la escala lineal en el eje vertical del panel inferior. 106
- 5.3. Viscosidad tangencial reducida $\eta^*(t)$, funciones viscométricas $-\Psi_1(t)$ y $\Psi_2(t)$, y número de colisiones por partícula frente al gradiente de velocidad reducido $a^*(t)$ para $\alpha = 0.9$ en los dos casos de calentamiento ($a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$). En los tres primeros paneles, el círculo representa el punto correspondiente al estado estacionario (a_s^*, η_s^*) , mientras que la línea sólida delgada corresponde a las funciones hidrodinámicas, ecuaciones (5.43) y (5.44), obtenidas a partir de nuestro modelo reológico simplificado. Nótese que en dicho modelo $\Psi_2(t) = 0$ 107
- 5.4. Viscosidad tangencial reducida $\eta^*(a^*)$ y funciones viscométricas $-\Psi_1(a^*)$ y $\Psi_2(a^*)$ correspondientes a la parte hidrodinámica de la evolución hacia el estado estacionario (representado por un círculo) para, de arriba abajo, $\alpha = 0.5, 0.7$ y 0.9 . Las líneas sólidas delgadas corresponden a las funciones hidrodinámicas, ecuaciones (5.43) y (5.44), obtenidas a partir de nuestro modelo teórico simplificado. Nótese que en dicho modelo $\Psi_2(a^*) = 0$ 109
- 5.5. Funciones de distribución de velocidades marginales $g_x^{(+)}(C_x)$ y $g_y^{(+)}(C_y)$ para $\alpha = 0.5$ y $a^* = 0.40, 0.66$ y 1.26 110
- 5.6. Función de distribución marginal $F(C)$ para $\alpha = 0.5$ y $a^* = 0.40, 0.66$ y 1.26 111

6.1. Representación del cociente de temperaturas $\gamma = T_1/T_2$ frente al coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ para $d = 3$, $x_1 = \frac{2}{3}$, $\sigma_1/\sigma_2 = 1$ y tres valores diferentes del cociente de masas m_1/m_2 : (a) $m_1/m_2 = 10$ (círculos), (b) $m_1/m_2 = 2$ (cuadrados) y (c) $m_1/m_2 = 0.1$ (triángulos). Las líneas sólidas representan los resultados obtenidos aquí para IMM, las líneas segmentadas son los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 1999b) y los símbolos corresponden a resultados de simulaciones de Monte Carlo para IHS (Montanero and Garzó, 2002a). 123

6.2. Representación de los coeficientes c_i frente al coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ para $d = 3$, $x_1 = \frac{1}{2}$, $\sigma_1/\sigma_2 = 1$ y $m_1/m_2 = 2$. Las líneas sólidas representan los resultados derivados aquí para IMM, las líneas segmentadas son los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 1999b) y los símbolos corresponden a resultados de simulaciones de Monte Carlo para IHS (Montanero and Garzó, 2002a). Los círculos corresponden a c_1 mientras que los cuadrados lo hacen a c_2 124

6.3. Representación del coeficiente de autodifusión reducido $D(\alpha)/D(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para IMM (línea sólida) y para IHS en la primera (línea segmentada) (Brey et al., 2000) y segunda (línea punteada) (Garzó and Montanero, 2004) aproximaciones de Sonine. Los símbolos corresponden a simulaciones de Monte Carlo para IHS (Garzó and Montanero, 2004; Brey et al., 2000). 133

6.4. Representación del coeficiente de autodifusión reducido $D(\alpha)/D(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1/\sigma_2 = 2$, $x_1 = 0$ (límite de partícula trazadora) y $m_1/m_2 = 8$. La línea sólida corresponde a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM, mientras que la línea segmentada representa los resultados obtenidos para IHS en la segunda aproximación de Sonine (Garzó and Montanero, 2004). Los símbolos corresponden a simulaciones de Monte Carlo para IHS (Garzó and Montanero, 2004). 134

- 6.5. Representación del coeficiente de autodifusión reducido $D(\alpha)/D(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y dos valores diferentes del cociente de masas: $m_1/m_2 = 0.5$ y $m_1/m_2 = 4$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b). 135
- 6.6. Representación del coeficiente de autodifusión reducido $D(\alpha)/D(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y dos valores diferentes del cociente de masas: $m_1/m_2 = 0.5$ y $m_1/m_2 = 4$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b). 136
- 6.7. Representación del coeficiente reducido $-D^*(\alpha) = -D'(\alpha)/D_p(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y dos valores diferentes del cociente de masas: $m_1/m_2 = 0.5$ y $m_1/m_2 = 4$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b). 137
- 6.8. Representación de la viscosidad tangencial reducida $\eta(\alpha)/\eta(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y dos valores diferentes del cociente de masas: $m_1/m_2 = 0.5$ y $m_1/m_2 = 4$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Montanero and Garzó, 2003b). 138
- 6.9. Representación de los coeficientes reducidos $\kappa(\alpha)/\kappa(1)$ y $\mu^*(\alpha) = n\mu(\alpha)/T\kappa(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para un gas monocomponente. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos para IMM (Santos, 2003) mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Brey et al., 1998). 139

Capítulo 1

Introducción

1.1. Acerca de los medios granulares

Un *medio granular* se puede concebir como un sistema formado por un gran número de partículas macroscópicas, denominadas *granos*, que o bien se encuentran en el vacío o por el contrario se hallan inmersas en el seno de un fluido intersticial. Además, se supone normalmente que las únicas fuerzas que los granos ejercen entre sí son de carácter repulsivo, no existiendo por lo tanto fuerzas cohesivas entre ellos. La característica más notable de estas fuerzas repulsivas, y que es además responsable de que los medios granulares presenten un comportamiento dinámico tan rico y a la vez peculiar, es el carácter disipativo de las mismas. Esto significa que las interacciones o colisiones entre partículas no van a ser elásticas, con lo cual, no se verificará el principio de conservación de la energía mecánica (Jaeger, Nagel and Behringer, 1996; Brey, 2003; Brilliantov and Poschel, 2004; Barrat, Trizac and Ernst, 2005). Los materiales granulares están presentes en muchos de los aspectos de nuestra vida cotidiana. El azúcar que ponemos en nuestro café, la fina arena de una playa, el cereal que se encuentra en un silo, un alud de nieve o, a una mayor escala, los anillos que rodean algunos de los planetas gaseosos del Sistema Solar, todos son ejemplos representativos de un medio granular.

Desde un punto de vista tecnológico, el interés que suscitan los medios granulares es muy grande, pues desempeñan un papel de primera magnitud en industrias tan importantes para la actividad humana como la minería, la construcción, la agricultura o la industria química. También están presentes en diversos procesos geológicos de suma importancia, tales como corrimientos de tierras o la propia erosión del terreno, responsables en gran medida del modelado de la superficie terrestre (Jaeger, Nagel and Behringer, 1996). En lo que respecta al interés científico de los medios granulares, su estudio ha experimentado un gran

desarrollo en los últimos años, consiguiendo atraer de forma muy significativa la atención de la comunidad de físicos, en particular de aquéllos que desarrollan su actividad investigadora en el campo de la física estadística. Esto ha sido debido, en parte, a la importancia que ha adquirido la aplicación de técnicas propias de la mecánica estadística al estudio de los fluidos granulares, especialmente en condiciones de flujo rápido. En este mismo sentido, se puede citar la extensión al campo de los fluidos granulares de modelos físicos desarrollados originalmente para el estudio de sistemas moleculares, como la conocida ecuación de Boltzmann.

Esta extensión de los modelos de sistemas moleculares a sistemas granulares es posible, en buena medida, gracias a que muchas de las propiedades que exhiben los fluidos granulares dependen del comportamiento global de la colectividad de partículas, es decir, del sistema en su conjunto y no de las propiedades individuales de cada grano. Esto, a su vez, permite que a la hora de modelizar teóricamente un medio granular puedan idealizarse determinadas características de los granos y que, por lo tanto, puedan obtenerse modelos simplificados que nos ayuden a entender el comportamiento de esta clase de sistemas.

1.2. Flujos granulares rápidos y teoría cinética

En este trabajo se van a considerar únicamente los denominados medios granulares *secos*, es decir, aquéllos que se encuentran en ausencia de cualquier tipo de fluido intersticial o en los que la influencia de dicho fluido puede ignorarse. Además, se va a suponer también que estos medios granulares se encuentran en condiciones de flujo rápido. Esto significa que las partículas se mueven balísticamente, excepto cuando colisionan entre sí. Estas condiciones de flujo permiten que un medio granular se pueda asimilar en cierta medida a un fluido molecular convencional.

Puesto que un fluido convencional puede ser descrito por las ecuaciones de Navier–Stokes en un gran número de situaciones, se podría pensar en extender la descripción hidrodinámica de Navier–Stokes al campo de los fluidos granulares. El primer paso para hacer esto sería modificar la ecuación de conservación de la energía con un término de tipo sumidero que tuviese en cuenta que ahora las colisiones entre partículas son inelásticas. Para que la descripción de un fluido sea completa, además de las ecuaciones de conservación de la masa, la cantidad de movimiento y la energía, se necesitan dos expresiones más para los flujos de cantidad de movimiento y calor, respectivamente, de modo que se disponga de un conjunto cerrado de ecuaciones. En el caso de un fluido granular, además, se debe añadir una ecuación más para el término que tiene en cuenta la disipación de energía.

Para un fluido ordinario, las expresiones para los flujos de cantidad de

movimiento y de calor las proporcionan las denominadas ecuaciones constitutivas, en las que aparecen tres coeficientes de transporte fenomenológicos: la viscosidad tangencial, la viscosidad de volumen y la conductividad térmica. A este nivel de descripción se plantean varias dificultades. La primera de ellas tiene que ver con la justificación teórica de las ecuaciones constitutivas, pues se trata de ecuaciones de tipo fenomenológico o empírico que, además, sólo retienen información hasta el primer orden en los gradientes, ignorando por tanto efectos no lineales asociados a gradientes de orden superior. La siguiente dificultad que se plantea es que la descripción hidrodinámica no proporciona, a priori, expresiones explícitas, en función de las propiedades de las partículas, de los coeficientes de transporte. Para hacer frente a estas cuestiones es necesario recurrir a una descripción microscópica del problema y aquí es donde entra en juego la teoría cinética de gases, aplicada en nuestro caso a los fluidos granulares.

La teoría cinética va a desempeñar un papel protagonista a la hora de construir el marco teórico que permita describir de modo completo y satisfactorio un fluido granular en condiciones de flujo rápido. Para hacer esto posible lo primero que hay que hacer es obtener una ecuación cinética para la función de distribución de velocidades y a continuación intentar resolver esta ecuación. Como puede adivinarse, la función de distribución de velocidades va a ser la pieza clave en este marco teórico, pues a partir de ella se van a poder calcular todas las propiedades relevantes del sistema.

El modelo más simple (y casi paradigmático) de gas granular está formado por un sistema de esferas duras, lisas e inelásticas. Para este tipo de sistemas, las ecuaciones de Boltzmann y Enskog (propuestas originariamente para fluidos moleculares) han sido generalizadas para incorporar el carácter inelástico de las colisiones entre partículas (Brey, Dufty and Santos, 1997). Además, es posible extender el desarrollo perturbativo de Chapman–Enskog (Chapman and Cowling, 1970), que proporciona en el primer orden del desarrollo las ecuaciones de Navier–Stokes.

Por lo tanto, la teoría cinética proporciona una herramienta primordial en el estudio y comprensión de los gases granulares. Permite delimitar los dominios de validez de la descripción hidrodinámica, en general, y de las ecuaciones de Navier–Stokes, en particular. Proporciona además una información relevante acerca de los gases granulares considerados como ejemplos de sistemas físicos muy alejados del equilibrio.

Capítulo 2

¿Puede un sistema de esferas duras elásticas imitar las propiedades de transporte de un gas granular?

2.1. Introducción

A la hora de modelizar un fluido granular que se encuentra en condiciones de flujo rápido, se puede considerar casi paradigmático el sistema constituido por un gas de esferas duras *inelásticas* lisas (“inelastic hard spheres”, IHS) caracterizado por un coeficiente constante de restitución normal $\alpha \leq 1$ (Campbell, 1990; Goldhirsch, 2003; Brilliantov and Poschel, 2004). Cuando dos partículas que se desplazan con velocidades \mathbf{v} y \mathbf{v}_1 colisionan de modo inelástico, después de la colisión las velocidades de ambas partículas \mathbf{v}' y \mathbf{v}'_1 están dadas por

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \frac{1+\alpha}{2}(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + \frac{1+\alpha}{2}(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (2.1)$$

Aquí, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ es un vector unitario cuya dirección viene definida por la línea recta que une los centros de las dos partículas que están colisionando, justo cuando se encuentran una en contacto con la otra y $\mathbf{g} \equiv \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ es la velocidad relativa antes de la colisión. La regla de colisión (2.1) conserva la cantidad de movimiento pero no sucede lo mismo con la energía. Ésta última ve reducida su magnitud por un factor que es proporcional al grado de inelasticidad $1 - \alpha^2$, es decir,

$$v'^2 + v_1'^2 - v^2 - v_1^2 = -(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 \frac{1 - \alpha^2}{2}. \quad (2.2)$$

Es importante hacer notar que, mientras la componente de la velocidad relativa perpendicular a $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ permanece constante, el módulo de la componente paralela se ve reducido por un factor α : $\mathbf{g}' \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\alpha \mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$, donde $\mathbf{g}' \equiv \mathbf{v}' - \mathbf{v}_1'$ es la velocidad relativa poscolisional. A partir de la ecuación (2.1) es fácil obtener las velocidades precolisionales \mathbf{v}'' y \mathbf{v}_1'' tales que después de una colisión se transforman en \mathbf{v} y \mathbf{v}_1 :

$$\mathbf{v}'' = \mathbf{v} - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \mathbf{v}_1'' = \mathbf{v}_1 + \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (2.3)$$

donde ahora $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ es la velocidad relativa poscolisional.

El hecho de que las colisiones entre partículas sean inelásticas tiene como consecuencia que éstas tiendan a producir una disminución del valor de la temperatura granular¹ $T(t)$,

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{\text{col}} = -\zeta T, \quad (2.4)$$

donde $\zeta \sim \nu(1 - \alpha^2)$ es la *tasa de enfriamiento* y ν es una frecuencia de colisión efectiva. De la ecuación (2.4) se infiere que si se quiere alcanzar un estado estacionario se necesita una fuente de energía externa que compense el “enfriamiento” que experimenta el sistema debido a las colisiones inelásticas.

En el caso de un gas constituido por esferas duras *elásticas* (“elastic hard spheres”, EHS) la energía sí es conservada en las colisiones entre partículas. Sin embargo, se puede conseguir un efecto de enfriamiento en el sistema si se le aplica una fuerza de fricción proporcional a la velocidad de las partículas, de modo que el efecto de esta fuerza de rozamiento sobre la temperatura vendría ahora dado por

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{\text{fric}} = -2\xi T, \quad (2.5)$$

donde ξ es el coeficiente de fricción. De lo anterior se deduce que si se toma $\xi = \frac{1}{2}\zeta$ se conseguirá que el efecto de enfriamiento que la fuerza de fricción origina en el sistema EHS sea el mismo que la inelasticidad de las colisiones provoca en el sistema IHS. Como consecuencia, desde un punto de vista macroscópico, las ecuaciones hidrodinámicas de conservación de la masa, la cantidad de

¹La temperatura granular es proporcional a la energía cinética media por partícula en el sistema de referencia no inercial *lagrangiano* y se definirá más adelante en la ecuación (2.17).

movimiento y la energía para el gas IHS son, formalmente, idénticas a las correspondientes al gas EHS más la fuerza de fricción ya mencionada:

$$D_t n + n \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.6)$$

$$D_t \mathbf{u} + \frac{1}{mn} \nabla \cdot \mathbf{P} = \mathbf{0}, \quad (2.7)$$

$$D_t T + \frac{2}{dn} (\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{P} : \nabla \mathbf{u}) = -\zeta T. \quad (2.8)$$

Aquí, $D_t \equiv \partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla$ es la derivada total o material, d es la dimensión del sistema, m es la masa de una esfera, n es la densidad numérica, \mathbf{u} es la velocidad media del fluido, T es la temperatura granular, \mathbf{P} es el tensor de presiones y \mathbf{q} es el flujo de calor. El término a la derecha del signo de igualdad en la ecuación (2.8) proviene de la ecuación (2.4) en el caso del sistema IHS, mientras que en el caso del sistema EHS proviene de la ecuación (2.5) (con $\xi = \frac{1}{2}\zeta$).

Aunque la estructura de las ecuaciones de balance macroscópicas (2.6)–(2.8) es la misma tanto para el gas IHS como para el gas EHS (más la fuerza de fricción), la dinámica microscópica subyacente es, desde un punto de vista físico, muy diferente en ambos sistemas: en el gas IHS en un instante dado, (i) sólo pierden energía aquellos pares de partículas que se hallan colisionando, mientras que (ii) el resto de partículas que no experimentan colisiones se mueven libremente; en el caso EHS, por el contrario, (i) la energía se conserva en las colisiones pero (ii) entre colisión y colisión, todas las partículas pierden energía como consecuencia de la acción de la fuerza de fricción. Por consiguiente, durante un cierto intervalo de tiempo pequeño, sólo una pequeña fracción de partículas (aquéllas que han colisionado) es responsable de la pérdida de energía y consiguiente enfriamiento del gas IHS, mientras que en el gas EHS todas las partículas contribuyen simultáneamente al enfriamiento del sistema. Estas diferencias aparecen representadas esquemáticamente en la figura 2.1.

Se puede considerar, por ejemplo, el denominado estado de enfriamiento homogéneo (*homogeneous cooling state*, HCS) (van Noije and Ernst, 1998; Goldshtein and Shapiro, 1995). Ahora, la ecuación de balance de la energía (2.8) vendría dada por

$$\frac{dT_{\text{hc}}(t)}{dt} = -\zeta_{\text{hc}}(t)T_{\text{hc}}(t). \quad (2.9)$$

La solución a la ecuación (2.9) está dada por la ley de Haff (Haff, 1983):

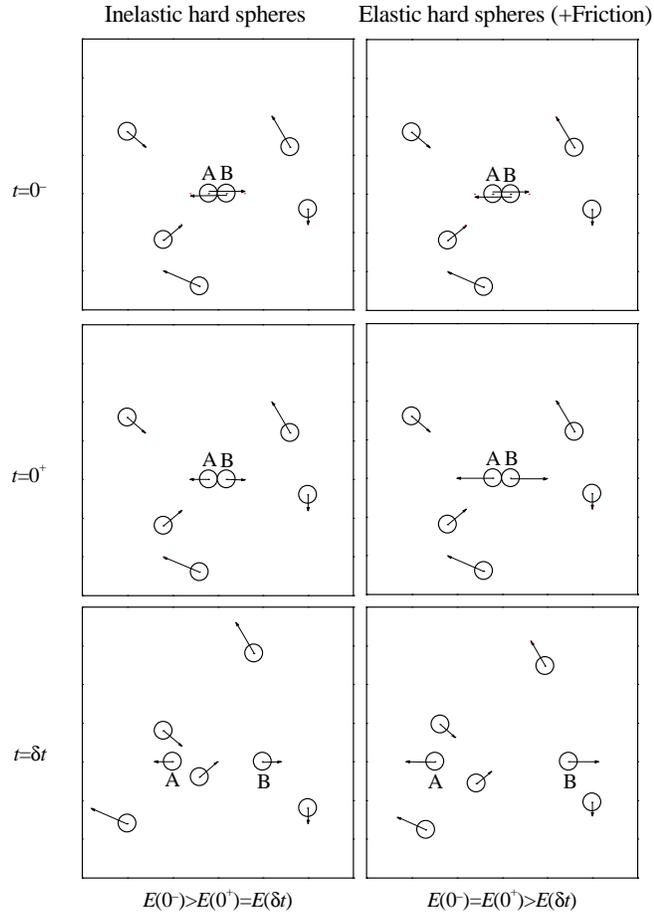


Figura 2.1: Representación de la dinámica microscópica del gas de esferas duras inelásticas (IHS, panel izquierdo) y del gas de esferas duras elásticas sometido a una fuerza de fricción (EHS, panel derecho). Para $t = 0^-$ los dos sistemas se encuentran en el mismo microestado y las partículas A y B están a punto de colisionar. En el sistema IHS, las partículas A y B retroceden inmediatamente la una de la otra después de la colisión (para $t = 0^+$) con una velocidad relativa menor que la que tenían antes de colisionar, con lo que la energía cinética promedio disminuye, $E(0^+) < E(0^-)$. A lo largo del intervalo de tiempo δt no tiene lugar ninguna colisión y las partículas se mueven de modo balístico, de modo que $E(\delta t) = E(0^+)$. En el sistema EHS, la colisión entre las partículas A y B es elástica, con lo cual $E(0^+) = E(0^-)$. Sin embargo, durante el paso de tiempo δt todas las partículas experimentan la acción de la fuerza de fricción y, por lo tanto, $E(\delta t) < E(0^+)$. Obsérvese que para $t = \delta t$ los microestados respectivos en los sistemas IHS y EHS son diferentes, a pesar de que la pérdida de energía $E(0^-) - E(\delta t)$ es la misma en ambos sistemas.

$$T_{\text{hc}}(t) = \frac{T_{\text{hc}}(0)}{\left[1 + \frac{1}{2}\zeta_{\text{hc}}(0)t\right]^2}, \quad (2.10)$$

donde se ha tenido en cuenta que $\zeta_{\text{hc}}(t) \propto T_{\text{hc}}^{1/2}(t)$. Hay que hacer notar que la ley de enfriamiento que se acaba de presentar es válida en el estado de enfriamiento homogéneo tanto para el gas IHS como para el sistema EHS + fricción², a condición de que en éste último el coeficiente de fricción dependa del tiempo a través de la temperatura como $\xi \propto T^{1/2}$ y que $\xi(0) = \zeta_{\text{hc}}(0)/2$. Además, para ambos casos la ecuación de Boltzmann homogénea admite una solución escalada de la forma

$$f_{\text{hc}}(\mathbf{v}, t) = n [m/2T_{\text{hc}}(t)]^{d/2} f_{\text{hc}}^*(\mathbf{c}(t)), \quad \mathbf{c}(t) = \mathbf{v}/\sqrt{2T_{\text{hc}}(t)/m}. \quad (2.11)$$

Por otro lado, mientras que en el sistema EHS la función de distribución es gaussiana, $f_{\text{hc}}^*(\mathbf{c}) = \pi^{-d/2} e^{-c^2}$ (Garzó, Santos and Brey, 1990), en el caso del sistema IHS la forma de la función de distribución presenta ciertas desviaciones respecto de la gaussiana (van Noije and Ernst, 1998; Brey, Ruiz-Montero and Cubero, 1996; Brey, Ruiz-Montero and Cubero, 1999; Montanero and Santos, 2000; Huthmann, Orza and Brito, 2000; Brilliantov and Poschel, 2006). Estas desviaciones son medidas, entre otros parámetros, por el cuarto cumulante

$$a_2 \equiv \frac{4}{d(d+2)} \langle c^4 \rangle - 1, \quad (2.12)$$

que presenta un valor distinto de cero, y por un exceso de población en la cola de velocidad alta $f_{\text{hc}}^*(\mathbf{c}) \sim e^{-Ac}$. En el caso de un gas calentado por un forzamiento de ruido blanco, la función de distribución del estado estacionario es de nuevo una gaussiana para el gas EHS + fricción, mientras que para el gas IHS se tiene que $a_2 \neq 0$ y $f_{\text{hc}}^*(\mathbf{c}) \sim e^{-Ac^{3/2}}$ (van Noije and Ernst, 1998; Montanero and Santos, 2000).

Los dos ejemplos anteriores son lo suficientemente ilustrativos para darse cuenta que, obviamente, los sistemas IHS y EHS + fricción no son estrictamente equivalentes, incluso aunque sus ecuaciones de balance macroscópicas (2.6)–(2.8) sean las mismas. Sin embargo, las diferencias existentes entre las soluciones homogéneas para los gases IHS y EHS + fricción no son cuantitativamente importantes en el dominio de las velocidades *térmicas* (por ejemplo, $|a_2| \lesssim 0.02$ para IHS con $\alpha \gtrsim 0.7$). Por otro lado, es posible que ambos sistemas presenten desviaciones respecto del equilibrio comparables en los estados

²A partir de ahora, cuando nos refiramos al sistema de esferas duras elásticas EHS junto con la fuerza de fricción a la que se encuentra sometido emplearemos la expresión más compacta EHS + fricción.

inhomogéneos, en los cuales los fenómenos más relevantes son el transporte de cantidad de movimiento y/o de energía. De hecho, una de las características más representativas de los gases granulares, como la inestabilidad del estado de enfriamiento homogéneo y la consiguiente formación de agregados, tienen un origen hidrodinámico (Goldhirsch, 2003; Brey, Ruiz-Montero and Cubero, 1996; Brey, Ruiz-Montero and Cubero, 1999), y por tanto también podrían aparecer en un sistema EHS + fricción, con un coeficiente de fricción ξ proporcional a una frecuencia de colisión característica local.

El objetivo de este capítulo es investigar hasta qué punto un gas EHS + fricción puede “imitar” a un gas IHS en lo que respecta a propiedades de transporte tales como los flujos de masa, de cantidad de movimiento y de energía. En la sección 2.2 se construye un modelo para el gas EHS en el marco de la ecuación de Boltzmann que intenta reproducir las propiedades básicas de la ecuación de Boltzmann correspondiente a un sistema IHS con un coeficiente de restitución α dado. En primer lugar, como ya se ha discutido anteriormente, se admite que el gas EHS se halla sometido a la acción de una fuerza de fricción. Igualando las ecuaciones (2.4) y (2.5), se obtiene que el coeficiente de fricción ξ del sistema EHS + fricción debe ser igual a la mitad del valor de la tasa de enfriamiento $\zeta(\alpha)$ del gas IHS. Sin embargo, esta elección del coeficiente de fricción no es muy práctica puesto que ζ es una funcional de la función de distribución de velocidades de no equilibrio del sistema IHS y lo que se persigue es una ecuación de Boltzmann autónoma para el gas EHS + fricción, es decir, una ecuación que no requiera el conocimiento previo de la solución de la ecuación de Boltzmann correspondiente al gas IHS. Otra posibilidad sería definir ξ como una funcional de la función de distribución de velocidades del sistema EHS + fricción, pero esto da lugar a un modelo excesivamente complejo. Por estas razones, tomaremos $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0(\alpha)$, donde ζ_0 es la tasa de enfriamiento en la aproximación de equilibrio local³. Además, esta elección es consistente con el hecho de que la función de distribución de velocidades del gas EHS + fricción es una gaussiana en el estado de enfriamiento homogéneo, así como en el estado estacionario que se alcanza cuando al gas se le incorpora una fuerza de termostato de ruido blanco. El precio a pagar por esta elección más simple $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$ es que ahora la equivalencia entre las dos fuentes de enfriamiento, a saber, las colisiones y la fuerza de fricción, dadas por las ecuaciones (2.4) y (2.5), es solamente aproximada. Nuestro modelo presenta otro ingrediente importante y consiste básicamente en que la frecuencia de colisión del gas EHS + fricción incorpora un parámetro adimensional β , relativo a la frecuencia de colisión del sistema IHS, y cuyo valor puede ser escogido libremente con el objetivo de optimizar el acuerdo con las propiedades del gas IHS. Con la finalidad de efectuar una elección óptima del valor de β , en la sección 2.3 se comparan los coeficientes de transporte de Navier–Stokes de ambos sistemas. A medio camino entre la sencillez y la precisión, el valor elegido será $\beta(\alpha) = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$. La equivalencia aproximada entre ambos sistemas, EHS→IHS, va a permitir extender de un

³Es decir, ζ_0 se calcula haciendo uso de la función de distribución de velocidades de equilibrio local.

modo directo al dominio de los gases granulares todos aquellos modelos cinéticos que en un principio fueron propuestos para el estudio de gases moleculares convencionales (Cercignani, 1988; Garzó and Santos, 2003). Esto se estudia en la sección 2.4 para los modelos cinéticos Bhatnagar–Gross–Krook (Bhatnagar, Gross and Krook, 1954; Welander, 1954) y elipsoidal estadístico (Holway, 1966). La extensión de estas ideas a mezclas y gases densos se llevará a cabo en el capítulo 3 y confirmará la elección $\beta(\alpha) = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$.

2.2. Modelo de esferas duras elásticas + fricción

2.2.1. Propiedades básicas de la ecuación de Boltzmann

La ecuación de Boltzmann para un gas de esferas duras inelásticas (IHS) viene dada por (Goldshstein and Shapiro, 1995; Brey, Dufty and Santos, 1997; van Noije and Ernst, 2001)

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) f = J^{(\alpha)}[f, f], \quad (2.13)$$

donde $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t)$ es la función de distribución de velocidades de una partícula y $J^{(\alpha)}[f, f]$ es el operador de colisiones de Boltzmann

$$J^{(\alpha)}[f, f] = \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) [\alpha^{-2} f(\mathbf{v}'') f(\mathbf{v}'_1) - f(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}_1)], \quad (2.14)$$

donde la dependencia explícita de f de \mathbf{r} y t ha sido omitida por sencillez de notación. En la ecuación (2.14), σ es el diámetro de una esfera y Θ es la función salto de Heaviside. Las velocidades precolisionales \mathbf{v}'' y \mathbf{v}'_1 están dadas por la ecuación (2.3). Obviamente, el operador de colisiones correspondiente a las esferas duras elásticas (EHS), $J^{(1)}[f, f]$, se obtiene a partir de las ecuaciones (2.14) y (2.3) haciendo $\alpha = 1$.

Los primeros $d + 2$ momentos de la función de distribución de velocidades definen la densidad numérica

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) = \langle 1 \rangle, \quad (2.15)$$

la velocidad media del fluido

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) = \langle \mathbf{v} \rangle, \quad (2.16)$$

y la temperatura *granular*

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{m}{n(\mathbf{r}, t)d} \int d\mathbf{v} V^2(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) = \frac{m\langle V^2 \rangle}{d}, \quad (2.17)$$

donde $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t) \equiv \mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ es la velocidad peculiar, es decir, la velocidad medida en el sistema de referencia no inercial *lagrangiano* que se mueve con la velocidad media del fluido \mathbf{u} . Las propiedades básicas del operador de colisiones inelástico $J^{(\alpha)}[f, f]$ son aquéllas que determinan la forma de las ecuaciones hidrodinámicas de balance de masa, cantidad de movimiento y energía,

$$\int d\mathbf{v} \begin{pmatrix} 1 \\ m\mathbf{v} \\ \frac{1}{2}mV^2 \end{pmatrix} J^{(\alpha)}[f, f] = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ -\frac{d}{2}nT\zeta \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

donde $\zeta(\mathbf{r}, t)$ es la tasa de enfriamiento como consecuencia de la inelasticidad de las colisiones. Mediante manipulaciones estándar del operador de colisiones, la tasa de enfriamiento se puede expresar del siguiente modo (Brey, Dufty and Santos, 1997)

$$\zeta(\mathbf{r}, t) = (1 - \alpha^2) \frac{m\pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma^{d-1} n(\mathbf{r}, t)}{4d\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right) T(\mathbf{r}, t)} \langle V_{12}^3 \rangle, \quad (2.19)$$

donde

$$\langle V_{12}^3 \rangle = \frac{1}{n^2(\mathbf{r}, t)} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|^3 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1; t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2; t) \quad (2.20)$$

es el valor medio del cubo de la velocidad relativa. Las propiedades (2.18) conducen a las ecuaciones de balance (2.6)–(2.8), donde el tensor de presiones y el flujo de calor vienen dados por las siguientes expresiones,

$$\mathbf{P} = m \int d\mathbf{v} \mathbf{V}\mathbf{V} f(\mathbf{v}), \quad (2.21)$$

$$\mathbf{q} = \frac{m}{2} \int d\mathbf{v} V^2 \mathbf{V} f(\mathbf{v}). \quad (2.22)$$

La tasa de enfriamiento ζ es una funcional no lineal de la función de distribución f a través del valor medio del cubo de la velocidad relativa $\langle V_{12}^3 \rangle$. De aquí se desprende que ζ no puede calcularse de modo explícito a menos que se

resuelva previamente la ecuación de Boltzmann del gas IHS. No obstante, se puede obtener una *estimación* de ζ a partir de la ecuación (2.20) sustituyendo la función de distribución real f por la función de distribución de *equilibrio local*

$$f_0(\mathbf{v}) = n(m/2\pi T)^{d/2} \exp(-mV^2/2T). \quad (2.23)$$

En ese caso,

$$\langle V_{12}^3 \rangle \rightarrow \langle V_{12}^3 \rangle_0 = 2^{3/2} \langle V^3 \rangle_0 = 4\pi^{-d/2} \Omega_d \Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right) \left(\frac{T}{m}\right)^{3/2}, \quad (2.24)$$

donde

$$\Omega_d \equiv \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \quad (2.25)$$

es el ángulo sólido total. Si se introduce la aproximación (2.24) en la ecuación (2.19) se obtiene la tasa de enfriamiento en la aproximación de equilibrio local (Brey, Dufty and Santos, 1999; Brey et al., 1998)

$$\zeta_0(\mathbf{r}, t) = \zeta_0^* \nu_0(\mathbf{r}, t), \quad \zeta_0^* \equiv \frac{d+2}{4d} (1 - \alpha^2), \quad (2.26)$$

donde

$$\nu_0 = \frac{4\Omega_d}{\sqrt{\pi}(d+2)} n \sigma^{d-1} \left(\frac{T}{m}\right)^{1/2} \quad (2.27)$$

es una frecuencia de colisión efectiva. La expresión (2.26), obtenida haciendo uso de la aproximación de equilibrio local, muestra ahora la tasa de enfriamiento como una funcional de f a través de la densidad y temperatura locales exclusivamente. Además, su dependencia respecto al grado de inelasticidad es muy sencilla, $\zeta_0 \propto 1 - \alpha^2$.

Es conveniente introducir ahora el operador de colisiones *modificado* (Brey, Dufty and Santos, 1999)

$$\bar{J}^{(\alpha)}[f, f] \equiv J^{(\alpha)}[f, f] - \frac{\zeta}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{V}f). \quad (2.28)$$

Por construcción, el operador $\bar{J}^{(\alpha)}[f, f]$ tiene las siguientes propiedades

$$\int d\mathbf{v} \begin{pmatrix} 1 \\ m\mathbf{v} \\ \frac{1}{2}mV^2 \end{pmatrix} \bar{J}^{(\alpha)}[f, f] = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

que se pueden obtener haciendo uso de la ecuación (2.18).

2.2.2. El modelo

El operador de colisiones inelástico modificado $\bar{J}^{(\alpha)}[f, f]$ tiene en común con el operador de colisiones elástico $J^{(1)}[f, f]$ el hecho de que sus $d + 2$ primeros momentos colisionales son nulos. Sin embargo, $\bar{J}^{(\alpha)}[f, f]$ y $J^{(1)}[f, f]$ difieren en otros muchos aspectos. Para ilustrar estas diferencias podemos considerar de nuevo el estado de enfriamiento colisional homogéneo. Mientras que la función de distribución de velocidades solución de $\bar{J}^{(\alpha)}[f_{\text{hc}}, f_{\text{hc}}] = 0$ es no gaussiana (Brey, Dufty and Santos, 1999), la función solución de $J^{(1)}[f, f] = 0$ sí lo es. Además, el operador de colisiones elástico verifica el teorema H,

$$\int d\mathbf{v} (\ln f) J^{(1)}[f, f] \leq 0, \quad (2.30)$$

mientras que para el operador $\bar{J}^{(\alpha)}[f, f]$ no ha sido demostrado el mencionado teorema. A pesar de estas diferencias, el hecho de que los operadores $\bar{J}^{(\alpha)}[f, f]$ y $J^{(1)}[f, f]$ compartan las propiedades dadas por (2.29) sugiere la posibilidad de que ambos operadores presenten un comportamiento similar en el rango de velocidades térmicas (por ejemplo, para $v \lesssim 2\sqrt{2T/m}$). Esta hipótesis nos conduce a proponer la siguiente aproximación

$$\bar{J}^{(\alpha)}[f, f] \rightarrow \beta J^{(1)}[f, f], \quad (2.31)$$

donde $\beta(\alpha)$ es un parámetro positivo a determinar. La introducción de este parámetro no impide que la ecuación (2.29) siga siendo válida, permitiendo, además, ajustar la equivalencia aproximada de ambos operadores. Otra aproximación que se va a considerar consiste en reemplazar la verdadera tasa de enfriamiento, dada por la ecuación (2.19), por la estimación de equilibrio local (2.26). Teniendo en cuenta ambas aproximaciones, nuestro modelo consiste básicamente en la siguiente sustitución:

$$J^{(\alpha)}[f, f] \rightarrow \beta J^{(1)}[f, f] + \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{V}f), \quad (2.32)$$

de modo que ahora la ecuación de Boltzmann (2.13) se convierte en

$$\left(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla - \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{V} \right) f = \beta J^{(1)}[f, f]. \quad (2.33)$$

En este modelo, el gas de esferas duras *inelásticas* con un coeficiente de restitución α dado es reemplazado por un gas “equivalente” de esferas duras *elásticas* sometido a la acción de una fuerza de fricción $\mathbf{F}_{\text{fric}} = -m\xi\mathbf{V}$, con $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$. Esta fuerza es proporcional a la velocidad peculiar, con un coeficiente de fricción ξ que depende de la densidad y temperatura locales, así como del coeficiente de restitución del gas IHS. La fuerza de fricción \mathbf{F}_{fric} tiene como objetivo intentar reproducir el efecto de enfriamiento que tiene lugar en un gas granular como consecuencia de la inelasticidad de las colisiones entre partículas. El hecho de que en el coeficiente de fricción ξ se haya aproximado la tasa de enfriamiento ζ del gas granular por ζ_0 (o de modo equivalente, $\langle V_{12}^3 \rangle \rightarrow \langle V_{12}^3 \rangle_0$) está motivado fundamentalmente por razón de simplicidad del modelo, puesto que no parece necesario retener la dependencia funcional detallada de la ecuación (2.20), cuando por otro lado se está efectuando una aproximación de mayor orden definida por la ecuación (2.31). Dicho de otro modo, es de esperar que las discrepancias asociadas a la aproximación $\zeta \rightarrow \zeta_0$ sean de menor importancia que las propias de la aproximación (2.31). En cualquier caso, si se deseara mantener la verdadera tasa de enfriamiento ζ en el modelo (2.32), ζ tendría que ser interpretado como una funcional de la solución de la ecuación (2.33) y no como una funcional de la solución de la ecuación (2.13). De no ser así, la ecuación (2.33) no sería una ecuación autónoma y sería preciso conocer la solución de la ecuación de Boltzmann inelástica (2.13) para poder resolver la ecuación de Boltzmann elástica (2.33), lo que es no solamente poco práctico sino también bastante complicado.

En la ecuación (2.14) aparece el coeficiente de restitución normal α tanto de modo explícito (factor α^{-2} dentro del operador de colisiones) como de modo implícito (a través de la regla de colisión (2.3)). Por el contrario, en el modelo (2.32), α aparece explícitamente, y además fuera del operador de colisiones, en la tasa de enfriamiento de equilibrio local $\zeta_0 \propto 1 - \alpha^2$ y en el parámetro a determinar $\beta(\alpha)$. Esta simplificación puede ser justificada en base a que, en un principio, estamos interesados principalmente en los efectos de *grano grueso* que la inelasticidad origina en la función de distribución de velocidades de no equilibrio, pudiéndose esperar que detalles de carácter más *fino* podrían no ser capturados enteramente por el modelo (2.32). Sin embargo, como se verá en el capítulo 4, la fiabilidad del modelo EHS + fricción es mayor de la esperada inicialmente.

Otro aspecto importante a tener en cuenta es el siguiente. Consideremos un gas IHS y un gas EHS + fricción con esferas de diámetros σ y σ' , respectivamente. En principio, no existe ninguna razón para suponer que el sistema EHS + fricción que mejor reproduce las propiedades de transporte del gas granular es aquél tal que $\sigma' = \sigma$, es decir, aquél cuyas esferas tienen el mismo diámetro que las del sistema inelástico. Si σ' y σ fuesen iguales, entonces ambos sistemas

tendrían el mismo tiempo medio entre colisiones pero no necesariamente las mismas tasas de transferencia de momento o energía durante una colisión. El efecto asociado al hecho de que $\sigma' \neq \sigma$ es explicado por el parámetro β . Puesto que $J^{(1)}[f, f]$ se define fijando $\alpha = 1$ en la ecuación (2.14), es proporcional a σ^{d-1} y no a σ'^{d-1} . Por lo tanto, $\beta J^{(1)}[f, f]$ es el operador de colisiones del sistema EHS de esferas de diámetro $\sigma' = \beta^{1/(d-1)}\sigma$. De modo equivalente, la ecuación (2.33) se puede reescribir como

$$\left(\partial_{t'} + \mathbf{v} \cdot \nabla' - \frac{\zeta_0}{2\beta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{V} \right) f = J^{(1)}[f, f], \quad (2.34)$$

donde $t' \equiv \beta t$ y $\nabla' = \partial/\partial \mathbf{r}'$ con $\mathbf{r}' \equiv \beta \mathbf{r}$. De acuerdo con la ecuación (2.34), el sistema IHS original es reemplazado por un sistema EHS con el mismo diámetro $\sigma' = \sigma$, pero con una constante de fricción $\xi' = \zeta_0/2\beta$ y con variables espaciales y temporales escaladas por el factor β . De aquí en adelante, se utilizará la forma del modelo dada por la ecuación (2.33) en lugar de la forma (2.34) e interpretaremos β como un factor correctivo que modifica la frecuencia de colisión del sistema EHS respecto a la del sistema IHS. Esto tiene como consecuencia que después de un cierto intervalo de tiempo común Δt el número de colisiones experimentadas por el gas EHS es, en general, diferente al del sistema IHS. En la sección siguiente se propone una expresión para el parámetro $\beta(\alpha)$ basándose para ello en la comparación de los coeficientes de transporte en el orden de Navier–Stokes de los gases EHS e IHS.

2.3. Coeficientes de transporte de Navier–Stokes

2.3.1. Tensor de esfuerzos y flujo de calor

Los transportes irreversibles de cantidad de movimiento y energía son medidos por el tensor de esfuerzos $\Pi_{ij} = P_{ij} - p\delta_{ij}$ (donde $p = nT = d^{-1}\text{Tr} \mathbf{P}$ es la presión hidrostática) y el flujo de calor \mathbf{q} . Mediante una extensión del método de Chapman–Enskog (Chapman and Cowling, 1970) al caso de colisiones inelásticas (Brey et al., 1998; Garzó and Dufty, 1999a; Brey and Cubero, 2001; Garzó and Montanero, 2002; Santos, 2003), se obtienen las ecuaciones constitutivas de Navier–Stokes

$$\Pi_{\alpha\beta} = -\eta \left(\nabla_{\alpha} u_{\beta} + \nabla_{\beta} u_{\alpha} - \frac{2}{d} \nabla \cdot \mathbf{u} \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (2.35)$$

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n, \quad (2.36)$$

donde η es la viscosidad tangencial, κ es la conductividad térmica y μ es un coeficiente de transporte sin equivalente en el caso elástico. Para el sistema IHS, las expresiones explícitas de los coeficientes de transporte en la *primera aproximación de Sonine* vienen dadas por (Brey et al., 1998; Brey and Cubero, 2001)

$$\eta = \frac{nT}{\nu_0} \frac{1}{\nu_\eta^* - \frac{1}{2}\zeta^*}, \quad (2.37)$$

$$\kappa = \frac{nT}{m\nu_0} \frac{d+2}{2} \frac{1+2a_2^{\text{hc}}}{\nu_\kappa^* - 2\zeta^*}, \quad (2.38)$$

$$\mu = \frac{T^2}{m\nu_0} \frac{d+2}{2} \frac{\zeta^* + a_2^{\text{hc}}\nu_\kappa^*}{(\nu_\kappa^* - \frac{3}{2}\zeta^*)(\nu_\kappa^* - 2\zeta^*)}. \quad (2.39)$$

En estas ecuaciones, la frecuencia de colisiones efectiva ν_0 está definida por la ecuación (2.27),

$$a_2^{\text{hc}} = \frac{16(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{9+24d-\alpha(41-8d)+30\alpha^2(1-\alpha)} \quad (2.40)$$

es una estimación⁴ de la curtosis de la función de distribución de velocidades [ver ecuación (2.12)] en el estado de enfriamiento homogéneo (van Noije and Ernst, 1998), y

$$\zeta^* = \zeta_0^* \left(1 + \frac{3}{16}a_2^{\text{hc}}\right) \quad (2.41)$$

es la tasa de enfriamiento (reducida) en el mismo estado. Además,

$$\nu_\eta^* = \frac{\int d\mathbf{v} \mathbf{D} : \mathcal{L}^{(\alpha)} f_0 \mathbf{D}}{\nu_0 \int d\mathbf{v} f_0 \mathbf{D} : \mathbf{D}} = \frac{3}{4d} \left(1 - \alpha + \frac{2}{3}d\right) (1 + \alpha) \left(1 - \frac{1}{32}a_2^{\text{hc}}\right) \quad (2.42)$$

es la frecuencia de colisión (reducida) asociada a la viscosidad tangencial, donde

$$\mathbf{D}(\mathbf{V}) \equiv m \left(\mathbf{V}\mathbf{V} - \frac{V^2}{d} \mathbf{I} \right), \quad (2.43)$$

⁴Una estimación más precisa es (Montanero and Santos, 2000; Coppex et al., 2003) $a_2^{\text{hc}} = \frac{16(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{25+24d-\alpha(57-8d)-2(1-\alpha)\alpha^2}$. Sin embargo, ambas son prácticamente equivalentes para $\alpha \gtrsim 0.5$, por lo que aquí utilizaremos por razones históricas la estimación (2.40).

y

$$\nu_{\kappa}^* = \frac{\int d\mathbf{v} \mathbf{S} \cdot \mathcal{L}^{(\alpha)} f_0 \mathbf{S}}{\nu_0 \int d\mathbf{v} f_0 \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}} = \frac{1 + \alpha}{d} \left[\frac{d-1}{2} + \frac{3}{16} (d+8)(1-\alpha) + \frac{4+5d-3(4-d)\alpha}{512} a_2^{\text{hc}} \right] \quad (2.44)$$

es la frecuencia de colisión (reducida) asociada a la conductividad térmica, donde

$$\mathbf{S}(\mathbf{V}) \equiv \left(\frac{m}{2} V^2 - \frac{d+2}{2} T \right) \mathbf{V}. \quad (2.45)$$

En la ecuación (2.43), \mathbf{I} es el tensor unitario $d \times d$. En las primeras igualdades de las ecuaciones (2.42) y (2.44), $\mathcal{L}^{(\alpha)}$ representa la linealización del operador de colisiones $J^{(\alpha)}$ en torno al estado de enfriamiento homogéneo:

$$\mathcal{L}^{(\alpha)} \phi \equiv -J^{(\alpha)}[\phi, f_{\text{hc}}] - J^{(\alpha)}[f_{\text{hc}}, \phi]. \quad (2.46)$$

En el modelo EHS + fricción (2.32) los coeficientes de transporte están formalmente dados por las ecuaciones (2.37)–(2.39), excepto que $a_2^{\text{hc}} \rightarrow 0$. Esto está motivado por el hecho de que en el caso de un gas EHS + fricción que se encuentra en el estado de enfriamiento homogéneo la función de distribución es la de equilibrio local⁵ $f_{\text{hc}} = f_0$. Además, ν_{η}^* y ν_{κ}^* están dadas por las primeras igualdades de las ecuaciones (2.42) y (2.44) pero teniendo en cuenta la siguiente sustitución

$$\mathcal{L}^{(\alpha)} \rightarrow \beta \mathcal{L}^{(1)} - \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{V}, \quad (2.47)$$

donde el operador $\mathcal{L}^{(1)}$ está definido por la ecuación (2.46) con $\alpha = 1$ y $f_{\text{hc}} = f_0$. Considerando las siguientes propiedades

$$\mathbf{V} \cdot \partial_{\mathbf{v}} \mathbf{D} = 2\mathbf{D}, \quad \mathbf{V} \cdot \partial_{\mathbf{v}} \mathbf{S} = 3\mathbf{S} + (d+2)T\mathbf{V}, \quad (2.48)$$

se obtienen las siguientes expresiones para las frecuencias de colisión (reducidas) asociadas a la viscosidad tangencial y a la conductividad térmica:

$$\nu_{\eta}^* \rightarrow \beta + \zeta_0^*, \quad (2.49)$$

⁵Recordemos que en el caso de un gas IHS que se encuentre en condiciones de enfriamiento homogéneo, la solución a dicho estado no es una gaussiana, es decir, $f_{\text{hc}} \neq f_0$.

$$\nu_{\kappa}^* \rightarrow \frac{d-1}{d}\beta + \frac{3}{2}\zeta_0^*. \quad (2.50)$$

Por lo tanto, los coeficientes de transporte del modelo EHS + fricción, en la primera aproximación de Sonine, vienen dados por las siguientes expresiones

$$\eta = \frac{nT}{\nu_0} \frac{1}{\beta + \frac{1}{2}\zeta_0^*}, \quad (2.51)$$

$$\kappa = \frac{nT}{m\nu_0} \frac{d+2}{2} \frac{1}{\frac{d-1}{d}\beta - \frac{1}{2}\zeta_0^*}, \quad (2.52)$$

$$\mu = \frac{T^2}{m\nu_0} \frac{d(d+2)}{2(d-1)} \frac{\zeta_0^*}{\beta(\frac{d-1}{d}\beta - \frac{1}{2}\zeta_0^*)}. \quad (2.53)$$

Llegados a este punto hay que tener en cuenta que aún no se ha determinado ninguna expresión para el parámetro β . Para tratar esta cuestión consideremos, por ejemplo, la viscosidad tangencial. La idea es que la viscosidad tangencial dada por el modelo EHS reproduzca de la manera más precisa posible la misma magnitud del gas IHS. Para conseguirlo, igualamos la ecuación (2.51) a la ecuación (2.37) (haciendo en esta última $a_2^{\text{hc}} = 0$, por consistencia), obteniendo de esta forma la expresión del parámetro β que mejor ajusta la viscosidad tangencial de ambos modelos:

$$\beta = \frac{1+\alpha}{2} \left[1 - \frac{d-1}{2d}(1-\alpha) \right] \equiv \beta_{\eta}. \quad (2.54)$$

Procediendo de modo análogo con las ecuaciones (2.52) y (2.38) (con $a_2^{\text{hc}} = 0$) obtendremos la forma del parámetro β que mejor ajusta la conductividad térmica de ambos modelos:

$$\beta = \frac{1+\alpha}{2} \left[1 + \frac{3}{8} \frac{4-d}{d-1}(1-\alpha) \right] \equiv \beta_{\kappa}. \quad (2.55)$$

Por último, repitiendo el proceso anterior para el coeficiente de transporte μ con las ecuaciones (2.53) y (2.39), se obtiene que $\beta_{\mu} = \beta_{\kappa}$.

2.3.2. Autodifusión

Consideremos de nuevo el estado de enfriamiento homogéneo. Supongamos, además, que existe un grupo de partículas marcadas (etiquetadas en lo que

sigue con el subíndice 1) con una densidad inicial no uniforme n_1 . La función de distribución de velocidades f_1 asociada a este grupo de partículas obedece la ecuación de Boltzmann–Lorentz

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) f_1 = J^{(\alpha)}[f_1, f_{\text{hc}}] \equiv -\mathcal{L}_{\text{BL}}^{(\alpha)} f_1. \quad (2.56)$$

Como consecuencia, aparece una corriente de partículas marcadas $\mathbf{j}_1 = m \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f_1(\mathbf{v})$ en sentido contrario al gradiente de concentración. La conservación del número de partículas marcadas viene recogida por la ecuación de continuidad

$$\partial_t n_1 + \frac{1}{m} \nabla \cdot \mathbf{j}_1 = 0. \quad (2.57)$$

En el límite de gradientes pequeños se verifica que

$$\mathbf{j}_1 = -\frac{m}{n} D \nabla n_1, \quad (2.58)$$

donde D es el coeficiente de autodifusión. En el caso de un gas IHS el coeficiente de autodifusión puede ser calculado mediante la aplicación estándar del método de Chapman–Enskog en la primera aproximación de Sonine. El resultado está dado por (Brey et al., 2000)

$$D = \frac{nT}{m\nu_0} \frac{1}{\nu_D^* - \frac{1}{2}\zeta^*}, \quad (2.59)$$

donde

$$\nu_D^* = \frac{\int d\mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathcal{L}_{\text{BL}}^{(\alpha)} f_0 \mathbf{v}}{\nu_0 \int d\mathbf{v} v^2 f_0} = \frac{d+2}{4d} (1+\alpha) \left(1 - \frac{1}{32} a_2^{\text{hc}}\right) \quad (2.60)$$

es la frecuencia de colisión (reducida) asociada al coeficiente de autodifusión.

Si consideramos ahora nuestro modelo EHS + fricción, la ecuación de Boltzmann–Lorentz (2.56) se convierte en

$$\left[\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla - \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}_1) \right] f_1 = \beta J^{(1)}[f_1, f_0] \equiv -\beta \mathcal{L}_{\text{BL}}^{(1)} f_1, \quad (2.61)$$

donde se ha tenido en cuenta que la velocidad peculiar \mathbf{V} que aparece en la parte derecha de la ecuación (2.32) ahora debe ser interpretada como $\mathbf{v} - \mathbf{u}_1$, siendo

$\mathbf{u}_1 = \mathbf{j}_1/mn_1$ la velocidad media de las partículas marcadas. Continuando con nuestro modelo EHS + fricción, la ecuación (2.47) se transforma en

$$\mathcal{L}_{\text{BL}}^{(\alpha)} \rightarrow \beta \mathcal{L}_{\text{BL}}^{(1)} - \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{v}, \quad (2.62)$$

de modo que

$$\nu_D^* \rightarrow \beta \frac{d+2}{2d} + \frac{\zeta_0^*}{2}. \quad (2.63)$$

Además, la presencia del término proporcional a \mathbf{u}_1 en la ecuación (2.61) origina un término extra en el desarrollo de Chapman–Enskog, de modo que el término $\zeta_0^*/2$ que aparece en el denominador de la ecuación (2.59) es reemplazado por ζ_0^* . Teniendo en cuenta estas consideraciones, el coeficiente de autodifusión del modelo EHS + fricción (en la primera aproximación de Sonine) viene dado por

$$D = \frac{nT}{m\nu_0} \frac{1}{\frac{d+2}{2d}\beta - \frac{1}{2}\zeta_0^*}. \quad (2.64)$$

Comparando la ecuación (2.64) con la ecuación (2.59) (haciendo $a_2^{\text{hc}} = 0$ en la última), se obtiene

$$\beta = \frac{1+\alpha}{2} \equiv \beta_D. \quad (2.65)$$

2.3.3. Comparación de los coeficientes de transporte de los gases IHS y EHS + fricción

Como se ha podido constatar, la elección del parámetro $\beta(\alpha)$, según el criterio de optimizar el acuerdo con los coeficientes de transporte del gas IHS, no es única. Dependiendo de la propiedad de transporte en la que estemos interesados, será más conveniente $\beta = \beta_\eta$, $\beta = \beta_\kappa$, $\beta = \beta_D$ o incluso una elección distinta a éstas. Sin embargo, para continuar el análisis fijemos nuestra atención en estos tres posibles valores que puede tomar el parámetro β . En primer lugar, se puede ver que $\beta_\eta < \beta_D < \beta_\kappa$ para $d = 2$ y $d = 3$. Además, como se puede comprobar en la figura 2.2, $\beta_\kappa < 1$ para todo valor de α si $d = 3$. Este hecho nos informa que el diámetro de las partículas del sistema equivalente EHS es menor que el de las partículas del gas IHS ($\sigma' < \sigma$), siendo este efecto mucho más pronunciado con $\beta = \beta_\eta$ que con $\beta = \beta_\kappa$.

En la figura 2.3 se comparan los cuatro coeficientes de transporte del gas IHS ($d = 3$) [ecuaciones (2.37)–(2.39) y (2.59)] con los del sistema EHS + fricción

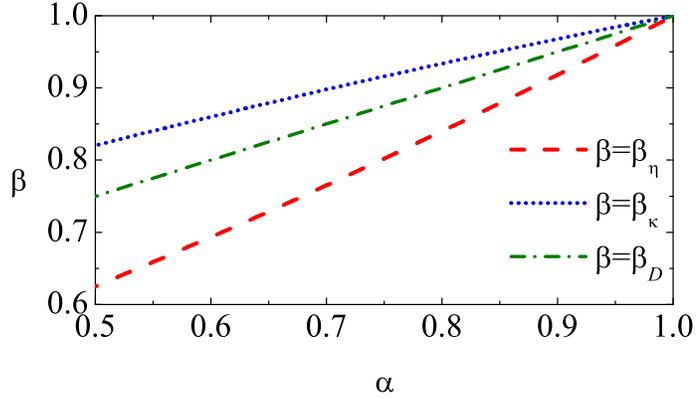


Figura 2.2: Representación de β_η (---), β_κ (····) y β_D (- · - · -) en función del coeficiente de restitución normal α para el caso tridimensional ($d = 3$).

[ecuaciones (2.51)–(2.53) y (2.64)] con $\beta = \beta_\eta$ [ecuación (2.54)], $\beta = \beta_\kappa$ [ecuación (2.55)], $\beta = \beta_D$ [ecuación (2.65)] y $\beta = 1$. En primer lugar, se puede observar que la viscosidad tangencial del gas EHS obtenida con la elección $\beta = \beta_\eta$ reproduce casi perfectamente la viscosidad tangencial IHS. En el caso del coeficiente de autodifusión sucede prácticamente lo mismo pero ahora con la elección $\beta = \beta_D$. Esto es así debido a que la influencia de $a_2^{\text{hc}} \neq 0$ en la tasa de enfriamiento ζ^* [ecuación (2.41)] y en las frecuencias de colisión ν_η^* [ecuación (2.42)] y ν_D^* [ecuación (2.60)] es muy pequeña. Por otro lado, en el caso de los coeficientes κ y μ del sistema EHS con $\beta = \beta_\kappa$ aparecen desviaciones significativas respecto de los mismos coeficientes en el sistema IHS. El origen de estas discrepancias es la presencia explícita de a_2^{hc} en los numeradores de las ecuaciones (2.38) y (2.39), puesto que la influencia de a_2^{hc} en ζ^* y ν_κ^* es, de nuevo, muy pequeña.

Un interrogante que surge de modo natural es el de si existe una elección común del parámetro $\beta(\alpha)$ que reproduzca razonablemente bien la dependencia por parte de los cuatro coeficientes de transporte del coeficiente de restitución normal α . Por ejemplo, en la figura 2.3 se puede ver que la elección $\beta = \beta_\eta$, que es excelente en el caso de la viscosidad tangencial η , sobrevalora de modo apreciable κ , μ , y D . Por otro lado, $\beta = \beta_\kappa$ no es claramente superior a $\beta = \beta_D$ en los casos de κ y μ . Sin embargo, en el caso de η y D , la elección β_D proporciona mejores resultados que β_κ . Finalmente, la elección trivial $\beta = 1$ es la que peores resultados proporciona, especialmente en el caso de la viscosidad tangencial. Teniendo en cuenta todas estas consideraciones, proponemos tomar $\beta = \beta_D = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$. Aunque esta elección infravalora la viscosidad tangencial, este hecho no es un inconveniente muy importante puesto que, de los diferentes coeficientes de transporte, la viscosidad tangencial es el menos sensible a la inelasticidad. Por ejemplo, el cociente entre el valor de un coeficiente de transporte obtenido con $\alpha = 0.5$ y el valor con $\alpha = 1$ es 1.3 en el caso de η , mientras que en los

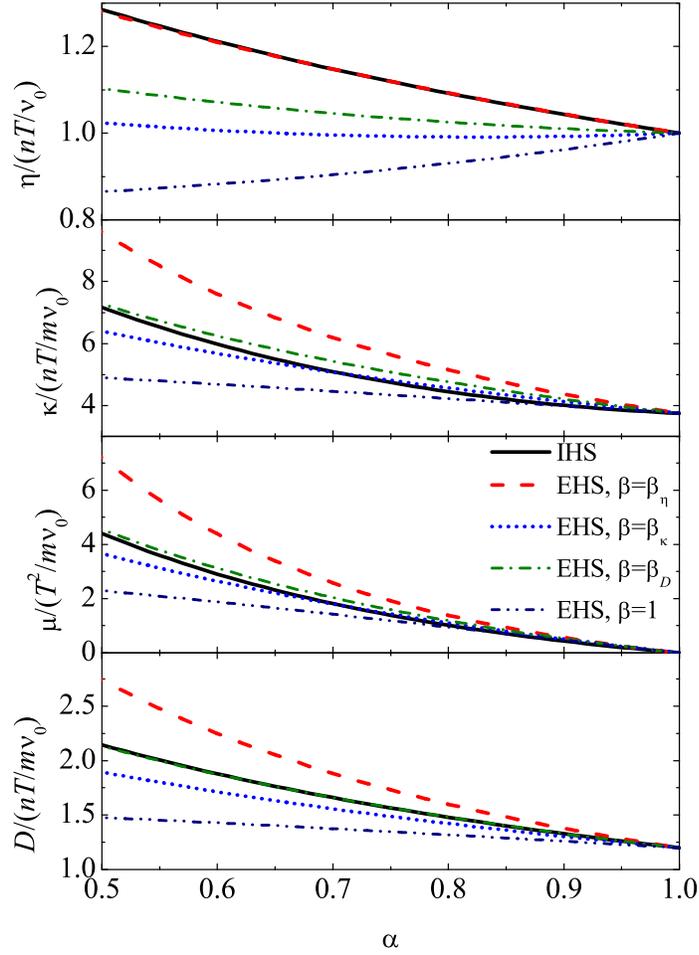


Figura 2.3: Representación de la viscosidad tangencial (reducida) $\eta/(nT/\nu_0)$, la conductividad térmica (reducida) $\kappa/(nT/m\nu_0)$, el coeficiente de transporte (reducido) $\mu/(T^2/m\nu_0)$ y el coeficiente de autodifusión (reducido) $D/(nT/m\nu_0)$ para un gas tridimensional IHS (—) y el sistema equivalente EHS con $\beta = \beta_\eta$ (---), $\beta = \beta_\kappa$ (···), $\beta = \beta_D$ (- · - · -) y $\beta = 1$ (- · · - · -) en función del coeficiente de restitución normal α . Obsérvese que en la gráfica superior, la curva del sistema IHS prácticamente se superpone con la curva del sistema EHS con $\beta = \beta_\eta$. Lo mismo sucede en la gráfica inferior con la curva IHS y la curva EHS con $\beta = \beta_D$.

casos de κ y D son 1.9 y 1.8, respectivamente. Para este elevado valor de la inelasticidad ($\alpha = 0.5$), los coeficientes de transporte del gas EHS + fricción obtenidos con la elección $\beta = \beta_D = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$ difieren de los del gas IHS en un 14% (η), 2% (κ), 3% (μ) y 0.5% (D).

Hay dos razones adicionales favorables a la elección que representa la ecuación (2.65). En primer lugar, tiene una forma más simple que las ecuaciones (2.54) y (2.55), siendo además independiente de la dimensión d . La segunda de las razones deriva de la extensión que del modelo (2.32) se ha hecho a los casos de mezclas diluidas y gases densos, respectivamente. En ambos casos, como veremos en el capítulo 3, la ecuación que recoge la transferencia de energía colisional impone la elección (2.65) como la más natural, sin tener que recurrir a la evaluación de los coeficientes de transporte.

También es importante observar que los coeficientes de transporte obtenidos a partir del modelo EHS + fricción con $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$ y $\beta = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$ exhiben un mejor acuerdo con los coeficientes de transporte del gas IHS que los del modelo de Maxwell inelástico (Santos, 2003). Por otro lado, es importante destacar que la comparación de los coeficientes de transporte obtenidos en la primera aproximación de Sonine con resultados de simulación presenta un buen acuerdo para η (Brey and Ruiz-Montero, 2004; Brey et al., 2005) y D (Brey et al., 2000; Garzó and Montanero, 2004), mientras que en los casos de κ y μ aparecen discrepancias importantes, en particular para inelasticidades grandes (Brey and Ruiz-Montero, 2004; Montanero, Santos and Garzó, 2007; Garzó, Santos and Montanero, 2007).

2.4. Modelos cinéticos

2.4.1. Modelo BGK

La correspondencia aproximada IHS \leftrightarrow EHS nos va a permitir extender al caso inelástico diferentes modelos cinéticos propuestos originalmente para sistemas elásticos. Por ejemplo, consideremos el modelo Bhatnagar–Gross–Krook (BGK) en el caso de esferas duras *elásticas* (Bhatnagar, Gross and Krook, 1954; We-lander, 1954):

$$J^{(1)}[f, f] \rightarrow -\nu_0(f - f_0), \quad (2.66)$$

donde f_0 es la función de distribución de equilibrio local (2.23) y ν_0 es una frecuencia de colisión efectiva que, normalmente, se identifica con la representada por la ecuación (2.27) con el objetivo de que la viscosidad tangencial dada por el modelo BGK esté de acuerdo con la dada por la ecuación de Boltzmann. Por lo tanto, teniendo en cuenta la aproximación (2.32), la extensión del modelo BGK

al caso de esferas duras *inelásticas* sería

$$J^{(\alpha)}[f, f] \rightarrow -\beta\nu_0(f - f_0) + \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{V}f) \quad (2.67)$$

con ζ_0 y β dados por las ecuaciones (2.26) y (2.65), respectivamente. De hecho, el modelo cinético (2.67) puede ser considerado como una simplificación de un modelo ya propuesto con anterioridad (Brey, Dufty and Santos, 1999):

$$J^{(\alpha)}[f, f] \rightarrow -\beta\nu_0(f - f_{\text{hc}}) + \frac{\zeta}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{V}f), \quad (2.68)$$

donde aquí f_{hc} representa la forma *local* del estado de enfriamiento homogéneo, ζ está dada por la ecuación (2.41) y β por (2.54).

El operador de colisiones linealizado correspondiente al modelo BGK (2.67) viene dado por

$$\mathcal{L}^{(\alpha)} \rightarrow \beta\nu_0 - \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{V}. \quad (2.69)$$

Como consecuencia de la ecuación (2.69), la expresión para la frecuencia de colisión reducida asociada a la viscosidad tangencial, ν_η^* , está dada de nuevo por la ecuación (2.49). Sin embargo, en el caso de la frecuencia de colisión reducida asociada a la conductividad térmica ahora se tiene que $\nu_\kappa^* \rightarrow \beta + \frac{3}{2}\zeta_0^*$ en lugar de (2.50). Por lo tanto, la viscosidad tangencial está dada por la ecuación (2.51) mientras que la conductividad térmica y el coeficiente μ están dados por

$$\kappa = \frac{nT}{m\nu_0} \frac{d+2}{2} \frac{1}{\beta - \frac{1}{2}\zeta_0^*}, \quad (2.70)$$

$$\mu = \frac{T^2}{m\nu_0} \frac{d+2}{2} \frac{\zeta_0^*}{\beta(\beta - \frac{1}{2}\zeta_0^*)}, \quad (2.71)$$

expresiones que difieren de las ecuaciones (2.52) y (2.53), respectivamente.

Consideremos de nuevo el mecanismo de autodifusión en el estado de enfriamiento homogéneo. Ahora, la ecuación cinética BGK para las partículas marcadas es

$$\left[\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla - \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}_1) \right] f_1 = -\beta\nu_0 \left(f_1 - \frac{n_1}{n} f_0 \right), \quad (2.72)$$

de modo que el operador de Boltzmann–Lorentz se convierte en

$$\mathcal{L}_{\text{BL}}^{(\alpha)} \rightarrow \beta\nu_0 - \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{v} \quad (2.73)$$

y la frecuencia de colisión reducida asociada al coeficiente de autodifusión es $\nu_D^* \rightarrow \beta + \frac{3}{2}\zeta_0^*$ en lugar de la dada por la ecuación (2.63). Teniendo en cuenta estas consideraciones, la expresión para el coeficiente de autodifusión está dada por

$$D = \frac{nT}{m\nu_0} \frac{1}{\beta - \frac{1}{2}\zeta_0^*}, \quad (2.74)$$

que también es diferente de la expresión (2.64).

La incapacidad del modelo BGK para reproducir simultáneamente los diferentes coeficientes de transporte ya se presentaba en el caso elástico y está motivada fundamentalmente por la inclusión en el modelo de una única frecuencia de colisión ν_0 . En particular, el modelo BGK arroja el valor $\text{Pr} = 1$ para el número de Prandtl $\text{Pr} \equiv (d+2)\eta/2m\kappa$ en el límite elástico, mientras que el valor correcto proporcionado por la ecuación de Boltzmann es (en la primera aproximación de Sonine) $\text{Pr} = (d-1)/d$.

2.4.2. Modelo elipsoidal estadístico

Con el objetivo de evitar la limitación anterior del modelo BGK, se propuso en los años sesenta el denominado modelo elipsoidal estadístico (ES) para partículas elásticas (Cercignani, 1988; Holway, 1966)

$$J^{(1)}[f, f] \rightarrow -\nu_0 \text{Pr}(f - f_R), \quad (2.75)$$

donde

$$f_R(\mathbf{v}) = n \left(\frac{mn}{2\pi} \right)^{d/2} (\det \mathbf{R})^{-1/2} \exp \left(-\frac{mn}{2} \mathbf{R}^{-1} : \mathbf{V}\mathbf{V} \right) \quad (2.76)$$

es una función de distribución gaussiana anisótropa, con el tensor \mathbf{R} dado por

$$\mathbf{R} = \frac{1}{\text{Pr}} [p\mathbf{I} - (1 - \text{Pr})\mathbf{P}], \quad (2.77)$$

siendo \mathbf{P} el tensor de presiones. La elección de la función de distribución f_R en el modelo ES está basada en argumentos de la teoría de la información. Observemos que el modelo ES se reduce al modelo BGK en el caso particular

$\text{Pr} = 1$. En este sentido, podemos considerar Pr como un parámetro libre del modelo, de modo que se recupera el modelo BGK haciendo $\text{Pr} = 1$.

La función de distribución de referencia f_R tiene una norma finita⁶ puesto que \mathbf{R} es una matriz definida positiva⁷, es decir, sus autovalores r_i son positivos. A partir de la ecuación (2.77) se tiene que $r_i = \text{Pr}^{-1}[p - (1 - \text{Pr})p_i]$ donde p_i son los autovalores del tensor de presiones \mathbf{P} . Entonces, y puesto que $\sum_{i=1}^d p_i = dp$, se tiene que $p_i \leq dp$. Teniendo en cuenta esto, y dado que los autovalores r_i son positivos, se puede comprobar que $\text{Pr} \geq (d - 1)/d$. Se puede observar que el límite inferior del número de Prandtl que aparece en el modelo ES coincide con el dado por la ecuación de Boltzmann en la primera aproximación de Sonine. Los primeros momentos de la función de distribución f_R son

$$\int d\mathbf{v} \{1, \mathbf{V}, m\mathbf{V}\mathbf{V}\} f_R(\mathbf{v}) = \{n, \mathbf{0}, \mathbf{R}\}. \quad (2.78)$$

En el modelo BGK (2.66) la función de referencia f_0 (a saber, la función de distribución de equilibrio local) es una funcional de f como consecuencia de su dependencia de los campos hidrodinámicos n , \mathbf{u} y T . En el modelo ES, la función de referencia f_R depende también del flujo de cantidad de movimiento.

Cuando la expresión (2.75) se introduce en (2.32) conseguimos la extensión del modelo ES al caso de esferas duras inelásticas (IHS):

$$J^{(\alpha)}[f, f] \rightarrow -\beta\nu_0\text{Pr}(f - f_R) + \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{V}f). \quad (2.79)$$

No debe confundirse el modelo ES (2.79) con el modelo cinético gaussiano recientemente propuesto por (Dufty, Baskaran and Zogaib, 2004). Una de las diferencias más significativas radica en que la frecuencia de colisión efectiva depende de la velocidad peculiar en el mencionado modelo cinético gaussiano. El modelo cinético (2.79) debe ser distinguido también del método introducido por (Jenkins and Richman, 1988), en el cual se aproxima la función de distribución por una gaussiana anisótropa con la finalidad de obtener un conjunto cerrado de ecuaciones para el tensor de presiones.

El operador de colisiones linealizado asociado a (2.79) viene dado por (2.47),

⁶Entendiendo por “norma finita” que la integral $\int d\mathbf{v} f_R(\mathbf{v}) = n$ es finita.

⁷Sea \mathbf{M} una matriz hermitica ($\mathbf{M}^+ = \mathbf{M}$) de $n \times n$ elementos. Se dice que la matriz \mathbf{M} es definida positiva si cumple cualquiera de las siguientes propiedades equivalentes:

- Para todo vector no nulo $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^n$ se cumple que

$$\mathbf{z}^+ \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{z} > 0.$$

- Todos los autovalores de \mathbf{M} son positivos.

Toda matriz definida positiva es invertible y su inversa es también definida positiva.

donde ahora la acción del operador linealizado en el caso elástico es (Garzó and Santos, 2003)

$$\mathcal{L}^{(1)}\phi(\mathbf{v}) = \nu_0 \left[\text{Pr}\phi(\mathbf{v}) + \frac{1 - \text{Pr}}{2\rho T} f_0(\mathbf{V})\text{D}(\mathbf{V}) : \int d\mathbf{v}' \text{D}(\mathbf{V}')\phi(\mathbf{v}') \right]. \quad (2.80)$$

Haciendo uso de la expresión (2.80) se llega a que la viscosidad tangencial viene dada por (2.51), mientras que la conductividad térmica y el coeficiente μ vienen dados por

$$\kappa = \frac{nT}{m\nu_0} \frac{d+2}{2} \frac{1}{\text{Pr}\beta - \frac{1}{2}\zeta_0^*}, \quad (2.81)$$

$$\mu = \frac{T^2}{m\nu_0} \frac{d+2}{2} \frac{\zeta_0^*}{\text{Pr}\beta(\text{Pr}\beta - \frac{1}{2}\zeta_0^*)}, \quad (2.82)$$

respectivamente. Las ecuaciones (2.81) y (2.82) coinciden con las ecuaciones (2.52) y (2.53) si se hace $\text{Pr} = (d-1)/d$. Además, se recuperan los resultados del modelo BGK (2.70) y (2.71) haciendo $\text{Pr} = 1$.

En el caso del problema de la autodifusión, la ecuación cinética para las partículas etiquetadas en el marco del modelo ES es

$$\left[\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla - \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}_1) \right] f_1 = -\beta\nu_0 \text{Pr} \left(f_1 - \frac{n_1}{n} f_0 \right). \quad (2.83)$$

Por lo tanto,

$$D = \frac{nT}{m\nu_0} \frac{1}{\text{Pr}\beta - \frac{1}{2}\zeta_0^*}, \quad (2.84)$$

expresión que es diferente a la dada por la ecuación (2.64).

2.4.3. Solución de los modelos BGK y ES en el caso del flujo tangencial uniforme

Vamos a analizar ahora las soluciones de ambos modelos en el caso de uno de los estados paradigmáticos de no equilibrio, a saber, el flujo tangencial uniforme, al cual le dedicaremos los capítulos 4 y 5. Con ello se pretende ilustrar

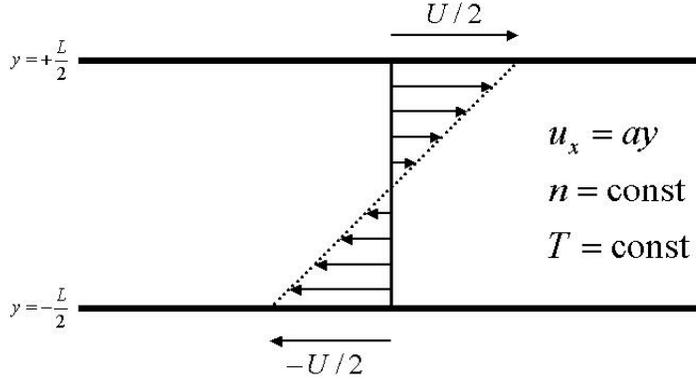


Figura 2.4: Flujo tangencial uniforme (“uniform shear flow”, USF).

la extensión de ambos modelos a sistemas constituidos por esferas duras inelásticas. En la mayor parte de esta Subsección consideraremos el modelo no lineal ES (2.79) con un valor arbitrario para Pr , de modo que $\text{Pr} = 1$ corresponde al modelo BGK y $\text{Pr} = (d-1)/d$ corresponde al verdadero modelo ES.

Como vemos en la figura 2.4, en el flujo tangencial uniforme la densidad es constante, la temperatura granular es uniforme y la velocidad hidrodinámica presenta un perfil lineal $\mathbf{u} = ay\hat{\mathbf{x}}$, donde a es el gradiente de velocidad constante. Desde un punto de vista más fundamental, cuando las velocidades de las partículas se refieren a un sistema de referencia no inercial *lagrangiano* que se mueve con la velocidad media del fluido, la función de distribución de velocidades deviene uniforme:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) = f(\mathbf{V}, t), \quad \mathbf{V} = \mathbf{v} - ay\hat{\mathbf{x}}. \quad (2.85)$$

En estas condiciones, la ecuación del modelo cinético ES se transforma en

$$\partial_t f - aV_y \frac{\partial}{\partial V_x} f - \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\mathbf{V}f) = -\beta\nu_0 \text{Pr}(f - f_R). \quad (2.86)$$

Multiplicando ambos miembros por $mV_i V_j$ e integrando para todas las velocidades se llega a

$$\partial_t P_{ij} + a (\delta_{ix} P_{yj} + \delta_{jx} P_{iy}) + \zeta_0 P_{ij} = -\beta \nu_0 (P_{ij} - p \delta_{ij}), \quad (2.87)$$

donde en el miembro derecho se ha hecho uso de las ecuaciones (2.77) y (2.78). Es importante hacer notar que el conjunto de ecuaciones (2.87) es común tanto al modelo BGK como al modelo ES dado que la constante Pr no aparece en la mencionada ecuación. Además, la estructura de la ecuación (2.87) también aparece en otros modelos cinéticos similares al BGK (Brey, Moreno and Dufty, 1996; Brey, Ruiz-Montero and Moreno, 1997), así como en la ecuación de Boltzmann en la aproximación de Grad (Garzó, 2002; Santos, Garzó and Dufty, 2004). En este último caso, sin embargo, desaparece la flexibilidad de ajustar el parámetro β puesto que, por construcción, $\beta = \beta_\eta$.

Las únicas ecuaciones independientes que se obtienen de la ecuación (2.87) son

$$\partial_t p + \zeta_0 p + \frac{2a}{d} P_{xy} = 0, \quad (2.88)$$

$$\partial_t P_{xy} + (\beta \nu_0 + \zeta_0) P_{xy} + a P_{yy} = 0, \quad (2.89)$$

$$\partial_t P_{yy} + (\beta \nu_0 + \zeta_0) P_{yy} - \beta \nu_0 p = 0. \quad (2.90)$$

La solución correspondiente al estado estacionario es

$$T = \frac{T_0}{\nu_0^2(T_0)} \frac{2a^2}{d} \frac{\beta}{\zeta_0^* (\beta + \zeta_0^*)^2}, \quad (2.91)$$

$$\frac{P_{yy}}{nT} = \frac{\beta}{\beta + \zeta_0^*}, \quad (2.92)$$

$$\frac{P_{xy}}{nT} = -\sqrt{\frac{d}{2}} \frac{\sqrt{\beta \zeta_0^*}}{\beta + \zeta_0^*}, \quad (2.93)$$

donde en la ecuación (2.91) T_0 es una temperatura de referencia arbitraria y $\nu_0(T_0)$ es su frecuencia de colisión asociada. Todos los elementos no diagonales del tensor de presiones son nulos, exceptuando $P_{xy} = P_{yx}$. Además, $P_{yy} = P_{zz} = \dots = P_{dd}$, de modo que $P_{xx} = dp - (d-1)P_{yy}$. Por otro lado, la ecuación (2.91) puede ser escrita de un modo más conveniente como

$$\frac{a}{\nu_0(T)} = \sqrt{\frac{d \zeta_0^*}{2\beta}} (\beta + \zeta_0^*), \quad (2.94)$$

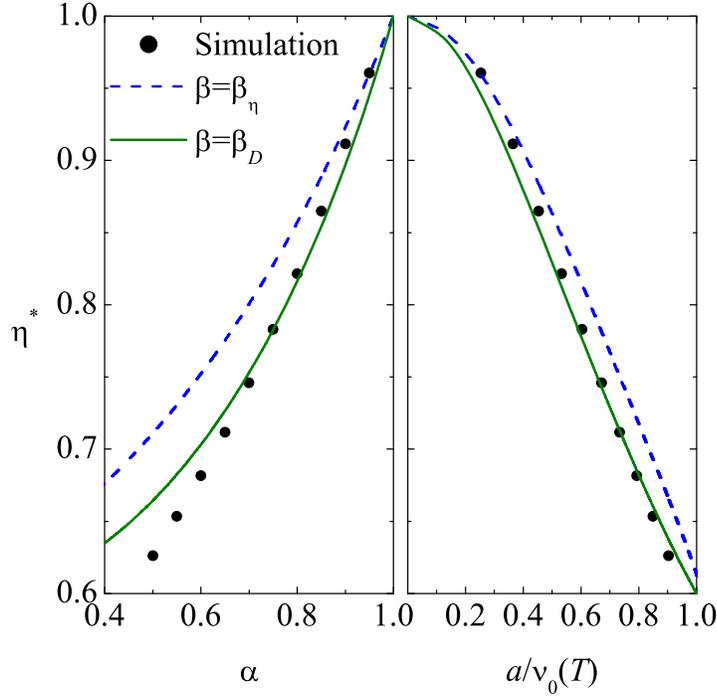


Figura 2.5: Representación de la viscosidad tangencial no newtoniana correspondiente al estado estacionario de un gas de esferas duras inelásticas en el flujo tangencial uniforme, en función del coeficiente de restitución normal α (gráfica de la izquierda) y del gradiente de velocidad reducido a/ν_0 (gráfica de la derecha). Las curvas representan las predicciones comunes de los modelos cinéticos BGK y ES, ecuaciones (2.94) y (2.95), con $\beta = \beta_\eta$ (líneas segmentadas) y $\beta = \beta_D = (1 + \alpha)/2$ (líneas continuas). Los círculos corresponden a nuestros resultados de simulación.

donde aparece expresado el gradiente de velocidad en unidades de la frecuencia de colisión correspondiente al estado estacionario. La reología del flujo tangencial uniforme en el estado estacionario se puede caracterizar de modo conveniente mediante el coeficiente de viscosidad tangencial *no newtoniano*

$$\eta^* \equiv -\frac{P_{xy}}{nT} \frac{\nu_0(T)}{a} = \frac{\beta}{(\beta + \zeta_0)^2}, \quad (2.95)$$

donde se han empleado las ecuaciones (2.93) y (2.94).

En la figura 2.5 se representa la viscosidad tangencial no lineal (2.95) en función del coeficiente de restitución normal α y del gradiente de velocidad

reducido $a/\nu_0(T)$ para $d = 3$ y dos elecciones del parámetro β : $\beta = \beta_\eta$ y $\beta = \beta_D = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$. En dicha figura también se presentan resultados de simulación DSMC (Bird, 1994) de la ecuación de Boltzmann para esferas duras inelásticas [ver capítulo 4]. En primer lugar se observa que, exceptuando el límite cuasi elástico, la elección $\beta = \beta_D$ presenta un acuerdo con los datos de simulación mucho mejor que la opción $\beta = \beta_\eta$, aun a pesar de que la segunda alternativa fue ajustada para reproducir la viscosidad tangencial *newtoniana* (ver figura 2.3). Se ha comentado con anterioridad que las ecuaciones (2.87)–(2.95) con $\beta = \beta_\eta$ han sido obtenidas también a partir de la ecuación de Boltzmann para IHS en la aproximación de Grad. En este sentido es importante hacer notar que tanto el modelo cinético BGK como el ES con la elección $\beta = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$ son más precisos que la aproximación de Grad de la ecuación de Boltzmann para este estado particular. Este resultado algo paradójico es debido en parte al carácter inherentemente no newtoniano del estado estacionario del flujo tangencial uniforme (Santos, Garzó and Dufty, 2004).

La introducción de los modelos cinéticos presenta la importante ventaja de que la función de distribución de velocidades se puede calcular de modo explícito. La solución correspondiente al estado estacionario de la ecuación (2.86) se puede expresar del siguiente modo:

$$f(\mathbf{V}) = \beta\nu_0\text{Pr}\Lambda^{-1}f_R(\mathbf{V}) = \beta\nu_0\text{Pr}\int_0^\infty ds \exp(-\Lambda s) f_R(\mathbf{V}), \quad (2.96)$$

donde el operador Λ está definido por

$$\Lambda = \beta\nu_0\text{Pr} - \frac{d}{2}\zeta_0 - aV_y\frac{\partial}{\partial V_x} - \frac{\zeta_0}{2}\mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}}. \quad (2.97)$$

Dado que los operadores $V_y\partial/\partial V_x$ y $\mathbf{V} \cdot \partial/\partial \mathbf{V}$ conmutan entre sí, se llega a que

$$f(\mathbf{V}) = \beta\nu_0\text{Pr}\int_0^\infty ds \exp\left[-\left(\beta\nu_0\text{Pr} - \frac{d}{2}\zeta_0\right)s\right] f_R\left(e^{\zeta_0 s/2}(\mathbf{V} + asV_y\hat{\mathbf{x}})\right), \quad (2.98)$$

donde se han utilizado las siguientes propiedades

$$\exp\left(asV_y\frac{\partial}{\partial V_x}\right)\phi(\mathbf{V}) = \phi(\mathbf{V} + asV_y\hat{\mathbf{x}}), \quad (2.99)$$

$$\exp\left(\frac{\zeta_0}{2}s\mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}}\right)\phi(\mathbf{V}) = \phi\left(e^{\zeta_0 s/2}\mathbf{V}\right). \quad (2.100)$$

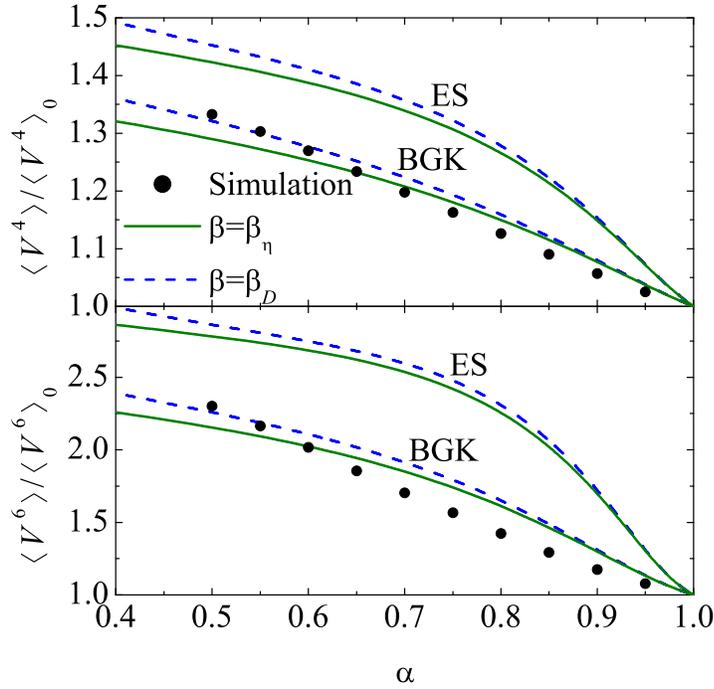


Figura 2.6: Momentos de cuarto y sexto grado de un gas IHS en condiciones de flujo tangencial uniforme en función del coeficiente de restitución normal α , una vez alcanzado el estado estacionario. Ambos momentos se encuentran referidos a sus respectivos valores de equilibrio local. Las curvas representan las predicciones de los modelos cinéticos BGK y ES con $\beta = \beta_\eta$ (líneas continuas) y $\beta = \beta_D = (1 + \alpha)/2$ (líneas segmentadas). Los círculos corresponden a nuestros resultados de simulación.

Teniendo en cuenta que el tensor de presiones, y consiguientemente la función de distribución de referencia f_R , son conocidos, la ecuación (2.98) proporciona de forma explícita la función de distribución de velocidades $f(\mathbf{V})$. A partir de ella se pueden calcular sus respectivos momentos (Santos and Astillero, 2005).

En la figura 2.6 se representan los momentos $\langle V^4 \rangle / \langle V^4 \rangle_0$ y $\langle V^6 \rangle / \langle V^6 \rangle_0$ dados por los modelos cinéticos BGK ($\text{Pr} = 1$) y ES ($\text{Pr} = (d - 1)/d$), así como resultados correspondientes a simulaciones Monte Carlo de la ecuación de Boltzmann de un gas IHS (Astillero and Santos, 2005). La expresión $\langle V^{2k} \rangle_0 = (2T/m)^k \Gamma(k + d/2) / \Gamma(d/2)$ proporciona los momentos de la función de distribución de velocidades de equilibrio local. Lo primero que se puede observar es que, a pesar de que el modelo ES es bastante más sofisticado que el BGK, éste último proporciona mejores resultados en lo que a los momentos de cuarto y sexto grado se refiere. Esta situación también se presenta en el caso elásti-

co (Garz3, 1997). En principio esto puede resultar un tanto parad3jico, sobre todo si no se tiene en cuenta que las ventajas del modelo ES sobre el BGK comienzan a manifestarse en estados en los que el n3mero de Prandtl desempeña un papel relevante, como por ejemplo en estados donde la transferencia de momento lineal y energ3a coexisten. Puesto que en el estado estacionario del flujo tangencial uniforme no hay transporte de energ3a, en principio no existe raz3n alguna para esperar que el modelo ES resulte m3s fiable que el BGK. Por otro lado, en el estado estacionario del flujo de Couette (donde un perfil de temperatura cuasi parab3lico coexiste con un perfil de velocidades cuasi lineal) ambos modelos difieren significativamente en el caso el3stico, siendo el modelo ES el que presenta un mejor acuerdo con resultados de simulaci3n (Garz3 and Santos, 2003; Garz3 and de Haro, 1997; Montanero and Garz3, 1998). Por 3ltimo, en lo que a la influencia de β se refiere, en la figura 2.6 se observa que la elecci3n $\beta = \beta_D = (1 + \alpha)/2$ ajusta mejor con los resultados de simulaci3n para inelasticidades pequeñas o moderadas. Para inelasticidades grandes, por contra, es $\beta = \beta_\eta$ la que ofrece mejor resultado.

Capítulo 3

Extensión del modelo EHS + fricción a sistemas multicomponentes, a fluidos densos y a modelos de Maxwell

3.1. Introducción

En este capítulo continuamos el análisis del modelo de esferas duras elásticas más fricción, extendiéndolo al estudio de las mezclas de gases granulares diluidos, de los fluidos densos monocomponentes y de los modelos de Maxwell. Como veremos, la elección $\beta = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$ se ve reforzada por la comparación entre las propiedades básicas de los sistemas IHS y EHS + fricción en los casos de gases diluidos multicomponentes y de fluidos densos. También compararemos los coeficientes de transporte de un gas de partículas de Maxwell inelásticas (que, en el caso multicomponente, será analizado en detalle en el capítulo 6) con los de un gas de partículas de Maxwell elásticas sometidas a fricción. En ese caso la elección óptima es $\beta = (1 + \alpha)^2/4$ pero, aun así, las propiedades de transporte de ambos sistemas difieren apreciablemente.

3.2. Gases diluidos multicomponentes

3.2.1. Propiedades generales

En el caso de un gas granular multicomponente, la colisión inelástica entre una esfera de la especie i (masa m_i y diámetro σ_i) y una esfera de la especie

j (masa m_j y diámetro σ_j) está caracterizada por un coeficiente de restitución $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$. Las reglas de colisión pos y precolisionales están dadas por

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + \mu_{ij}(1 + \alpha_{ij})(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (3.1)$$

$$\mathbf{v}'' = \mathbf{v} - \mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}^{-1})(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \mathbf{v}''_1 = \mathbf{v}_1 + \mu_{ij}(1 + \alpha_{ij}^{-1})(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (3.2)$$

donde

$$\mu_{ij} \equiv \frac{m_i}{m_i + m_j}. \quad (3.3)$$

Las ecuaciones (3.1) y (3.2) son generalizaciones de las ecuaciones (2.1) y (2.3), respectivamente. De nuevo, la magnitud de la componente de la velocidad relativa poscolisional a lo largo de $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ se ve reducida por un factor α_{ij} , es decir, $\mathbf{g}' \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\alpha_{ij}\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$. La energía cinética también ve reducida su magnitud en un factor proporcional a $1 - \alpha_{ij}^2$, a saber

$$m_i v'^2 + m_j v_1'^2 - m_i v^2 - m_j v_1^2 = -(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 (1 - \alpha_{ij}^2) \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}. \quad (3.4)$$

A partir de la función de distribución de velocidades $f_i(\mathbf{v})$ de la especie i podemos definir la densidad numérica

$$n_i = \int d\mathbf{v} f_i(\mathbf{v}), \quad (3.5)$$

la densidad de masa $\rho_i = m_i n_i$ y la velocidad media

$$\mathbf{u}_i = \frac{1}{n_i} \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f_i(\mathbf{v}) \quad (3.6)$$

de la especie i . Las cantidades globales asociadas son la densidad numérica total $n = \sum_i n_i$, la densidad de masa total $\rho = \sum_i \rho_i$ y la velocidad media (baricéntrica) del fluido

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_i \rho_i \mathbf{u}_i. \quad (3.7)$$

Se define la temperatura granular T de la mezcla como

$$T = \frac{1}{n} \sum_i n_i T_i, \quad \frac{d}{dt} n_i T_i = \frac{m_i}{2} \int d\mathbf{v} V^2 f_i(\mathbf{v}), \quad (3.8)$$

donde $\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ es la velocidad peculiar. En la ecuación (3.8) T_i representa la temperatura granular *parcial* de la especie i . En general, no se verifica la equipartición de la energía, incluso para estados homogéneos, es decir, $T_i \neq T$ (Garzó and Dufty, 1999a).

En el límite de régimen diluido, las funciones de distribución $f_i(\mathbf{v})$ obedecen un sistema de ecuaciones de Boltzmann acopladas,

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) f_i = \sum_j J_{ij}^{(\alpha_{ij})} [f_i, f_j], \quad (3.9)$$

donde el operador de colisiones $J_{ij}^{(\alpha_{ij})} [f_i, f_j]$ viene dado por

$$J_{ij}^{(\alpha_{ij})} [f_i, f_j] = \sigma_{ij}^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) [\alpha_{ij}^{-2} f_i(\mathbf{v}'') f_j(\mathbf{v}_1'') - f_i(\mathbf{v}) f_j(\mathbf{v}_1)], \quad (3.10)$$

siendo $\sigma_{ij} \equiv (\sigma_i + \sigma_j)/2$. En cada colisión i - j se conserva el número de partículas de cada una de las especies,

$$\int d\mathbf{v} J_{ij}^{(\alpha_{ij})} [f_i, f_j] = 0. \quad (3.11)$$

En la colisión de dos partículas (una de la especie i y otra de la j), la cantidad de movimiento del sistema constituido por esas dos partículas se conserva, es decir,

$$m_i \int d\mathbf{v} \mathbf{v} J_{ij}^{(\alpha_{ij})} [f_i, f_j] + m_j \int d\mathbf{v} \mathbf{v} J_{ji}^{(\alpha_{ij})} [f_j, f_i] = \mathbf{0}. \quad (3.12)$$

Como consecuencia, la cantidad de movimiento total de toda la mezcla también se conserva, lo que implica que

$$\sum_{i,j} m_i \int d\mathbf{v} \mathbf{v} J_{ij}^{(\alpha_{ij})} [f_i, f_j] = \mathbf{0}. \quad (3.13)$$

Sin embargo, la energía total no se conserva:

$$\sum_{i,j} \frac{m_i}{2} \int d\mathbf{v} V^2 J_{ij}^{(\alpha_{ij})} [f_i, f_j] = -\frac{d}{2} nT\zeta, \quad (3.14)$$

que define la tasa de enfriamiento ζ de la mezcla.

En general, dada una función arbitraria $\phi(\mathbf{v})$, se puede construir su integral de colisión asociada

$$\begin{aligned} I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[\phi] &\equiv \int d\mathbf{v} \phi(\mathbf{v}) J_{ij}^{(\alpha_{ij})} [f_i, f_j] \\ &= \sigma_{ij}^{d-1} \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\ &\quad \times f_i(\mathbf{v}) f_j(\mathbf{v}_1) [\phi(\mathbf{v}') - \phi(\mathbf{v})], \end{aligned} \quad (3.15)$$

donde en el último paso se ha efectuado un cambio de variables estándar. De esta manera, las ecuaciones (3.11)–(3.14) se pueden reescribir como

$$I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[1] = 0, \quad (3.16)$$

$$I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[m_i \mathbf{v}] + I_{ji}^{(\alpha_{ij})}[m_j \mathbf{v}] = \mathbf{0}, \quad (3.17)$$

$$\sum_{i,j} I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[m_i \mathbf{v}] = \mathbf{0}, \quad (3.18)$$

$$\zeta = -\frac{1}{dnT} \sum_{i,j} I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[m_i V^2]. \quad (3.19)$$

Las integrales de colisión $I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[m_i \mathbf{v}]$ y $I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[m_i V^2]$ no se pueden evaluar de forma exacta para funciones de distribución arbitrarias f_i y f_j . Esta situación es análoga a la que tiene lugar en la ecuación (2.20) correspondiente al caso del gas monocomponente. De nuevo, se puede esperar una estimación razonable si las integrales de colisión se evalúan en la *aproximación gaussiana* (con distintas temperaturas)

$$f_i(\mathbf{v}) \rightarrow f_{i,0}(\mathbf{v}) = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi T_i} \right)^{d/2} \exp(-m_i V^2 / 2T_i), \quad (3.20)$$

donde, por sencillez, nos hemos restringido al caso $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}$ para que se verifique la ecuación (3.6). Se trata de sustituir la función $f_i(\mathbf{v})$ por una distribución $f_{i,0}(\mathbf{v})$

tal que ambas funciones tengan los mismos momentos n_i , $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}$ y T_i . El carácter gaussiano de $f_{i,0}(\mathbf{v})$ es una consecuencia de la teoría de la información, según la cual se escoge $f_{i,0}(\mathbf{v})$ con la condición de maximizar la información perdida $-\int d\mathbf{v} f_i(\mathbf{v}) \ln f_i(\mathbf{v})$. Cuando la aproximación (3.20) se utiliza en la ecuación (3.15), se obtiene (Garzó and Dufty, 1999b; Garzó and Montanero, 2003; Vega, Garzó and Santos, 2007)

$$I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[m_i \mathbf{v}] \rightarrow 0, \quad (3.21)$$

$$I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[m_i V^2] \rightarrow (d+2)n_i T_i \nu_{ij} \frac{1 + \alpha_{ij}}{2} \left[\frac{m_i(T_j - T_i)}{m_j T_i + m_i T_j} - \frac{1 - \alpha_{ij}}{2} \right], \quad (3.22)$$

donde

$$\nu_{ij} = \frac{4\Omega_d}{\sqrt{\pi}(d+2)} n_j \mu_{ji}^2 \sigma_{ij}^{d-1} \left(\frac{2T_i}{m_i} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{m_i T_j}{m_j T_i} \right)^{3/2} \quad (3.23)$$

es una frecuencia de colisión efectiva de una partícula de la especie i con partículas de la especie j . En esta aproximación gaussiana, la tasa de enfriamiento (3.19) se transforma en $\zeta \rightarrow \zeta_0$ con

$$\zeta_0 = \frac{d+2}{4dnT} \sum_{i,j} n_i T_i \nu_{ij} (1 - \alpha_{ij}^2), \quad (3.24)$$

donde se ha utilizado la propiedad $\rho_i T_i \nu_{ij} = \rho_j T_j \nu_{ji}$. En el caso de un gas monocomponente, las ecuaciones (3.23) y (3.24) se reducen a las ecuaciones (2.27) y (2.26), respectivamente.

3.2.2. Modelo EHS + fricción

Una vez que hemos revisado algunas de las propiedades básicas del operador de colisión $J_{ij}^{(\alpha_{ij})}[f_i, f_j]$ en el caso de una mezcla de esferas duras inelásticas, estamos en condiciones de proponer un modelo *mínimo* para esferas duras elásticas con fricción. De acuerdo con la filosofía del modelo representado por la ecuación (2.32), proponemos

$$J_{ij}^{(\alpha_{ij})}[f_i, f_j] \rightarrow \beta_{ij} J_{ij}^{(1)}[f_i, f_j] + \frac{\zeta_{ij}}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot [(\mathbf{v} - \mathbf{u}_i) f_i], \quad (3.25)$$

donde β_{ij} y ζ_{ij} se obtienen optimizando el acuerdo entre las propiedades relevantes del operador verdadero $J_{ij}^{(\alpha_{ij})}[f_i, f_j]$ y las del operador que aparece en la parte derecha de la ecuación (3.25). El hecho de que en la ecuación (3.25) aparezca \mathbf{u}_i en vez de \mathbf{u} se puede justificar en base a varias razones. En primer lugar, y por consistencia con la ecuación (3.20), recordemos que en este estudio nos restringimos al caso en el que $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}$. En segundo lugar, si $\mathbf{u}_i \neq \mathbf{u}$ y en la ecuación (3.25) tomásemos \mathbf{u} en lugar de \mathbf{u}_i , estaríamos hablando de otro modelo diferente y posiblemente la expresión para β_{ij} ya no sería tan sencilla como la que vamos a deducir más adelante. Además, el modelo (3.25) generaliza e incluye como caso particular el modelo (2.61), correspondiente éste último al mecanismo de la autodifusión. Por último y más importante, queremos que en el modelo la funcional que sustituya a $J_{ij}^{(\alpha_{ij})}[f_i, f_j]$ sólo dependa de f_i , f_j y sus respectivos momentos, mientras que \mathbf{u} es una propiedad del conjunto de la mezcla. Para una función dada $\phi(\mathbf{v})$, el modelo (3.25) implica

$$I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[\phi] \rightarrow \beta_{ij} I_{ij}^{(1)}[\phi] - \frac{\zeta_{ij}}{2} \int d\mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_i) \cdot \frac{\partial \phi(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}} f_i(\mathbf{v}). \quad (3.26)$$

La sustitución anterior satisface la ecuación (3.16). Además, es consistente con la ecuación (3.21) en la aproximación gaussiana (3.20). Hasta aquí, β_{ij} y ζ_{ij} permanecen indeterminados. Si introducimos la aproximación gaussiana (3.20) en la ecuación (3.26) con $\phi(\mathbf{v}) = m_i V^2$ obtenemos

$$I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[m_i V^2] \rightarrow \beta_{ij}(d+2)n_i T_i \nu_{ij} \frac{m_i(T_j - T_i)}{m_j T_i + m_i T_j} - \zeta_{ij} d n_i T_i. \quad (3.27)$$

La comparación entre las ecuaciones (3.22) y (3.27) nos sugiere la siguiente elección

$$\beta_{ij} = \frac{1 + \alpha_{ij}}{2}, \quad (3.28)$$

$$\zeta_{ij} = \frac{d+2}{4d} \nu_{ij} (1 - \alpha_{ij}^2). \quad (3.29)$$

Por supuesto, son posibles otras combinaciones para β_{ij} y ζ_{ij} , pero las ecuaciones (3.28) y (3.29) constituyen la elección más sencilla en la situación de ausencia de difusión mutua (es decir, con $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}$). En el caso más general en el que $\mathbf{u}_i \neq \mathbf{u}$, la expresión de ζ_{ij} es más complicada (Vega, Garzó and Santos, 2007).

La ecuación (3.27) subraya que, en general, $I_{ij}^{(\alpha_{ij})}[m_i V^2] \neq 0$ debido fundamentalmente a dos razones. En primer lugar, si las especies i y j tienen energías cinéticas medias diferentes (es decir, $T_i \neq T_j$), entonces las colisiones mutuas

tienden a “equilibrar” las temperaturas parciales de ambas especies. Este efecto de *equipartición*, que también aparece en el caso de colisiones elásticas, viene representado por el término $\beta_{ij}I_{ij}^{(1)}[m_iV^2]$. Por otra parte, incluso si $T_i = T_j$, se cumple que $I^{(\alpha_{ij})}[m_iV^2] \neq 0$ como consecuencia de la inelasticidad de las colisiones, estando este efecto recogido por el término $-\zeta_{ij}dn_iT_i$. Mientras que el primer término puede ser o bien positivo ($T_i < T_j$) o bien negativo ($T_i > T_j$), el segundo término es definido negativo. De esta manera, ζ_{ij} simboliza la tasa de enfriamiento de la especie i debido a las colisiones con partículas de la especie j . Puesto que la disminución relativa de energía después de cada colisión i - j es, de acuerdo con la ecuación (3.4), proporcional a $1 - \alpha_{ij}^2$, parece bastante natural que $\zeta_{ij} \propto 1 - \alpha_{ij}^2$. Un aspecto importante a tener en cuenta y que refuerza significativamente los argumentos presentados es que la elección (3.28) representa la extensión natural de la elección (2.65) que adoptamos en el caso del gas monocomponente. Mientras que en el último caso tuvimos que recurrir a la evaluación de los coeficientes de transporte, la elección (3.28) aparece en el caso de mezclas de gases granulares simplemente a partir de la transferencia de energía debida a las colisiones cuando $T_i \neq T_j$.

3.2.3. Límite browniano

Consideremos ahora el límite browniano de una partícula pesada (especie 1) inmersa en un baño de partículas ligeras (especie 2). En este caso, el operador de Boltzmann–Lorentz para colisiones inelásticas se convierte en el operador de Fokker–Planck (Brey, Dufty and Santos, 1999)

$$J_{12}^{(\alpha_{12})}[f_1, f_2] = \frac{1 + \alpha_{12}}{2} J_{12}^{(1)}[f_1, f_2] - \frac{1}{2} \zeta_{12} \frac{T_1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial v^2} f_1, \quad (3.30)$$

donde

$$J_{12}^{(1)}[f_1, f_2] = \xi_{12} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \left(\mathbf{v} + \frac{T_2}{m_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right) f_1. \quad (3.31)$$

En las ecuaciones anteriores,

$$\xi_{12} = \frac{2\Omega_d}{d\sqrt{\pi}} n_2 \sigma_{12}^{d-1} (m_2/m_1)^{1/2} \left(\frac{2T_2}{m_1} \right)^{1/2} \quad (3.32)$$

es el coeficiente de fricción asociado a las colisiones elásticas y

$$\zeta_{12} = \frac{\xi_{12}}{2} \frac{T_2}{T_1} (1 - \alpha_{12}^2) \quad (3.33)$$

es la tasa de enfriamiento de la partícula browniana debido a las colisiones inelásticas con las partículas del baño. Es importante hacer notar que la ecuación (3.30) respalda de nuevo la elección (3.28). Además, la ecuación (3.33) para ζ_{12} está de acuerdo con el límite $m_1 \gg m_2$ de la propuesta (3.29). Sin embargo, la ecuación exacta de Fokker–Planck (3.30) difiere de nuestro modelo [ver ecuación (3.25)]. Más concretamente,

$$-\frac{\zeta_{12}}{2} \frac{T_1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial v^2} f_1 \rightarrow \frac{\zeta_{12}}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot [(\mathbf{v} - \mathbf{u}_1) f_1]. \quad (3.34)$$

En el segundo miembro de la ecuación (3.34), el papel de imitar el enfriamiento experimentado por la partícula browniana debido a las colisiones es representado por una fuerza de fricción determinista. Sin embargo, en el primer miembro, ese papel lo juega una fuerza de tipo estocástico. Otra cuestión a tener en cuenta es que los dos miembros de la ecuación (3.34) dan contribuciones nulas a las ecuaciones de balance de masa y de cantidad de movimiento, respectivamente. No obstante, proporcionan la misma contribución a la ecuación de balance de energía cuando $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}$. Por lo tanto, podemos esperar que el modelo (3.25) se comporte razonablemente bien incluso en el caso límite de una partícula browniana.

3.2.4. Modelos cinéticos

Recordando lo discutido en la sección 2.4, la correspondencia (3.25) nos permite extender cualquier modelo cinético

$$J_{ij}^{(1)}[f_i, f_j] \rightarrow K_{ij}^{(1)} \quad (3.35)$$

propuesto inicialmente para mezclas de gases *elásticos* (Garzó and Santos, 2003) al caso de mezclas *inelásticas*:

$$J_{ij}^{(\alpha_{ij})}[f_i, f_j] \rightarrow K_{ij}^{(\alpha_{ij})} = \beta_{ij} K_{ij}^{(1)} + \frac{\zeta_{ij}}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot [(\mathbf{v} - \mathbf{u}_i) f_i]. \quad (3.36)$$

De esta manera, se pueden construir de manera directa las versiones inelásticas de modelos cinéticos tales como los de Gross–Krook (Gross and Krook, 1956), Garzó–Santos–Brey (Garzó, Santos and Brey, 1989) o Andries–Aoki–Perthame (Andries, Aoki and Perthame, 2002).

3.3. Gases granulares densos

3.3.1. Ecuación de Enskog para esferas duras inelásticas

Hasta ahora, nos hemos restringido al estudio de gases granulares diluidos. Para esta clase de gases, la ecuación de Boltzmann constituye un marco de descripción muy apropiado. Para densidades más elevadas, la teoría cinética revisada de Enskog, convenientemente generalizada al caso de colisiones inelásticas (Brey, Dufty and Santos, 1997; Dufty, Brey and Santos, 1997), suministra una base sólida para el análisis de los fluidos granulares. La ecuación cinética de Enskog está dada por

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) f = J_E^{(\alpha)}[f], \quad (3.37)$$

donde

$$\begin{aligned} J_E^{(\alpha)}[f] &= \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\ &\times [\alpha^{-2} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{r} - \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}'', \mathbf{v}_1'') - f_2(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_1)]. \end{aligned} \quad (3.38)$$

En esta ecuación, $\boldsymbol{\sigma} \equiv \sigma \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ y

$$f_2(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_1) = \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}_1) \quad (3.39)$$

es la función de distribución precolisional de dos partículas en la aproximación de caos molecular, $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma})$ es el valor de contacto de la función de correlación de pares en equilibrio, vista como una funcional de la densidad. Usamos la notación $J_E^{(\alpha)}[f]$ en lugar de $J_E^{(\alpha)}[f, f]$ para recordar que la dependencia funcional no lineal del operador de colisiones de Enskog de la función de distribución de velocidades f no es bilineal, debido a la presencia de la función de correlación χ .

Calculando los momentos asociados a la velocidad en (3.37), obtenemos de nuevo las ecuaciones de balance hidrodinámicas (2.6)–(2.8), donde la densidad numérica, la velocidad media del fluido y la temperatura granular están definidas por las ecuaciones (2.15)–(2.17), respectivamente. Ahora, sin embargo, tanto el tensor de presiones como el flujo de calor constan de dos contribuciones, una cinética y otra colisional. De forma explícita, $\mathbf{P} = \mathbf{P}_k + \mathbf{P}_c$ y $\mathbf{q} = \mathbf{q}_k + \mathbf{q}_c$. Las contribuciones cinéticas \mathbf{P}_k y \mathbf{q}_k están dadas por las ecuaciones (2.21) y (2.22), mientras que las colisionales son (Brey, Dufty and Santos, 1997; Dufty, Brey and Santos, 1997)

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_c^{(\alpha)}[f] &= \frac{1+\alpha}{4} m\sigma^d \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 \\ &\quad \times \hat{\boldsymbol{\sigma}} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \int_0^1 d\lambda f_2(\mathbf{r} - (1-\lambda)\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{r} + \lambda\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_1), \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_c^{(\alpha)}[f] &= \frac{1+\alpha}{4} m\sigma^d \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 \\ &\quad \times (\mathbf{G} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \int_0^1 d\lambda f_2(\mathbf{r} - (1-\lambda)\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{r} + \lambda\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_1), \end{aligned} \quad (3.41)$$

donde $\mathbf{G} \equiv (\mathbf{V} + \mathbf{V}_1)/2 = (\mathbf{v} + \mathbf{v}_1)/2 - \mathbf{u}(\mathbf{r})$. El superíndice (α) en $\mathbf{P}_c^{(\alpha)}$ y $\mathbf{q}_c^{(\alpha)}$ se ha introducido para enfatizar que ambas magnitudes dependen explícitamente del coeficiente de restitución. También dependen implícitamente de α a través de su dependencia funcional de la función de distribución de velocidades f . De este modo, podemos escribir

$$\mathbf{P}_c^{(\alpha)}[f] = \frac{1+\alpha}{2} \mathbf{P}_c^{(1)}[f], \quad \mathbf{q}_c^{(\alpha)}[f] = \frac{1+\alpha}{2} \mathbf{q}_c^{(1)}[f]. \quad (3.42)$$

La tasa de enfriamiento está dada por (Brey, Dufty and Santos, 1997; Dufty, Brey and Santos, 1997; Brey, Dufty and Santos, 1999)

$$\zeta = (1-\alpha^2) \frac{m\sigma^{d-1}}{4dnT} \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^3 f_2(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_1). \quad (3.43)$$

Las divergencias de las contribuciones colisionales están relacionadas con los momentos del operador de colisiones (Brey, Dufty and Santos, 1997; Dufty, Brey and Santos, 1997),

$$\nabla \cdot \mathbf{P}_c^{(\alpha)} = -m \int d\mathbf{V} \mathbf{V} J_E^{(\alpha)}[f], \quad (3.44)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_c^{(\alpha)} = -\frac{m}{2} \int d\mathbf{V} V^2 J_E^{(\alpha)}[f] - \mathbf{P}_c^{(\alpha)} : \nabla \mathbf{u} - \frac{d}{2} n \zeta T. \quad (3.45)$$

Igual que en el caso diluido, se puede esperar una estimación razonable de la tasa de enfriamiento $\zeta(\mathbf{r}, t)$ si reemplazamos la función de distribución de velocidades por la correspondiente a la aproximación de equilibrio local (2.23). En este caso, la tasa de enfriamiento resultante es

$$\begin{aligned} \zeta_0(\mathbf{r}) &= (1 - \alpha^2) \frac{m\sigma^{d-1}}{4\pi^d dT(\mathbf{r})} \int d\mathbf{C} \int d\mathbf{C}_1 e^{-C^2 - C_1^2} \\ &\quad \times \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^3 \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma}) n(\mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma}), \end{aligned} \quad (3.46)$$

donde ahora $\mathbf{g} = \sqrt{2T(\mathbf{r})/m}\mathbf{C} - \sqrt{2T(\mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma})/m}\mathbf{C}_1 + \mathbf{u}(\mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma})$. La tasa de enfriamiento de equilibrio local $\zeta_0(\mathbf{r})$, además de depender de los valores locales de los campos hidrodinámicos en \mathbf{r} , también depende de sus valores en una superficie esférica de radio σ alrededor del punto \mathbf{r} . También depende de la densidad a través de la función de correlación $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma})$. Si se desprecian estas dependencias, se obtiene el mismo resultado que en el límite diluido, ecuaciones (2.26) y (2.27), con la salvedad que la frecuencia de colisión ν_0 aparece multiplicada por χ .

3.3.2. Modelo EHS + fricción

La extensión natural del modelo (2.32) a la ecuación de Enskog viene dada por

$$J_E^{(\alpha)}[f] \rightarrow \beta J_E^{(1)}[f] + \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{V}f). \quad (3.47)$$

Si insertamos (3.47) en las ecuaciones (3.44) y (3.45), obtenemos

$$\nabla \cdot \mathbf{P}_c^{(\alpha)} \rightarrow \beta \nabla \cdot \mathbf{P}_c^{(1)}, \quad (3.48)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_c^{(\alpha)} + \mathbf{P}_c^{(\alpha)} : \nabla \mathbf{u} \rightarrow \beta \left[\nabla \cdot \mathbf{q}_c^{(1)} + \mathbf{P}_c^{(1)} : \nabla \mathbf{u} \right], \quad (3.49)$$

donde en la ecuación (3.49) hemos efectuado la aproximación $\zeta \rightarrow \zeta_0$. De la comparación con los resultados exactos (3.42) se infiere que $\beta = (1 + \alpha)/2$. Otra vez más, esto refuerza la elección (2.65) efectuada en el caso diluido.

3.3.3. Modelos cinéticos

Hace unos diez años, Dufty y colaboradores (Dufty, Santos and Brey, 1996; Santos et al., 1998) propusieron el siguiente modelo cinético tipo BGK para la ecuación de Enskog *elástica*:

$$\begin{aligned}
J_E^{(1)}[f] \rightarrow & -\nu_0 (f - f_0) - \frac{f_0}{nT} \left[\mathbf{V}\nabla : \mathbf{P}_c^{(1)} \right. \\
& + \left(\frac{mV^2}{dT} - 1 \right) \left(\nabla \cdot \mathbf{q}_c^{(1)} + \mathbf{P}_c^{(1)} : \nabla \mathbf{u} \right) \\
& \left. - \mathbf{A}^{(1)} : \mathbf{D}(\mathbf{V}) - \mathbf{B}^{(1)} \cdot \mathbf{S}(\mathbf{V}) \right], \tag{3.50}
\end{aligned}$$

donde

$$\mathbf{A}^{(1)} \equiv \frac{1}{2T} \int d\mathbf{v} \mathbf{D}(\mathbf{V}) J_E^{(1)}[f_0], \tag{3.51}$$

$$\mathbf{B}^{(1)} \equiv \frac{2m}{(d+2)T^2} \int d\mathbf{v} \mathbf{S}(\mathbf{V}) J_E^{(1)}[f_0]. \tag{3.52}$$

En las ecuaciones (3.50)–(3.52), $\mathbf{D}(\mathbf{V})$ y $\mathbf{S}(\mathbf{V})$ están dados por las ecuaciones (2.43) y (2.45), respectivamente. Ahora, haciendo uso de (3.47), resulta que la extensión del modelo cinético (3.50) al caso de colisiones inelásticas está dada por

$$\begin{aligned}
J_E^{(\alpha)}[f] \rightarrow & -\frac{1+\alpha}{2}\nu_0 (f - f_0) + \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{V}f) \\
& - \frac{f_0}{nT} \left[\mathbf{V}\nabla : \mathbf{P}_c^{(\alpha)} + \left(\frac{mV^2}{dT} - 1 \right) \right. \\
& \times \left(\nabla \cdot \mathbf{q}_c^{(\alpha)} + \mathbf{P}_c^{(\alpha)} : \nabla \mathbf{u} \right) \\
& \left. - \mathbf{A}^{(\alpha)} : \mathbf{D}(\mathbf{V}) - \mathbf{B}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{S}(\mathbf{V}) \right], \tag{3.53}
\end{aligned}$$

donde $\mathbf{A}^{(\alpha)} = \frac{1}{2}(1 + \alpha)\mathbf{A}^{(1)}$, $\mathbf{B}^{(\alpha)} = \frac{1}{2}(1 + \alpha)\mathbf{B}^{(1)}$. El modelo cinético (3.53) para la ecuación de Enskog inelástica resulta ser una versión simplificada de un modelo introducido previamente (Brey, Dufty and Santos, 1999).

3.4. Modelos de Maxwell inelásticos

Recientemente se han introducido modelos en los que la probabilidad de que dos partículas colisionen se considera independiente de la velocidad relativa. Se trata de los llamados modelos de Maxwell inelásticos (“inelastic Maxwell models”, IMM), de los que nos ocuparemos en el capítulo 6 para el caso de sistemas multicomponentes. Mientras tanto, veamos hasta qué punto estos modelos pueden ser imitados por modelos de partículas elásticas con fricción.

3.4.1. Coeficientes de transporte

Retornamos ahora al estudio del gas diluido monocomponente. En principio, se puede aplicar a los modelos de Maxwell inelásticos (IMM) la misma filosofía de la ecuación (2.32). En este caso, el operador de colisiones es (Santos, 2003; Ernst and Brito, 2002b)

$$J^{(\alpha)}[f, f] = \frac{(d+2)\nu_0}{2n\Omega_d} \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\sigma} [\alpha^{-1} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}'') f(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_1) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1)]. \quad (3.54)$$

De nuevo, este operador de colisiones satisface la ecuación (2.18), pero ahora la tasa de enfriamiento está dada exactamente por $\zeta = \zeta_0$, ecuación (2.26). Los coeficientes de transporte asociados al tensor de presiones y al flujo de calor tienen la estructura de las ecuaciones (2.37)–(2.39), salvo que las frecuencias de colisión asociadas ahora están dadas por (Santos, 2003)

$$\nu_\eta^* = \frac{(1+\alpha)(d+1-\alpha)}{2d}, \quad (3.55)$$

$$\nu_\kappa^* = \frac{1+\alpha}{d} \left[\frac{d-1}{2} + \frac{1}{8}(d+8)(1-\alpha) \right], \quad (3.56)$$

y la curtosis correspondiente al estado de enfriamiento homogéneo viene dada por

$$a_2^{\text{hc}} = \frac{6(1-\alpha)^2}{4d-7+3\alpha(2-\alpha)}. \quad (3.57)$$

Haciendo uso de la propiedad (Garzó, 2003)

$$\int d\mathbf{v} \mathbf{v} J^{(\alpha)}[f_1, f_{\text{hc}}] = -\frac{d+2}{2d} \nu_0 m^{-1} \mathbf{j}_1, \quad (3.58)$$

se comprueba que el coeficiente de autodifusión está dado por la ecuación (2.59), excepto que

$$\nu_D^* = \frac{d+2}{2d} \frac{1+\alpha}{2}. \quad (3.59)$$

3.4.2. Modelo de partículas de Maxwell elásticas + fricción

En el caso de modelos de Maxwell elásticos + fricción (EMM), efectuamos la sustitución dada por (2.32). Los coeficientes de transporte correspondientes tienen la misma forma que los del modelo EHS, de modo que vienen dados de nuevo por las ecuaciones (2.51)–(2.53) y (2.64). Igual que hicimos anteriormente, si queremos optimizar el acuerdo entre los coeficientes de transporte de los modelos EMM e IMM, las tres posibles elecciones para el parámetro β son

$$\beta_\eta = \nu_\eta^* - \zeta_0^* = \frac{(1 + \alpha)^2}{4}, \quad (3.60)$$

$$\beta_\kappa = \frac{d}{d-1} \left(\nu_\kappa^* - \frac{3}{2} \zeta_0^* \right) = \frac{(1 + \alpha)^2}{4}, \quad (3.61)$$

$$\beta_D = \frac{2d}{d+2} \nu_D^* = \frac{1 + \alpha}{2}. \quad (3.62)$$

Es interesante observar que tanto la ruta de la viscosidad tangencial como la de la conductividad térmica dan de manera consistente la misma expresión para β , siendo además dicha expresión el cuadrado de la obtenida a partir del coeficiente de autodifusión. Puesto que a_2^{hc} , que para el modelo EMM se anula, no aparece en la viscosidad tangencial ni en el coeficiente de autodifusión de IMM, entonces resulta que el modelo EMM reproduce de forma exacta esos dos coeficientes si $\beta = \beta_\eta = (1 + \alpha)^2/4$ y $\beta = \beta_D = (1 + \alpha)/2$, respectivamente. No obstante, incluso en el caso que $\beta = \beta_\kappa = (1 + \alpha)^2/4$, los coeficientes de transporte κ y μ del modelo IMM difieren de los del modelo EMM como consecuencia de la presencia explícita de a_2^{hc} en el primero de los casos.

Como vemos en la figura 3.1, la opción $\beta = \beta_D = (1 + \alpha)/2$ describe el comportamiento de η , κ y μ solamente de forma cualitativa. La elección alternativa $\beta = \beta_\eta = \beta_\kappa = (1 + \alpha)^2/4$ sobrestima considerablemente el coeficiente de autodifusión y proporciona valores de κ y μ que concuerdan razonablemente bien con los valores del verdadero sistema IMM en condiciones de inelasticidad moderada o baja. Por tanto, el modelo EMM con una expresión única para β reproduce exiguamente los coeficientes de transporte de Navier–Stokes del sistema IMM, en claro contraste con lo que sucede en el caso IHS \leftrightarrow EHS. Esto es una consecuencia del hecho que la influencia de la inelasticidad es mucho más intensa en el modelo IMM que en el IHS, como se observa en la curtosis a_2^{hc} y en los coeficientes de transporte η , κ , μ y D (compárense las figuras 2.3 y 3.1). En realidad, los coeficientes κ y μ divergen en $\alpha = (4 - d)/3d$ para $d = 2$ y $d = 3$ (Santos, 2003), siendo esto un indicativo del fallo de la descripción hidrodinámica del sistema IMM con $\alpha \leq (4 - d)/3d$.

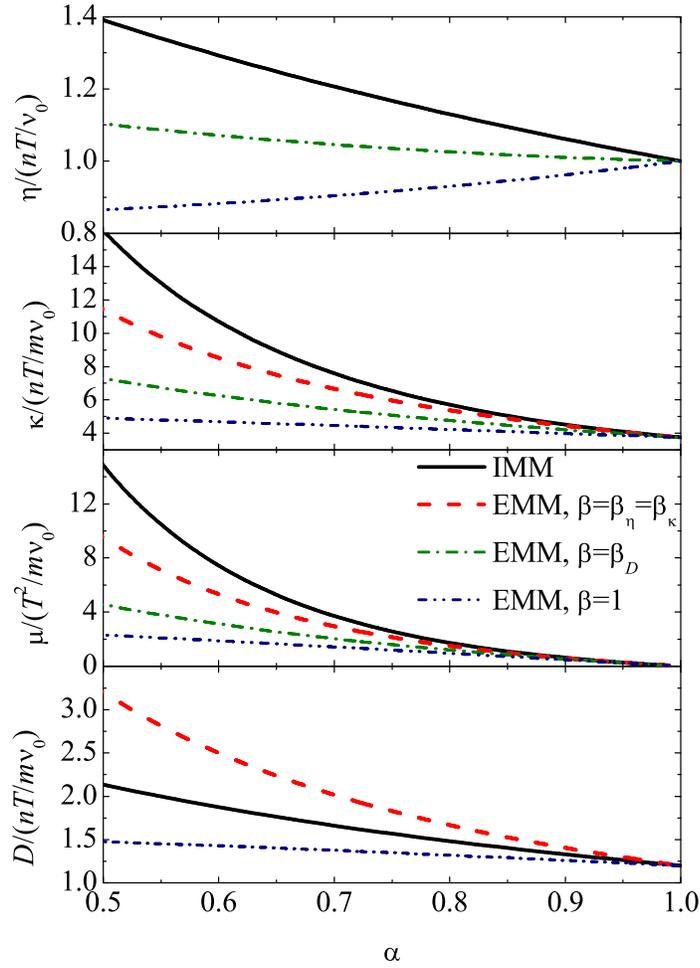


Figura 3.1: Representación de la viscosidad tangencial (reducida) $\eta/(nT/\nu_0)$, la conductividad térmica (reducida) $\kappa/(nT/mv_0)$, el coeficiente de transporte (reducido) $\mu/(T^2/mv_0)$ y el coeficiente de autodifusión (reducido) $D/(nT/mv_0)$ para un gas tridimensional IMM (—) y el sistema equivalente EMM con $\beta = \beta_\eta = \beta_\kappa$ (---), $\beta = \beta_D$ (-·-·-) y $\beta = 1$ (-·-·-) en función del coeficiente de restitución normal α . Obsérvese que en la gráfica superior, la curva del sistema IMM coincide con la curva del sistema EMM con $\beta = \beta_\eta = \beta_\kappa$. Lo mismo sucede en la gráfica inferior con la curva IMM y la curva EMM con $\beta = \beta_D$.

Mientras que, con la excepción del coeficiente de autodifusión [ver el capítulo 6], los coeficientes de transporte de Navier–Stokes de los gases IHS e IMM difieren apreciablemente (Santos, 2003), los correspondientes a los sistemas EHS + fricción y EMM + fricción están en bastante buen acuerdo [ver ecuaciones (2.51)–(2.53) y (2.64)], siendo esto debido en parte a que los primeros son evaluados en la primera aproximación de Sonine y el mismo valor de β es empleado en ambas aproximaciones. Se sabe que en el caso elástico las esferas duras y las partículas de Maxwell presentan propiedades reológicas similares, incluso para estados alejados del equilibrio (Garzó and Santos, 2003). Esto nos muestra que el sistema EMM + fricción con $\beta = (1+\alpha)/2$ se puede aprovechar eficientemente como un modelo para el gas IHS en lugar del IMM, es decir

$$J_{\text{IHS}}^{(\alpha)}[f, f] \rightarrow \frac{1+\alpha}{2} J_{\text{EMM}}^{(1)}[f, f] + \frac{\zeta_0}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{V}f). \quad (3.63)$$

Puesto que el operador de colisiones del modelo EMM es matemáticamente más manejable que el del EHS, podemos considerar la aproximación $\text{IHS} \rightarrow \text{EMM} + \text{fricción}$ en una posición intermedia entre las aproximaciones $\text{IHS} \rightarrow \text{EHS} + \text{fricción}$ e $\text{IHS} \rightarrow \text{modelos cinéticos}$.

Capítulo 4

Flujo tangencial uniforme en gases disipativos

4.1. Introducción

En el capítulo 2 hemos propuesto que un gas “equivalente” de esferas duras elásticas (EHS) es capaz de dar cuenta, hasta cierto punto, de las propiedades de transporte de un gas granular formado por esferas duras inelásticas (IHS) que se encuentra alejado del equilibrio. Esto ha requerido de la utilización de dos ideas básicas. En primer lugar, hemos supuesto que el gas EHS se encuentra sometido a la acción de una fuerza de fricción externa cuya misión es reproducir la pérdida de energía que tiene lugar en las colisiones entre partículas del auténtico gas granular. Esto va a garantizar que el balance local de energía sea aproximadamente el mismo en ambos sistemas. En segundo lugar, la frecuencia de colisión del gas EHS se ve reducida por un factor $\beta(\alpha)$ respecto a la del sistema IHS, suponiendo que la densidad y la temperatura locales son las mismas en ambos sistemas.

Este capítulo está dedicado a validar estas ideas mediante simulaciones en ordenador de ambos sistemas. Para ello, primero veremos hasta que punto el sistema EHS + fricción tiene éxito a la hora de reproducir las propiedades de transporte del gas granular. Para efectuar esta tarea escogemos un estado paradigmático de no equilibrio, a saber, el flujo tangencial uniforme (*uniform shear flow*, USF). Esta elección está motivada por el hecho de que el estado USF es intrínsecamente no newtoniano (Goldhirsch, 2003; Santos, Garzó and Dufty, 2004), lo cual lo convierte en un estado ideal para comprobar si los gases IHS y EHS se comportan de modo similar en condiciones muy alejadas del equilibrio. Como se puede comprobar más adelante, resulta que la mayor

parte de las propiedades de no equilibrio de ambos gases son prácticamente indistinguibles para valores de la disipación tan significativos como $\alpha \approx 0.7$. Para valores mayores de la inelasticidad el acuerdo sigue siendo bueno, al menos desde un punto de vista semicuantitativo.

El segundo objetivo del trabajo recogido en este capítulo es la realización de un estudio profundo de las propiedades más relevantes del flujo tangencial uniforme en el caso de gases granulares. Este estudio incluye, por ejemplo, el análisis del estado transitorio (omitido usualmente en otros trabajos), el cual se puede considerar que consta de dos etapas bien diferenciadas: una etapa primera *cinética* seguida de una etapa *hidrodinámica*¹. En el estado estacionario prestaremos un especial interés a los cumulantes de la velocidad y a la función de distribución propiamente dicha, además de las propiedades reológicas.

4.2. Algunas definiciones de tiempos característicos

Hasta ahora, en todos los análisis y cálculos efectuados en los capítulos anteriores, hemos considerado gases en d dimensiones. En este capítulo, restringimos nuestra atención a sistemas tridimensionales ($d = 3$). Conviene también introducir la definición de algunos tiempos de colisión característicos (Astillero and Santos, 2005).

En primer lugar, definimos un tiempo característico (local) como

$$\tau = \frac{\lambda}{\sqrt{2T/m}} \quad (4.1)$$

donde

$$\lambda = \left(\sqrt{2\pi} n \sigma^2 \right)^{-1} \quad (4.2)$$

es el recorrido libre medio (local). El tiempo característico τ definido en las ecuaciones (4.1) y (4.2) es del orden del tiempo medio entre colisiones (en la aproximación de equilibrio local) τ_{mft} , esto es,

$$\tau_{\text{mft}} = \frac{\lambda}{\langle V \rangle_0} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \tau, \quad (4.3)$$

¹Un estudio más detallado de la separación de estas dos etapas se presentará en el capítulo 5.

donde se ha tenido en cuenta que el valor medio del módulo de la velocidad peculiar está dado por $\langle V \rangle \rightarrow \langle V \rangle_0 = \sqrt{8T/\pi m}$ en la aproximación de equilibrio local.

Es útil introducir un nuevo tiempo característico τ_η asociado a la transferencia de cantidad de movimiento o viscosidad. Está dado por

$$\tau_\eta = \frac{\eta_0}{nT} = 1.016 \frac{5\sqrt{\pi}}{8} \tau, \quad (4.4)$$

donde $\eta_0 = 1.016 \times 5\sqrt{mT/\pi}/16\sigma^2$ es la viscosidad tangencial de Navier–Stokes en el límite elástico ($\alpha \rightarrow 1$) (Chapman and Cowling, 1970). Obsérvese que $\tau_\eta/\tau \approx \tau/\tau_{\text{mft}} \approx 1.13$

4.3. Flujo tangencial uniforme (USF)

El flujo tangencial uniforme es un caso paradigmático de estado alejado del equilibrio y ha sido extensamente estudiado, tanto en el caso de fluidos convencionales (Garzó and Santos, 2003) como en el caso de gases granulares (Lun et al., 1984; Santos, Garzó and Dufty, 2004; Montanero et al., 2006). En este estado [ver figura 2.4], el gas se encuentra confinado entre dos planos paralelos e infinitos localizados en $y = -L/2$ e $y = +L/2$ y en movimiento relativo con velocidades $-U/2$ y $+U/2$, respectivamente, en la dirección del eje x . Estos planos no representan verdaderas paredes, en contraste con lo que ocurre en el flujo de Couette (Tij et al., 2001). En realidad, los planos $y = \pm L/2$ se comportan como fronteras virtuales en las cuales se aplican las condiciones de contorno de Lees–Edwards (Lees and Edwards, 1972; Dufty et al., 1986): cada vez que una partícula cruza uno de los planos con una velocidad dada \mathbf{v} , es vuelta a ser introducida en el sistema, pero esta vez a través del plano opuesto y con una nueva velocidad \mathbf{v}' tal que la velocidad relativa de la partícula respecto al plano se conserva. Es decir, en el caso de que la partícula de velocidad \mathbf{v} sea reintroducida por el plano inferior lo hará con velocidad $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - U\hat{\mathbf{x}}$ mientras que en el caso de que lo haga por el plano superior la nueva velocidad será $\mathbf{v}' = \mathbf{v} + U\hat{\mathbf{x}}$. En términos de la función de distribución de velocidades, estas condiciones de contorno periódicas generalizadas se expresan como

$$f(y = \pm L/2, \mathbf{v}; t) = f(y = \mp L/2, \mathbf{v} \mp U\hat{\mathbf{x}}; t). \quad (4.5)$$

Este mecanismo inyecta energía en el sistema. Supongamos que una partícula con velocidad \mathbf{v} cruza, por ejemplo, el plano superior (es decir, $v_y > 0$); teniendo en cuenta las condiciones de contorno aplicadas, dicha partícula es reintroducida por el plano inferior con una nueva velocidad dada ahora por $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - U\hat{\mathbf{x}}$. El cambio en la energía cinética es proporcional a $v'^2 - v^2 = 2U(U/2 - v_x)$, el cual es

positivo (negativo) si $v_x < U/2$ ($v_x > U/2$). De este modo y como consecuencia de las condiciones de contorno, unas partículas ganan energía mientras que a otras les sucede lo contrario. Por otro lado, el movimiento de cizalladura tiende a producir un elemento xy del tensor de presiones negativo ($P_{xy} < 0$), de modo que aquellas partículas que se encuentran moviéndose hacia arriba, cerca del plano superior, van a cumplir generalmente que $v_x - U/2 < 0$. Como consecuencia, se va a tener que, en promedio, $v'^2 - v^2 > 0$, es decir, es más probable que la partícula gane energía cuando atraviesa el plano que lo contrario. Este mecanismo de *calentamiento viscoso* tiende a incrementar la temperatura frente al efecto contrario de enfriamiento que origina la inelasticidad de las colisiones (en el gas IHS) o la fuerza de fricción (en el caso EHS).

Es de esperar que, partiendo de una condición inicial dada $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; 0)$ y después de una cierta etapa transitoria, el sistema alcance un estado estacionario fuera del equilibrio donde los mecanismos de calentamiento y enfriamiento que acabamos de comentar se compensan mutuamente. Este estado estacionario se caracteriza por una densidad y temperatura uniformes, y por un perfil lineal de velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = ay\hat{\mathbf{x}}$, donde $a = U/L$ representa el gradiente de velocidad impuesto. Por otro lado, cuando las velocidades de las partículas se refieren a un sistema de referencia no inercial que se mueve con la velocidad media del fluido (sistema lagrangiano) la función de distribución correspondiente al estado estacionario deviene homogénea (Dufty et al., 1986):

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \rightarrow f(\mathbf{V}), \quad \mathbf{V} = \mathbf{v} - ay\hat{\mathbf{x}}. \quad (4.6)$$

Si la función de distribución de velocidades inicial $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; 0)$ depende espacialmente sólo a través de la coordenada y perpendicular a los planos, las ecuaciones de Boltzmann (2.13) y (2.33) mantienen esta propiedad, con lo cual podemos hacer

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \rightarrow v_y \frac{\partial}{\partial y}. \quad (4.7)$$

Además, si a $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; 0)$ se le puede aplicar la propiedad (4.6), de nuevo las ecuaciones de Boltzmann (2.13) y (2.33) mantienen esta propiedad, lo cual implica que

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \rightarrow -aV_y \frac{\partial}{\partial V_x}. \quad (4.8)$$

En este último caso, las ecuaciones (2.13) y (2.33) son espacialmente homogéneas (en el sistema de referencia no inercial lagrangiano). En ese caso, el papel de la convección es representado por una fuerza de inercia no conservativa

$\mathbf{F}_{\text{shear}} = -mV_y \hat{\mathbf{x}}$. A partir de aquí, nos referiremos a la solución transitoria de las ecuaciones (2.13) y (2.33) con la sustitución (4.8) como el problema transitorio *homogéneo*.

Supongamos de nuevo que la función de distribución de velocidades inicial $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; 0)$ depende espacialmente únicamente a través de y . Si después de aplicar a dicha función la transformación (4.6), aquella no deviene homogénea, entonces sólo podemos utilizar en la ecuación de Boltzmann correspondiente (IHS o EHS + fricción) la sustitución (4.7). En este caso, las ecuaciones (2.13) y (2.33) no son espacialmente homogéneas (ni siquiera en el sistema de referencia no inercial lagrangiano), con lo que sus soluciones transitorias definen lo que denominaremos problema transitorio *inhomogéneo*.

Para el caso del problema transitorio inhomogéneo hemos considerado dos condiciones iniciales diferentes. La primera de ellas corresponde al estado de equilibrio

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; 0) = \bar{n} \left(\frac{m}{2\pi T^0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{mv^2}{2T^0} \right), \quad (4.9)$$

donde \bar{n} y T^0 son constantes². Inicialmente, de acuerdo con la ecuación (4.9), el gas se encuentra en reposo (respecto al sistema de referencia inercial del laboratorio). Inmediatamente, las condiciones de contorno de Lees–Edwards provocan el movimiento del fluido que se encuentra cerca de las paredes. Como consecuencia, este movimiento se propaga al resto del sistema gracias a dos efectos, el flujo libre de partículas y las colisiones. Pasado un cierto tiempo, la velocidad media del fluido presenta un perfil lineal $u_x(y) = ay$. El periodo transitorio que va desde $u_x = 0$ hasta $u_x = ay$ lleva asociado la aparición de inhomogeneidades en los perfiles de densidad y temperatura, incluso aunque estas cantidades inicialmente sean homogéneas. La segunda de las condiciones iniciales está definida por la función de distribución

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; 0) = \frac{n^0(y)}{4\pi V^0{}^2} \delta(|\mathbf{v} - \mathbf{u}^0(y)| - V^0), \quad (4.10)$$

donde los campos de densidad y velocidad media iniciales están dados por

$$n^0(y) = \bar{n} \left(1 + \frac{1}{2} \sin \frac{2\pi y}{L} \right), \quad (4.11)$$

²Con la finalidad de que la notación gane en claridad, empleamos el superíndice 0 para referirnos a cantidades iniciales (por ejemplo, T^0), mientras que reservamos el subíndice 0 para denotar magnitudes relacionadas con la función de distribución de equilibrio local (por ejemplo, ζ_0).

$$\mathbf{u}^0(y) = U \left(\cos \frac{\pi y}{L} - \frac{2}{\pi} \right) \hat{\mathbf{x}}, \quad (4.12)$$

respectivamente. La temperatura inicial $T^0 = mV^0^2/3$, por contra, es homogénea. El estado inicial definido por (4.10) es muy diferente del recogido en (4.9). Ahora, todas las partículas tienen el mismo módulo V^0 de la velocidad peculiar. Además, mientras que las condiciones de contorno de Lees–Edwards conducen a un perfil de densidad simétrico y a uno de velocidad media antisimétrico, las nuevas condiciones iniciales (4.11) y (4.12) tienen simetrías opuestas a las del USF, es decir, el perfil de densidad inicial es antisimétrico y el de velocidad media inicial es simétrico: $n^0(-y) - \bar{n} = -[n^0(y) - \bar{n}]$ y $\mathbf{u}^0(-y) = \mathbf{u}^0(y)$. Por lo tanto, se esperan gradientes importantes de densidad y velocidad media durante el periodo de tiempo que transcurre hasta que las condiciones de contorno impongan el perfil lineal de velocidad media y una densidad y temperatura homogéneas.

Con independencia de la preparación inicial del sistema, la conservación del número total de partículas conduce a que la densidad promedio calculada en cualquier instante de tiempo coincide con el valor inicial \bar{n} , es decir,

$$\bar{n} = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dy n(y, t). \quad (4.13)$$

Sin embargo, la temperatura promediada espacialmente

$$\bar{T}(t) = \frac{1}{\bar{n}L} \int_{-L/2}^{L/2} dy n(y, t) T(y, t) \quad (4.14)$$

cambia a medida que transcurre el tiempo, durante la etapa transitoria, como consecuencia de la competencia entre el enfriamiento disipativo y el calentamiento viscoso.

Un modo alternativo de medir el tiempo, físicamente más interesante, es a través del número acumulado de colisiones por partícula $s(t)$, que representa el número medio de colisiones que experimenta cada partícula desde el estado inicial hasta el tiempo t . En la aproximación de equilibrio local, $s(t) = s_0(t)$, donde

$$s_0(t) = \frac{1}{2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\bar{n}L} \int_0^t dt' \int_{-L/2}^{L/2} dy \frac{n(y, t')}{\tau(y, t')}. \quad (4.15)$$

Aquí, el tiempo característico local $\tau(y, t)$ está dado por las ecuaciones (4.1) y (4.2). El factor $\frac{1}{2}$ tiene en cuenta que en cada colisión hay dos partículas

involucradas, mientras que el factor $2/\sqrt{\pi}$ proviene de la relación $\tau_{\text{mft}}/\tau = \sqrt{\pi}/2$ [ver ecuación (4.3)]. Observemos que $s_0(t)$ es el número medio de colisiones por partícula (en la aproximación de equilibrio local) del gas IHS. Análogamente para el gas EHS + fricción, la cantidad $s'_0(t)$ se obtiene a partir de la ecuación (4.15) utilizando el tiempo característico local $\tau'(y, t)$ dado por

$$\tau' = \frac{\lambda'}{\sqrt{2T/m}}, \quad \lambda' = \frac{1}{\beta} \left(\sqrt{2}n\pi\sigma^2 \right)^{-1}, \quad (4.16)$$

en lugar de $\tau(y, t)$.

En principio se va a tener que $s'_0(t) \neq \beta s_0(t)$ y, de un modo más general, $s'(t) \neq \beta s(t)$, a menos que la densidad y la temperatura sean las mismas en ambos sistemas³.

En el análisis del problema transitorio homogéneo, el punto de partida inicial es un estado de *equilibrio local* dado por

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; 0) = \bar{n} \left(\frac{m}{2\pi T^0} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m}{2T^0} (\mathbf{v} - ay\hat{\mathbf{x}})^2 \right]. \quad (4.17)$$

En este caso, si las velocidades de las partículas se refieren al sistema de referencia no inercial lagrangiano, entonces el estado inicial se hace homogéneo [ver ecuación (4.6)]. De este modo, el campo de velocidad media es lineal, $u_x = ay$, la densidad es constante, $n = \bar{n}$ y la temperatura es homogénea, $T(y, t) = T(t)$. En ese caso, la ecuación (4.15) se transforma en

$$s_0(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{dt'}{\tau(t')}, \quad (4.18)$$

con una expresión similar para $s'_0(t)$ para el sistema EHS + fricción.

Además de la temperatura $T(t)$ y de los elementos del tensor de presiones $P_{ij}(t)$, también evaluamos en el problema transitorio homogéneo la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ así como los cumulantes cuarto y sexto,

$$a_2 = \frac{\langle V^4 \rangle}{\langle V^4 \rangle_0} - 1, \quad a_3 = -\frac{\langle V^6 \rangle}{\langle V^6 \rangle_0} + 1 + 3a_2, \quad (4.19)$$

donde $\langle V^4 \rangle_0 = 15(T/m)^2$ y $\langle V^6 \rangle_0 = 105(T/m)^3$. Recordemos que la cantidad $\langle V_{12}^3 \rangle$ está directamente relacionada con la tasa de enfriamiento del gas

³Observemos que, estrictamente hablando, las relaciones $\lambda' = \lambda/\beta$ y $\tau' = \tau/\beta$ únicamente son ciertas si los gases EHS + fricción e IHS tienen la misma densidad y temperatura.

IHS a través de la ecuación (2.19), mientras que los cumulantes miden el grado de desviación de la función de distribución de velocidades respecto a la de Maxwell–Boltzmann. Estas desviaciones también son monitorizadas a través de las cantidades siguientes

$$R_\ell(t) = \frac{\int_{W_\ell}^{W_{\ell+1}} dV V^2 \int d\widehat{\mathbf{V}} f(\mathbf{V}, t)}{\int_{W_\ell}^{W_{\ell+1}} dV V^2 \int d\widehat{\mathbf{V}} f_0(\mathbf{V}, t)}, \quad \ell = 0, 1, 2, 3. \quad (4.20)$$

$R_\ell(t)$ representa la fracción de partículas que en un instante t tienen un módulo de la velocidad comprendido entre W_ℓ y $W_{\ell+1}$, dividida por la misma fracción en equilibrio local. Para los límites de integración hemos considerado los siguientes valores $W_\ell = C_\ell \sqrt{2T(t)/m}$ con $C_0 = 0$, $C_1 = 1$, $C_2 = 2$, $C_3 = 3$ y $C_4 = \infty$.

En cualquiera de los dos problemas transitorios, la temperatura final correspondiente al estado estacionario, T_s , es menor o mayor que la temperatura inicial T^0 dependiendo de si inicialmente domina el enfriamiento disipativo o, por el contrario, lo hace el calentamiento viscoso. Mediante análisis dimensional se demuestra que $T_s \propto a^2 F(\alpha)$, donde $F(\alpha)$ es una cierta función de α . Si ahora escalamos T_s con a^2 resulta que la temperatura del estado estacionario sólo depende de α . Hacer este escalamiento es equivalente a escalar el tiempo característico del estado estacionario τ_s con a^{-1} puesto que $\tau_s \propto T_s^{-1/2}$. Es decir, escalando la temperatura del estado estacionario convenientemente, resulta que el estado estacionario alcanzado no depende ni de la temperatura inicial ni del gradiente de velocidad, solamente depende del coeficiente de restitución normal α . De un modo más general, la función de distribución de velocidades *reducida* correspondiente al estado estacionario,

$$f_s^*(\mathbf{C}) = \frac{1}{n} \left(\frac{2T_s}{m} \right)^{3/2} f_s(\mathbf{V}), \quad \mathbf{C} = \frac{\mathbf{V}}{\sqrt{2T_s/m}}, \quad (4.21)$$

depende de α pero es independiente del gradiente de velocidad a y del estado inicial del sistema.

Las propiedades de simetría del flujo tangencial uniforme conducen a

$$f_s^*(C_x, C_y, C_z) = f_s^*(C_x, C_y, -C_z) = f_s^*(-C_x, -C_y, C_z). \quad (4.22)$$

Dado que $f_s^*(\mathbf{C})$ depende de las tres componentes de la velocidad de un modo no trivial, su visualización resulta complicada, de modo que es conveniente definir las siguientes funciones de distribución marginales:

$$g_x^{(\pm)}(C_x) = \int_{-\infty}^{\infty} dC_z \int_{-\infty}^{\infty} dC_y \Theta(\pm C_y) f_s^*(\mathbf{C}), \quad (4.23)$$

$$g_y^{(\pm)}(C_y) = \int_{-\infty}^{\infty} dC_z \int_{-\infty}^{\infty} dC_x \Theta(\pm C_x) f_s^*(\mathbf{C}), \quad (4.24)$$

$$F(C) = C^2 \int d\hat{\mathbf{C}} f_s^*(\mathbf{C}). \quad (4.25)$$

La función $g_x^{(+)}(C_x)$ representa la distribución de la componente x de la velocidad de aquellas partículas que se mueven hacia arriba, es decir, con $C_y > 0$. Las demás funciones $g_x^{(-)}(C_x)$, $g_y^{(+)}(C_y)$ y $g_y^{(-)}(C_y)$ tienen un significado similar. Por otro lado, las propiedades de simetría (4.22) implican que

$$g_x^{(+)}(C_x) = g_x^{(-)}(-C_x), \quad g_y^{(+)}(C_y) = g_y^{(-)}(-C_y). \quad (4.26)$$

Mientras que las funciones (4.23) y (4.24) proporcionan información sobre la anisotropía del estado, $F(C)$ es la función de distribución de probabilidad del módulo de la velocidad peculiar (en unidades de la velocidad térmica), con independencia de su orientación.

4.4. Simulaciones de Monte Carlo

Hemos resuelto numéricamente las ecuaciones de Boltzmann (2.13) y (2.33) para los sistemas IHS y EHS + fricción, respectivamente, haciendo uso para ello del método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC) (Bird, 1994; Alexander and Garcia, 1997; Montanero and Santos, 1996; Montanero and Santos, 1997; Frezzotti, 1997). A continuación se presentan algunos de los detalles de la aplicación de este método a nuestro problema particular.

4.4.1. Problema transitorio inhomogéneo

El flujo tangencial uniforme se ha implementado haciendo uso de las condiciones de contorno de Lees-Edwards (4.5) y empleando la forma (4.7) del operador de convección. Como condiciones iniciales se han tomado las funciones de distribución (4.9) y (4.10). Se ha tomado entre las fronteras de nuestro sistema una separación de $L = 2.5\lambda^0$ y el gradiente de velocidad se ha fijado a $a\tau^0 = 4$, donde

$$\lambda^0 = \left(\sqrt{2\pi n}\sigma^2\right)^{-1}, \quad \tau^0 = \frac{\lambda^0}{\sqrt{2T^0/m}} \quad (4.27)$$

son el recorrido libre medio y el tiempo característico iniciales, respectivamente, del gas IHS. Para el coeficiente de restitución normal del gas IHS se ha tomado $\alpha = 0.9$. Este mismo valor de α se ha escogido también en el caso del gas EHS + fricción. Recordemos que α aparece de forma explícita en las expresiones de la constante de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$ y del factor β según las ecuaciones (2.26) y (2.65), respectivamente.

De acuerdo con el método DSMC (Bird, 1994; Alexander and Garcia, 1997), el sistema se ha dividido en M capas de espesor $\delta y = L/M$. La función de distribución de velocidades está definida por las posiciones $\{y_i(t)\}$ y las velocidades $\{\mathbf{v}_i(t)\}$ de las N partículas simuladas:

$$f(y, \mathbf{v}; t) \rightarrow \frac{1}{A} \sum_{i=1}^N \delta(y - y_i(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i(t)), \quad (4.28)$$

donde $A \equiv (N/L)/\bar{n}$ es una constante que formalmente representa el área de una sección del sistema normal al eje y , con lo cual $A\delta y$ representa el volumen de una capa. El número de partículas dentro de una capa determinada $I = 1, \dots, M$ es

$$N_I(t) = \sum_{i=1}^N \Theta_I(y_i(t)), \quad (4.29)$$

donde $\Theta_I(y)$ es la función característica de la capa I , es decir, $\Theta_I(y) = 1$ si y pertenece a I y $\Theta_I(y) = 0$ en caso contrario. La densidad numérica, velocidad media, temperatura y tensor de presiones en la capa I vienen dados por

$$n_I(t) = \frac{N_I(t)}{A\delta y}, \quad (4.30)$$

$$\mathbf{u}_I(t) = \frac{1}{N_I(t)} \sum_{i=1}^N \Theta_I(y_i(t)) \mathbf{v}_i(t), \quad (4.31)$$

$$T_I(t) = \frac{m}{3N_I(t)} \sum_{i=1}^N \Theta_I(y_i(t)) [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_I(t)]^2, \quad (4.32)$$

$$P_I(t) = \frac{m}{A\delta y} \sum_{i=1}^N \Theta_I(y_i(t)) [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_I(t)] [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_I(t)]. \quad (4.33)$$

La temperatura y el tensor de presiones promedios del sistema están dados por

$$\bar{T}(t) = \frac{1}{N} \sum_{I=1}^M N_I(t) T_I(t), \quad (4.34)$$

$$\bar{P}(t) = \frac{1}{M} \sum_{I=1}^M P_I(t). \quad (4.35)$$

Las posiciones $\{y_i(t)\}$ y las velocidades $\{\mathbf{v}_i(t)\}$ de las partículas se actualizan desde el tiempo t hasta el tiempo $t + \delta t$ en dos etapas:

1. *Flujo libre.* En esta etapa,

$$y_i(t + \delta t) = y_i(t) + v_{iy}(t)\delta t. \quad (4.36)$$

Si la partícula i atraviesa la pared superior, es decir, $y_i(t + \delta t) > L/2$, entonces tanto su posición como su velocidad son redefinidas según

$$y_i(t + \delta t) \rightarrow y_i(t + \delta t) - L, \quad \mathbf{v}_i(t) \rightarrow \mathbf{v}_i(t) - aL\hat{\mathbf{x}}. \quad (4.37)$$

Una acción similar tiene lugar si la partícula i atraviesa la pared inferior, es decir, $y_i(t + \delta t) < -L/2$.

En el caso del gas IHS las velocidades de las partículas no se modifican durante la etapa de flujo libre. Sin embargo, en el caso del gas EHS la acción de la fuerza de fricción local conduce a

$$\mathbf{v}_i(t + \delta t) = \mathbf{u}_I(t) + [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_I(t)] e^{-\zeta_I(t)\delta t/2}. \quad (4.38)$$

Aquí, I es la capa donde se encuentra la partícula i en el instante t y $\zeta_I(t) \propto n_I(t)\sqrt{T_I(t)}(1 - \alpha^2)$ es la versión de “grano grueso” de la tasa de enfriamiento ζ_0 definida por la ecuación (2.26).

2. *Etapas de colisiones.* En esta etapa, se eligen de modo aleatorio en cada celda I un número

$$\mathcal{N}_I = \frac{N_I^2}{2\sqrt{2}N/M} \frac{w_I\delta t}{\lambda^0} \quad (\text{IHS}), \quad (4.39a)$$

$$\mathcal{N}'_I = \beta(\alpha) \frac{N_I^2}{2\sqrt{2}N/M} \frac{w_I\delta t}{\lambda^0} \quad (\text{EHS}) \quad (4.39b)$$

de parejas candidatas a colisionar. En las ecuaciones (4.39), λ^0 viene dada por (4.27) y $w_I \propto \sqrt{T_I(t)}$ es una estimación de la velocidad relativa máxima en la capa I . La colisión entre las partículas de un par candidato ij

es aceptada con una probabilidad igual a v_{ij}/w_I , donde v_{ij} es la velocidad relativa del par. Si la colisión es aceptada, se elige una dirección $\hat{\sigma}$ aleatoriamente con equiprobabilidad y las velocidades $(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)$ son reemplazadas por $(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j)$, de acuerdo con la regla de colisión (2.1) con $\alpha < 1$ (IHS) o $\alpha = 1$ (EHS).

A continuación se presentan los valores que toman algunos de los diferentes parámetros “técnicos” en las simulaciones efectuadas. El espesor de cada capa es $\delta L = 0.05\lambda^0$ (es decir, el número de capas es $M = 50$), el paso de tiempo viene dado por $\delta t = 10^{-3}\tau^0\sqrt{T^0/\bar{T}}$ (podemos observar que cambia a lo largo del tiempo del mismo modo en que lo hace el tiempo característico global $\bar{\tau} \propto 1/\sqrt{\bar{T}}$) y el número total de partículas es $N = 10^4$. Las cantidades hidrodinámicas (densidad, velocidad media, temperatura y tensor de presiones) se actualizan cada 4 pasos de tiempo y se guardan cada 160. Con el objetivo de mejorar la estadística se han efectuado tres simulaciones independientes, promediándose después las diferentes magnitudes hidrodinámicas sobre las mismas.

4.4.2. Problema transitorio homogéneo

En este problema se implementa el flujo tangencial uniforme trabajando directamente en el sistema de referencia no inercial lagrangiano [ver ecuación (4.6)] y haciendo uso de (4.8). Dado que la ecuación de Boltzmann resultante es homogénea, sólo es necesario guardar las velocidades (peculiares) $\{\mathbf{V}_i(t)\}$ de las N partículas y además ya no hay necesidad de dividir el sistema en capas o de aplicar condiciones de contorno. La función de distribución de velocidades está dada por

$$f(\mathbf{V}; t) \rightarrow \frac{1}{\Omega} \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{V} - \mathbf{V}_i(t)), \quad (4.40)$$

donde la constante $\Omega \equiv N/\bar{n}$ representa formalmente el volumen del sistema. La temperatura y el tensor de presiones se evalúan según las expresiones

$$T(t) = \frac{m}{3N} \sum_{i=1}^N V_i^2(t), \quad (4.41)$$

$$P(t) = \frac{m}{\Omega} \sum_{i=1}^N \mathbf{V}_i(t)\mathbf{V}_i(t). \quad (4.42)$$

Análogamente, los cumulantes cuarto y sexto de la función de distribución [ver

ecuación (4.19)] y las razones R_ℓ [ver ecuación (4.20)] son evaluados de acuerdo con las siguientes expresiones

$$a_2(t) = \frac{m^2}{15T^2(t)} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_i^4(t) - 1, \quad (4.43)$$

$$a_3(t) = -\frac{m^3}{105T^3(t)} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_i^6(t) + 1 + 3a_2(t), \quad (4.44)$$

$$R_\ell(t) = \frac{N-1}{\mathcal{P}(C_{\ell+1}) - \mathcal{P}(C_\ell)} \sum_{i=1}^N \Theta(V_i(t) - W_\ell(t)) \Theta(W_{\ell+1}(t) - V_i(t)), \quad (4.45)$$

donde $\mathcal{P}(x) = \text{erf}(x) - 2xe^{-x^2}/\sqrt{\pi}$, siendo $\text{erf}(x)$ la función error. Para calcular el valor medio del cubo del módulo de la velocidad relativa se escogen de forma aleatoria una muestra de N_p parejas de partículas entre el número total de parejas posibles $N(N-1)/2$, con lo cual

$$\langle V_{12}^3 \rangle(t) = \frac{1}{N_p} \sum_{ij} |\mathbf{V}_i(t) - \mathbf{V}_j(t)|^3. \quad (4.46)$$

Igual que sucedía antes, la actualización de las velocidades $\{\mathbf{V}_i(t)\} \rightarrow \{\mathbf{V}_i(t+\delta t)\}$ tiene lugar en dos etapas. En la etapa de flujo libre correspondiente al gas IHS solamente la componente x de la velocidad cambia como consecuencia de la acción de la fuerza de inercia $\mathbf{F}_{\text{shear}} = -maV_y \hat{\mathbf{x}}$:

$$V_{ix}(t + \delta t) = V_{ix}(t) - V_{iy}(t)a\delta t. \quad (4.47)$$

Por otro lado, el gas EHS, además de la fuerza de inercia $\mathbf{F}_{\text{shear}}$ anterior, también experimenta la fuerza de fricción $\mathbf{F}_{\text{drag}} = -m(\zeta_0/2)\mathbf{V}$, con lo que

$$V_{ix}(t + \delta t) = [V_{ix}(t) - V_{iy}(t)a\delta t] e^{-\zeta_0(t)\delta t/2}, \quad V_{iy,z}(t + \delta t) = V_{iy,z}(t) e^{-\zeta_0(t)\delta t/2}, \quad (4.48)$$

donde $\zeta_0(t)$ está dada por la ecuación (2.26) con $\tau(t) = \lambda^0/\sqrt{2T(t)/m}$.

En la etapa de colisiones se procede de forma análoga a como se hacía en el problema transitorio inhomogéneo, con la salvedad de que ahora el número de capas es $M = 1$. En consecuencia, del total de parejas de partículas posibles en el sistema se toman aleatoriamente

$$\mathcal{N} = \frac{N}{2\sqrt{2}} \frac{w\delta t}{\lambda^0} \quad (\text{IHS}), \quad (4.49a)$$

$$\mathcal{N}' = \beta(\alpha) \frac{N}{2\sqrt{2}} \frac{w\delta t}{\lambda^0} \quad (\text{EHS}) \quad (4.49b)$$

parejas candidatas a colisionar, donde $w \propto \sqrt{T(t)}$ es una estimación superior de la velocidad relativa máxima en todo el sistema.

En las simulaciones correspondientes al problema transitorio homogéneo se han considerado dos valores del gradiente de velocidad ($a\tau^0 = 4$ y $a\tau^0 = 0.1$) y diez valores del coeficiente de restitución normal ($\alpha = 0.5\text{--}0.95$ con un paso $\Delta\alpha = 0.05$), tanto para el sistema IHS como para el EHS + fricción. Esto hace un total de cuarenta sistemas diferentes simulados. Sin embargo, en la discusión del problema transitorio nos centraremos principalmente en los resultados obtenidos con $\alpha = 0.5$ y $\alpha = 0.9$. Una vez que se alcanza el estado estacionario, se dejan los sistemas simulados evolucionar en el mismo durante un periodo de tiempo apreciable. Durante ese periodo, las diferentes magnitudes se encontrarán fluctuando en torno a sus respectivos valores estacionarios. Por tanto, y con la finalidad de mejorar la estadística de las simulaciones efectuadas, las magnitudes son calculadas en el estado estacionario promediándose a lo largo de todo ese periodo de tiempo. En el análisis del estado estacionario se consideran todos los valores $\alpha = 0.5\text{--}0.95$. Los parámetros técnicos del problema transitorio homogéneo son $\delta t = 10^{-3}\tau^0\sqrt{T^0/T}$, las cantidades hidrodinámicas se actualizan cada 4 pasos de tiempo y se guardan cada 160, $N = 10^4$ y $N_p = 2.5 \times 10^4$.

4.5. Resultados

En esta sección se presentan los resultados de simulación correspondientes a las principales magnitudes físicas en el caso del flujo tangencial uniforme. También se comparan las propiedades del genuino gas granular IHS con las del gas EHS + fricción.

4.5.1. Problema transitorio inhomogéneo

Como ya se ha dicho en la Sección 4.4, en el problema transitorio inhomogéneo hemos tomado dos posibles condiciones iniciales: una de equilibrio representada por la ecuación (4.9) y otra extremadamente alejada del equilibrio definida por la ecuación (4.10). Nos hemos restringido a un coeficiente de restitución normal $\alpha = 0.9$ y a un gradiente de velocidad $a = 4/\tau^0 = (4/0.95)/\tau^{0'}$, donde τ^0 y $\tau^{0'} = \tau^0/\beta(\alpha) = \tau^0/0.95$ son los tiempos característicos (globales) iniciales de

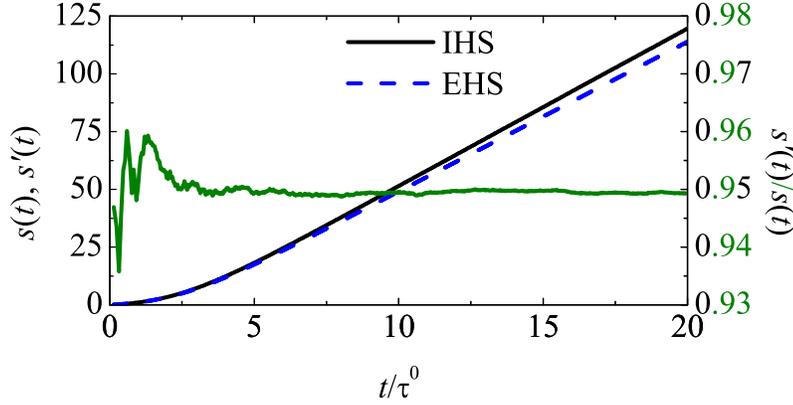


Figura 4.1: Número acumulado de colisiones por partícula en función del tiempo para IHS [$s(t)$, línea continua] y EHS [$s'(t)$, línea segmentada] en el caso $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$. La línea continua fluctuante representa la razón $s'(t)/s(t)$ con su correspondiente escala en el eje vertical derecho. Los datos han sido obtenidos tomando como condición inicial la función de distribución (4.9).

los gases IHS y EHS + fricción, respectivamente. Los valores de a y α son tales que inicialmente el calentamiento viscoso domina frente al enfriamiento disipativo (ya sea éste debido a las colisiones o a la fuerza externa de fricción). Esto lleva aparejado un incremento de la temperatura y una disminución progresiva del tiempo medio entre colisiones.

A la hora de monitorizar la evolución temporal de las magnitudes físicas, vamos a utilizar una clase de reloj “interno” que va a ser el número acumulado de colisiones por partícula $s(t)$ (IHS) y $s'(t)$ (EHS), en lugar del tiempo “externo” t . Las cantidades $s(t)$ y $s'(t)$ se calculan directamente dividiendo el número total de colisiones aceptadas hasta el instante t entre el número total de partículas de nuestro sistema; en general, difieren ligeramente de los correspondientes valores en la aproximación de equilibrio local $s_0(t)$ y $s'_0(t)$ [ver ecuación (4.15)]. En tanto que la función de distribución de velocidades $f(y, \mathbf{v}; t)$ sea similar en ambos sistemas, se puede esperar que $s'(t)/\beta(\alpha) \simeq s(t)$. En la figura 4.1 se representan $s(t)$ y $s'(t)$ en función del tiempo tomando como condición inicial (4.9). Las pendientes de ambas curvas están relacionadas directamente con sus respectivas temperaturas; las dos pendientes aumentan monótonamente hasta que se hacen prácticamente constantes para $t/\tau^0 \gtrsim 8$. Como se esperaba, el número acumulado de colisiones hasta un tiempo t para el gas EHS es menor que el correspondiente al sistema IHS, es decir, $s'(t) < s(t)$. La figura 4.1 también muestra la evolución temporal de la razón $s'(t)/s(t)$. Se puede observar que hasta $t/\tau^0 \simeq 4$ fluctúa alrededor de $\beta(\alpha) = 0.95$, permaneciendo muy cerca de ese valor de ahí en adelante. Esto nos proporciona ya una validación indirecta de la equivalencia práctica entre los perfiles espaciales y la historia temporal de

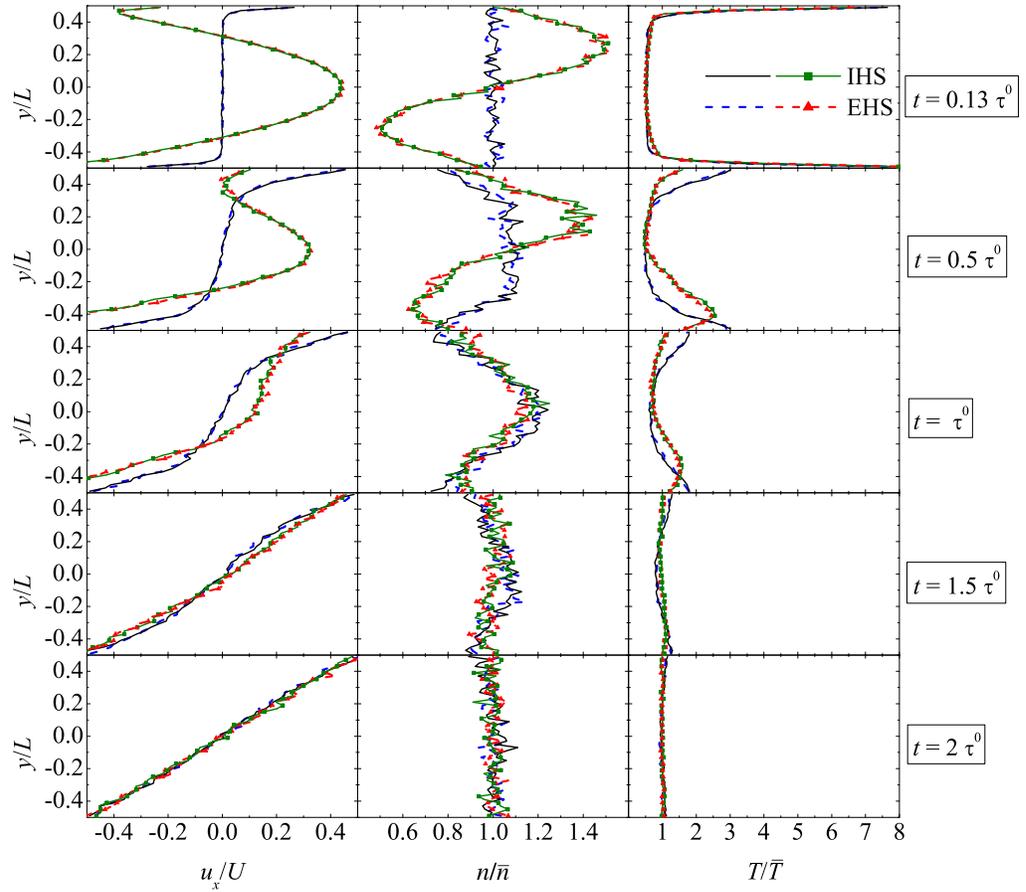


Figura 4.2: Perfiles hidrodinámicos para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$, para los tiempos $t/\tau^0 = 0.13, 0.5, 1, 1.5$ y 2 . Los datos han sido obtenidos tomando como condición inicial la función de distribución (4.9) (curvas sin símbolos) o (4.10) (curvas con símbolos).

las magnitudes hidrodinámicas en ambos sistemas (IHS y EHS).

La figura 4.2 muestra los perfiles de la velocidad media, densidad y temperatura en los tiempos $t/\tau^0 = 0.13, 0.5, 1, 1.5$ y 2.0 . Los números acumulados de colisiones por partícula correspondientes a estos tiempos (para el gas IHS) son $s \simeq 0.08, 0.4, 1.1, 2.1$ y 3.4 en el caso de la distribución inicial (4.9), y $s \simeq 0.09, 0.5, 1.5, 2.8$ y 4.6 en el caso de (4.10). Es interesante notar que hasta el tiempo $t/\tau^0 = 0.13$ solamente han colisionado aproximadamente el 16–18% de las partículas, con lo cual las desviaciones que aparecen respecto de los perfiles iniciales se deben fundamentalmente a las condiciones de contorno. Como consecuencia, en $t/\tau^0 = 0.13$ el perfil de la velocidad media es prácticamente el inicial con la salvedad de las capas más próximas a las paredes; además, estas capas tienen una temperatura mucho mayor que la correspondiente a capas más internas del fluido, mientras que la densidad numérica todavía permanece prácticamente inalterada respecto al instante inicial. A medida que el tiempo pasa, algunas de las partículas más energéticas, que se encuentran cerca de las paredes, se mueven hacia el interior del sistema, transfiriendo parte de su cantidad de movimiento y energía a otras partículas mediante colisiones. Esto produce un “estiramiento” de la forma del perfil de velocidad media así como una homogeneización de la temperatura. Al principio, las capas próximas a las paredes se despueblan parcialmente en favor de las capas centrales, en las que ocurre el proceso inverso. Sin embargo, a medida que el perfil de velocidad media se va haciendo lineal observamos también que tanto la temperatura como la densidad se van homogeneizando en todo el sistema. En resumen, la figura 4.2 muestra claramente que los perfiles hidrodinámicos evolucionan libremente hacia los perfiles característicos del flujo tangencial uniforme, independientemente de la preparación inicial del sistema. Aunque se sabe que el flujo tangencial uniforme es inestable respecto de excitaciones de longitudes de onda suficientemente largas (Savage, 1992; Schmid and Kytomaa, 1994; Goldhirsch and Tan, 1996; Kumaran, 2000*b*; Kumaran, 2000*a*; Kumaran, 2001; Garzó, 2006), el tamaño de los sistemas simulados ($L = 2.5\lambda^0$) es lo bastante reducido como para evitar esa clase de inestabilidad. De hecho, un estudio reciente utilizando la teoría cinética (Garzó, 2006) muestra que para $\alpha = 0.9$ la inestabilidad no aparece a menos que $L \gtrsim 25\lambda^0$.

Para que las gráficas ganen en claridad, en el resto de esta subsección sólo se van a presentar resultados de simulación obtenidos utilizando la distribución inicial (4.9). Para monitorizar el establecimiento del perfil lineal de velocidad media así como la homogeneización de la densidad y la temperatura, estudiamos la evolución temporal de estas cantidades promediadas sobre las cuatro capas centrales del sistema ($-2\delta y \leq y \leq 2\delta y$) y sobre las tres capas superiores ($L/2 - 3\delta y \leq y \leq L/2$). Los resultados aparecen en la figura 4.3. Se puede ver que en $y \approx 0$ la velocidad media fluctúa en torno a cero, como era de esperar por razones de simetría, mientras que la velocidad media en las proximidades de la pared superior aumenta monótonamente (salvo fluctuaciones) hacia la velocidad de la pared $U/2$. La máxima diferencia de densidad tiene lugar de

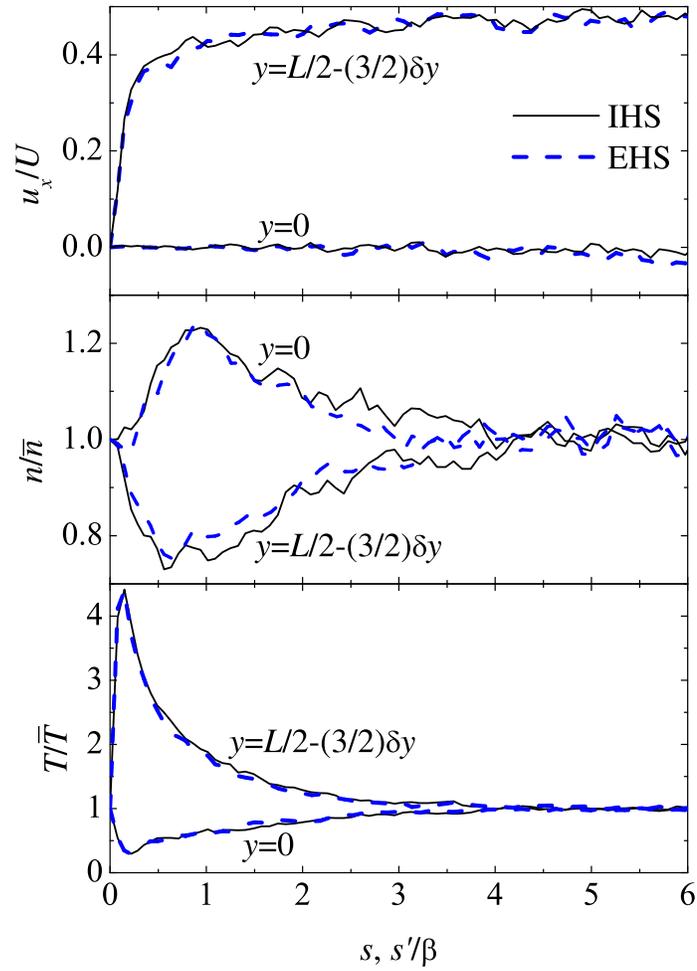


Figura 4.3: Evolución de la velocidad media, la densidad y la temperatura en torno a $y = 0$ e $y = L/2 - (3/2)\delta y$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso de $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$. El tiempo es medido por el número acumulado de colisiones por partícula (s) para el gas IHS y por la misma cantidad, pero dividida por β , (s'/β) en el caso EHS. Los datos han sido obtenidos tomando como condición inicial la función de distribución (4.9).

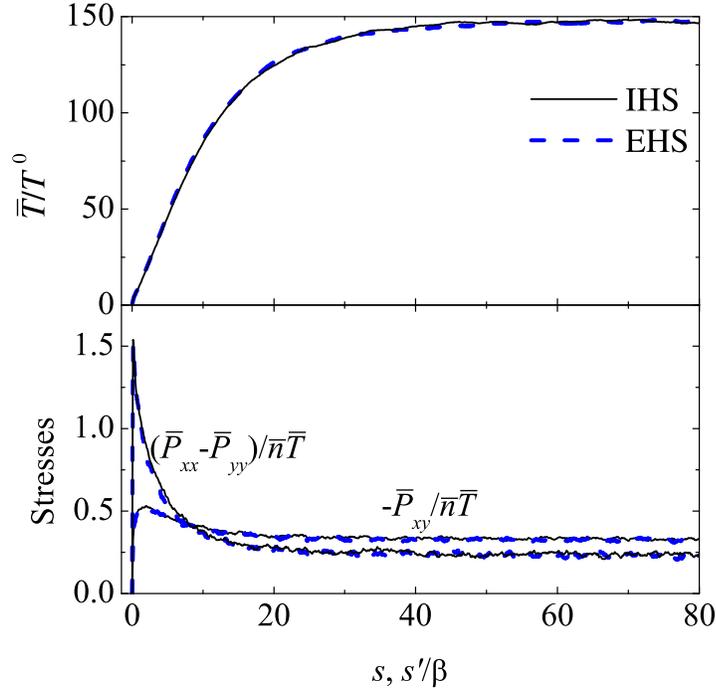


Figura 4.4: Evolución de \bar{T}/T^0 (gráfica superior), $-\bar{P}_{xy}/\bar{n}\bar{T}$ y $(\bar{P}_{xx} - \bar{P}_{yy})/\bar{n}\bar{T}$ (gráfica inferior) para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso de $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$. El tiempo es medido por el número acumulado de colisiones por partícula (s) para el gas IHS y por la misma cantidad, pero dividida por β , (s'/β) en el caso EHS. Los datos han sido obtenidos tomando como condición inicial la función de distribución (4.9).

spués de aproximadamente una colisión por partícula, mientras que la diferencia máxima de temperatura ocurre antes, a $s \simeq 0.15$. Los perfiles hidrodinámicos que caracterizan el flujo tangencial uniforme, a saber, velocidad media lineal y densidad y temperatura homogéneas, se alcanzan alrededor de $s = 4$ (lo que corresponde a un tiempo “externo” $t/\tau^0 \simeq 2.2$). A partir de este instante de tiempo, la evolución de las diferentes magnitudes tiene lugar esencialmente del mismo modo que en el problema transitorio homogéneo, que analizaremos en la siguiente subsección.

En las figuras 4.2 y 4.3 hemos escalado la temperatura local $T(y, t)$ con su valor promedio $\bar{T}(t)$ porque estamos especialmente interesados en analizar el estado transitorio previo a la homogeneización de la misma. Sin embargo, aunque el sistema se hace “homogéneo” [en el sentido de la ecuación (4.6)] a $s \simeq 4$, la temperatura continúa evolucionando en el tiempo hasta que se al-

canza un estado estacionario. Esto se observa en la parte superior de la figura 4.4 que muestra la evolución de \bar{T}/T^0 . Podemos advertir que la duración total de la etapa transitoria es mucho mayor que la del periodo inhomogéneo. La temperatura alcanza un valor estacionario mucho mayor que el inicial ($\bar{T}_s/T^0 \simeq 147$) a $s \simeq 50$ ($t/\tau^0 \simeq 9.8$). Que la temperatura no altere su valor (salvo fluctuaciones) no significa necesariamente que se haya alcanzado el estado estacionario, puesto que, en principio, las partículas podrían redistribuir sus velocidades a medida que transcurre el tiempo sin cambiar el valor de la energía cinética media. Un signo importante de que esto no es así lo podemos observar en la parte inferior de la figura 4.4, que muestra la evolución de la tensión tangencial (reducida) $-\bar{P}_{xy}/\bar{n}\bar{T}$ y la diferencia de tensiones normales (reducidas) $(\bar{P}_{xx} - \bar{P}_{yy})/\bar{n}\bar{T}$. Estas dos cantidades toman valores estacionarios $-\bar{P}_{xy,s}/\bar{n}\bar{T}_s \simeq 0.33$ y $(\bar{P}_{xx,s} - \bar{P}_{yy,s})/\bar{n}\bar{T}_s \simeq 0.24$ para $s \simeq 40$ ($t/\tau^0 \simeq 8.3$).

Hasta ahora, en los comentarios efectuados sobre las figuras 4.2–4.4 nos hemos centrado fundamentalmente en las propiedades físicas del estado transitorio que conduce al flujo tangencial uniforme, sin hacer distinciones entre los sistemas IHS y EHS + fricción. De hecho, como muestran las figuras 4.2–4.4, los resultados concernientes a las magnitudes hidrodinámicas y sus flujos son prácticamente idénticos en ambos sistemas, incluso cuando hay presentes intensos gradientes transitorios. Por lo tanto, un gas EHS con el adecuado diámetro y la fuerza de fricción apropiada puede reproducir de forma satisfactoria las principales propiedades de transporte de un gas IHS. Sin embargo, aunque un coeficiente de restitución normal $\alpha = 0.9$ es bastante realista, es razonable esperar que a medida que la disipación aumente esta equivalencia aproximada IHS \leftrightarrow EHS no vaya siendo tan buena. Con objeto de analizar esta expectativa se han considerado otros valores distintos de α en el problema transitorio homogéneo y en el correspondiente al estado estacionario.

4.5.2. Problema transitorio homogéneo

Como ya se ha discutido en la Sección 2.3, la ecuación de Boltzmann para el flujo tangencial uniforme admite soluciones que son espacialmente homogéneas cuando las velocidades de las partículas están referidas al sistema de referencia no inercial lagrangiano [ver ecuación (4.6)]. La simulación de la correspondiente ecuación de Boltzmann utilizando el método DSMC es mucho más sencilla que en el problema transitorio inhomogéneo, según se ha descrito en la Sección 4.4.2. En las simulaciones correspondientes al problema transitorio homogéneo se ha tomado $\alpha = 0.5$ – 0.95 (con un paso $\Delta\alpha = 0.05$) y dos valores para el gradiente de velocidad $a\tau^0 = 4$ y $a\tau^0 = 0.1$. El primero de los valores del gradiente de velocidad es lo suficientemente grande como para que inicialmente el calentamiento viscoso domine sobre el enfriamiento disipativo (ya sea éste debido a las colisiones o a la fuerza externa de fricción), incluso para $\alpha = 0.5$, con lo cual $T(t) > T^0$. A la inversa, $a\tau^0 = 0.1$ es lo bastante reducido para originar el efecto contrario, $T(t) < T^0$, aun para $\alpha = 0.95$. Por otro lado, para

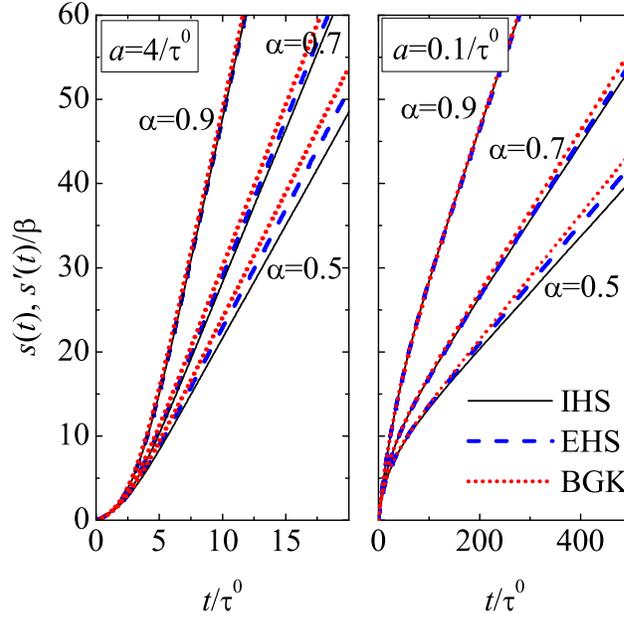


Figura 4.5: Número acumulado de colisiones por partícula en función del tiempo para IHS [$s(t)$, líneas continuas] y para EHS [$s'(t)$, líneas segmentadas], en el último caso dividido por $\beta = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$, para $\alpha = 0.5, 0.7$ y 0.9 . El panel de la izquierda corresponde a un gradiente de velocidad $a\tau^0 = 4$ mientras que el de la derecha lo hace a $a\tau^0 = 0.1$. Las líneas de puntos representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Obsérvese en el panel de la derecha que las curvas correspondientes a IHS, EHS y BGK para $\alpha = 0.9$ son prácticamente indistinguibles. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17).

un valor dado de α , las propiedades intrínsecas del estado estacionario deben ser independientes del valor del gradiente de velocidad. Esto nos proporciona un indicador importante para saber si se ha alcanzado o no el estado estacionario.

Aunque hemos realizado simulaciones para los diez valores $\alpha = 0.5-0.95$, en esta subsección nos centraremos en dos de ellos: $\alpha = 0.9$ (disipación moderadamente pequeña) y $\alpha = 0.5$ (disipación grande). Además de los resultados de simulación correspondientes a los gases IHS y EHS + fricción, se presentan también los resultados de la resolución de la extensión (Brey, Dufty and Santos, 1999; Santos and Astillero, 2005) del modelo BGK (Bhatnagar, Gross and Krook, 1954; Welander, 1954), extensión que está basada en la relación aproximada $\text{IHS} \leftrightarrow \text{EHS}$. La solución de este modelo para el estado estacionario del flujo tangencial uniforme (Brey, Ruiz-Montero and Moreno, 1997; Santos, Garzó and Dufty, 2004; Santos and Astillero, 2005) se ha descrito en la subsección 2.4.3.

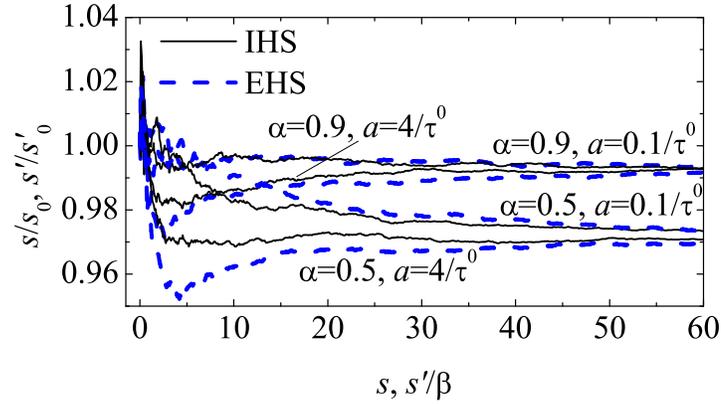


Figura 4.6: Evolución de la razón entre el número acumulado de colisiones por partícula y la misma magnitud obtenida en la aproximación de equilibrio local para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.5, 0.9$ y $a\tau^0 = 0.1, 4$. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17).

Comenzamos mostrando en la figura 4.5 el número acumulado de colisiones por partícula frente al tiempo, considerando también el caso $\alpha = 0.7$. Como ya se ha dicho en relación a la figura 4.1, la pendiente de $s(t)$ y $s'(t)$ es proporcional a $\sqrt{T(t)}$. Para un gradiente de velocidad $a\tau^0 = 4$, el calentamiento viscoso es dominante, de modo que la temperatura aumenta monótonamente, especialmente para $\alpha = 0.9$; por otro lado, para $a\tau^0 = 0.1$, el enfriamiento disipativo prevalece y la temperatura decrece monótonamente, particularmente en el caso $\alpha = 0.5$. El acuerdo casi perfecto entre $s(t)$ y $s'(t)/\beta$ para $\alpha = 0.9$ es una indicación indirecta de que la temperatura $T(t)$ es prácticamente la misma para los gases IHS y EHS, como se va a comprobar más adelante. Sin embargo, a medida que la inelasticidad aumenta, la diferencia entre las temperaturas de ambos sistemas también se va incrementando, presentando el gas EHS una temperatura ligeramente superior a la del gas IHS, para cualquier tiempo dado t . A pesar de su simplicidad, el modelo BGK proporciona buenos resultados, aunque tiende a sobrestimar tanto $s(t)$ como $s'(t)/\beta$. Las curvas de $s(t)$ correspondientes al modelo BGK se han calculado haciendo uso de la aproximación de equilibrio local (4.18). Como se va a ver un poco más adelante, la temperatura obtenida a partir del modelo BGK presenta un excelente acuerdo con la del sistema EHS. Por lo tanto, las pequeñas discrepancias entre las curvas de $s'(t)/\beta$ (obtenidas mediante simulaciones DSMC) y las correspondientes curvas obtenidas utilizando el modelo BGK, son debidas esencialmente a la aproximación de equilibrio local $s(t) \rightarrow s_0(t)$ empleada en las últimas. Para confirmar esto, en la figura 4.6 representamos la razón entre el número acumulado de colisiones por partícula y la misma magnitud obtenida en la aproximación de equilibrio local a partir de la

ecuación (4.18), mediante una integración numérica, utilizando los valores de la temperatura en cada instante de tiempo. La frecuencia de colisión instantánea es proporcional al valor medio de la velocidad relativa $\langle V_{12} \rangle$, que en la aproximación de equilibrio local está dado por $\langle V_{12} \rangle \rightarrow \langle V_{12} \rangle_0 = \sqrt{2} \langle V \rangle_0 = 4\sqrt{T/\pi m}$. De esta manera, el hecho de que $s(t) < s_0(t)$ es consistente con una función de distribución de velocidades de no equilibrio tal que la velocidad media es menor que la correspondiente al equilibrio local, es decir, $\langle V \rangle < \langle V \rangle_0$, siendo este efecto más notable a medida que la disipación aumenta. Por definición, $\langle V^2 \rangle = \langle V^2 \rangle_0 = 3T/m$. Por tanto, la desigualdad $\langle V \rangle < \langle V \rangle_0$ indica un defecto de población en la región de velocidades moderadamente bajas de la función de distribución de no equilibrio (respecto de la de Maxwell–Boltzmann) que, como se verá más adelante, compensa el exceso de población de la región de velocidades altas.

En las figuras 4.7 y 4.8 se representa la evolución de la temperatura T/T^0 , la tensión tangencial (reducida) $-P_{xy}/nT$ y la diferencia de tensiones normales (reducidas) $(P_{xx} - P_{yy})/nT$ para $\alpha = 0.9$ y $\alpha = 0.5$, respectivamente. En el primer caso se observa un excelente acuerdo entre los resultados de simulación de ambos gases. Además, los resultados teóricos obtenidos con el modelo BGK describen con gran precisión el comportamiento de los datos de simulación. Sin embargo, en el caso $\alpha = 0.5$ el sistema EHS tiende a tener una temperatura mayor que la del sistema IHS, siendo esta diferencia, en el estado estacionario, aproximadamente de un 12%. Esto es debido en parte a que la verdadera tasa de enfriamiento ζ del gas IHS [ver ecuación (2.19)] es mayor que el valor de equilibrio local ζ_0 [ver ecuación (2.26)] impuesto al gas EHS, como se podrá ver más adelante. Esto explica también por qué el modelo BGK, que también hace uso de la aproximación $\zeta \rightarrow \zeta_0$, predice una temperatura en buen acuerdo con los datos de simulación del sistema EHS. Dado que la temperatura del gas EHS es mayor que la del gas IHS, entonces el gradiente de velocidad normalizado con la frecuencia de colisión es menor para el sistema EHS que para el sistema IHS. Como consecuencia, la distorsión respecto a la distribución de Maxwell–Boltzmann (que es medida por la tensión tangencial y, especialmente, por la diferencia de tensiones normales) es menor en el gas EHS que en el IHS. La comparación de las figuras 4.7 y 4.8 muestra que la duración del periodo transitorio (en unidades del número acumulado de colisiones por partícula) disminuye a medida que la inelasticidad aumenta: $s \simeq 40$ para $\alpha = 0.9$ frente a $s \simeq 20$ para $\alpha = 0.5$. Sin embargo, cuando el tiempo es medido en unidades reales, depende principalmente del gradiente de velocidad y no de α , a saber $t \simeq 9\tau^0$ para $a\tau^0 = 4$ y $t \simeq 160\text{--}200\tau^0$ para $a\tau^0 = 0.1$.

Es interesante observar la similitud entre las curvas que aparecen en la figura 4.4 (problema transitorio inhomogéneo) y las de la figura 4.7 (problema transitorio homogéneo) para $a\tau^0 = 4$. Esto se observa con mayor claridad en la figura 4.9, donde se representa la evolución de las magnitudes globales del gas IHS, tanto en el caso del problema transitorio inhomogéneo como del problema transitorio homogéneo. En las tres situaciones consideradas, tanto la tensión

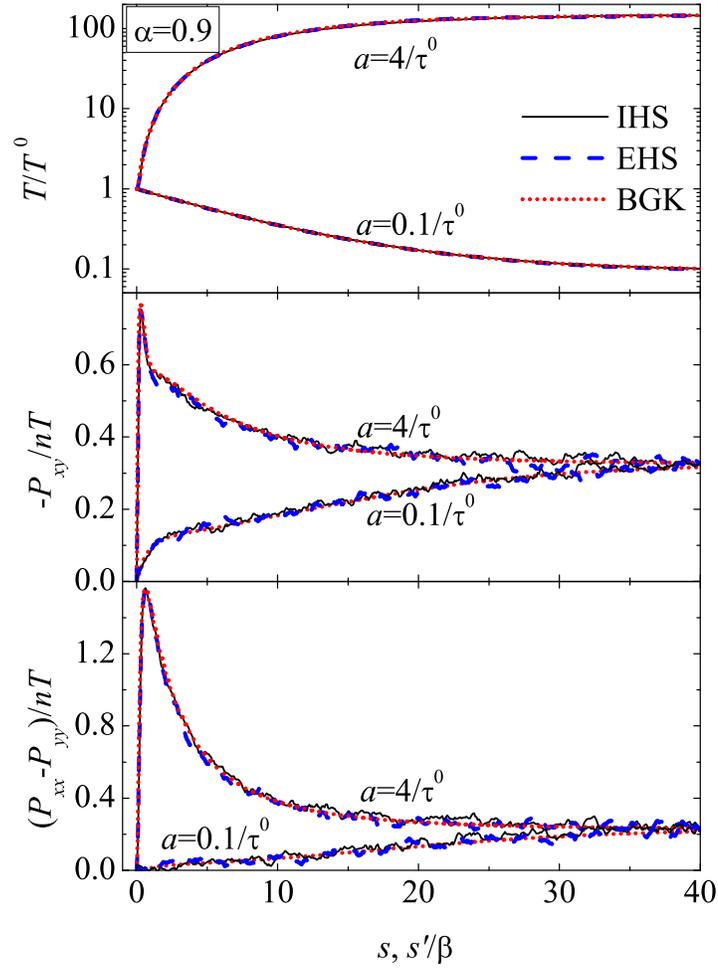


Figura 4.7: Evolución de T/T^0 , $-P_{xy}/nT$ y $(P_{xx} - P_{yy})/nT$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.9$ con $a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$. Las líneas de puntos representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Obsérvese en el panel superior que las curvas correspondientes a IHS, EHS y BGK son prácticamente indistinguibles. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17).

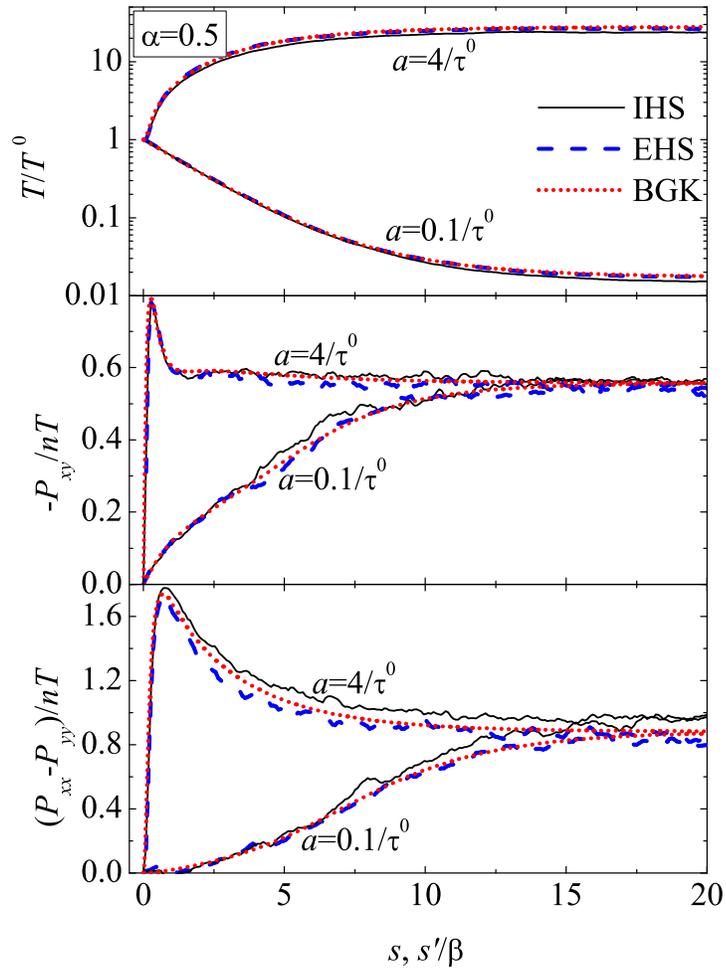


Figura 4.8: Evolución de T/T^0 , $-P_{xy}/nT$ y $(P_{xx} - P_{yy})/nT$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.5$ con $a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$. Las líneas de puntos representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17).

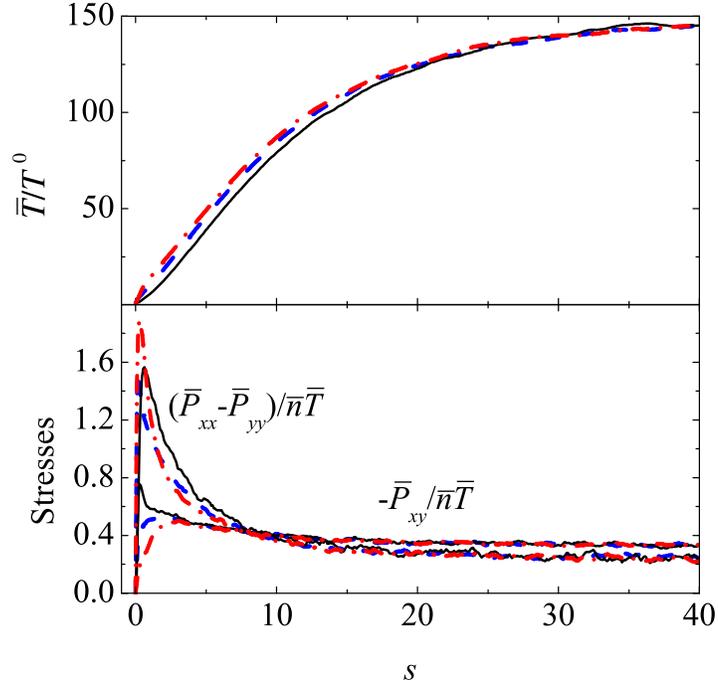


Figura 4.9: Evolución de \bar{T}/T^0 (panel superior), $-\bar{P}_{xy}/\bar{n}\bar{T}$ y $(\bar{P}_{xx} - \bar{P}_{yy})/\bar{n}\bar{T}$ (panel inferior) en el caso IHS para $\alpha = 0.9$, $a\tau^0 = 4$. Las líneas segmentadas y segmento puntuadas corresponden al problema transitorio inhomogéneo con las condiciones iniciales (4.9) y (4.10), respectivamente, mientras que las líneas continuas pertenecen al problema transitorio homogéneo con la condición inicial (4.17).

tangencial como la diferencia de tensiones normales son inicialmente nulas; sin embargo, teniendo presente el elevado valor del gradiente de velocidad, la función de distribución cambia rápidamente para adaptarse al gradiente de velocidad impuesto, originando máximos agudos en la tensión tangencial (reducida) y en la diferencia de tensiones normales (reducidas). De ahí en adelante, a medida que la temperatura va aumentando también lo hace la frecuencia de colisión, de modo que la intensidad relativa del gradiente de velocidad se va haciendo cada vez menor, hasta que se alcanza el estado estacionario para $s \approx 40$. La primera etapa, que tiene una duración aproximada de una colisión por partícula, tiene una naturaleza fundamentalmente cinética, siendo además muy sensible a la preparación inicial del sistema. Por otro lado, la subsiguiente relajación hacia el estado estacionario define una etapa *hidrodinámica* mucho más larga, que a medida que transcurre el tiempo se va haciendo cada vez más independiente de las condiciones iniciales, dado que en todas ellas $T^0 < T_s$. En el caso de la clase de

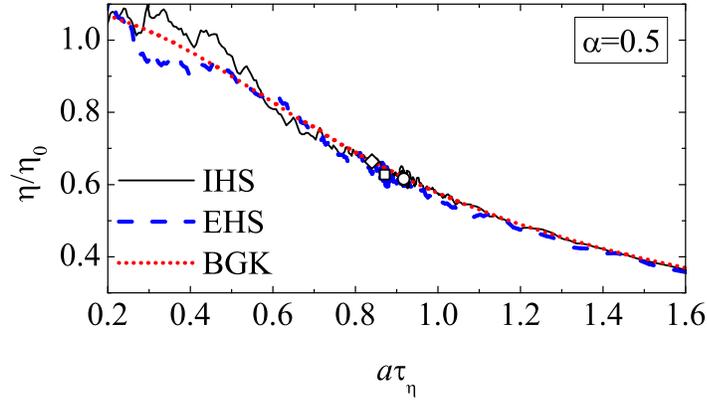


Figura 4.10: Viscosidad tangencial reducida (transitoria) $\eta^*(t) \equiv \eta(t)/\eta_0(t)$ frente al gradiente de velocidad reducido (transitorio) $a^*(t) \equiv a\tau_\eta(t)$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso $\alpha = 0.5$. Las líneas punteadas representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. El círculo, cuadrado y rombo representan los puntos correspondientes al estado estacionario para IHS, EHS y BGK, respectivamente. En cada caso, la curva situada a la izquierda del símbolo corresponde a $a\tau^0 = 0.1$, mientras que la situada a la derecha corresponde a $a\tau^0 = 4$.

estados iniciales tales que $T^0 > T_s$ (por ejemplo, para $a\tau^0 = 0.1$) también existe una etapa hidrodinámica similar. Estos comentarios son extensibles también a los dos valores del gradiente de velocidad con $\alpha = 0.5$.

Aunque pospondremos hasta el capítulo 5 un estudio más exhaustivo acerca de la existencia de un régimen hidrodinámico, merece la pena anticipar algunos aspectos. En general, para un valor dado de α y en el régimen hidrodinámico, la función de distribución de velocidades depende del tiempo únicamente a través del gradiente de velocidad adimensionalizado con la frecuencia de colisión, dependiendo ésta última del tiempo también. Más específicamente,

$$f(\mathbf{V}, t) = n \left[\frac{m}{2T(t)} \right]^{3/2} f^*(\mathbf{C}(t); a^*(t)), \quad (4.50)$$

donde

$$\mathbf{C}(t) = \frac{\mathbf{V}}{\sqrt{2T(t)/m}}, \quad a^*(t) = a\tau_\eta(t). \quad (4.51)$$

La definición del gradiente de velocidad reducido a^* utilizando el tiempo característico asociado a la viscosidad τ_η en lugar del tiempo medio entre colisiones

τ_{mft} o el tiempo característico τ es una cuestión irrelevante pues las tres magnitudes difieren solamente por factores constantes, a saber, $\tau_{\text{mft}}/\tau_\eta \simeq 0.787$ y $\tau/\tau_\eta \simeq 0.888$. En el estado estacionario, $a^*(t) \rightarrow a_s^*$ y $f^*(\mathbf{C}; a^*) \rightarrow f_s^*(\mathbf{C}; a_s^*) = f_s^*(\mathbf{C})$ [ver ecuación (4.21)].

Durante la relajación hidrodinámica hacia el estado estacionario, resulta conveniente definir una viscosidad tangencial dependiente del tiempo $\eta(t) = -P_{xy}(t)/a$. Como consecuencia de la ecuación (4.50), la razón $\eta(t)/\eta_0(t)$, donde $\eta_0(t) = nT(t)\tau_\eta(t)$ es la viscosidad de Navier–Stokes en el límite elástico [ver ecuación (4.4)], depende del tiempo sólo a través de una dependencia no lineal de $a^*(t)$. La figura 4.10 muestra la viscosidad tangencial reducida $\eta^* \equiv \eta/\eta_0$ frente al gradiente de velocidad reducido a^* en el caso $\alpha = 0.5$. Los valores representados corresponden a una ventana temporal $2 \lesssim s \lesssim 50$. El límite inferior garantiza que el sistema prácticamente ha olvidado ya las condiciones iniciales, mientras que el límite superior es lo suficientemente grande como para garantizar que se ha alcanzado el estado estacionario (representado con un símbolo). En cada caso (IHS, EHS o BGK), el punto correspondiente al estado estacionario (a_s^*, η_s^*) divide la curva respectiva en dos ramas: la situada a la izquierda del punto corresponde a $T < T^0$ (obtenida con, $a\tau^0 = 0.1$), mientras que la situada a la derecha pertenece a $T > T^0$ (obtenida con, $a\tau^0 = 4$). La extrapolación formal de $\eta^*(a^*)$ a la situación en la que el gradiente de velocidad es nulo proporciona la viscosidad tangencial de Navier–Stokes reducida $\eta_{\text{NS}}^* = \lim_{a^* \rightarrow 0} \eta^*(a^*)$ para $\alpha = 0.5$. Los valores esperados son (Brey et al., 1998; Santos and Astillero, 2005) $\eta_{\text{NS}}^* \simeq 1.3$ para IHS y $\eta_{\text{NS}}^* \simeq 1.1$ para EHS y BGK. Merece la pena observar que, salvo fluctuaciones de los resultados de simulación, las curvas de $\eta^*(a^*)$ para IHS, EHS y BGK prácticamente coinciden, al menos en el intervalo $0.2 < a^* < 1.6$. Por lo tanto, la diferencia principal entre las tres aproximaciones radica en el punto (representando éste el estado estacionario) donde el sistema “decide” detenerse. En la referencia (Santos, Garzó and Dufty, 2004) se presenta una discusión más extensa acerca de la función reológica $\eta^*(a^*)$, así como de la distinción entre η_s^* y η_{NS}^* .

Aunque en el análisis del flujo tangencial uniforme los elementos del tensor de presiones aportan gran parte de la información más relevante, éstos no agotan toda la información física que se puede extraer de las simulaciones. En las figuras 4.11 y 4.12 se muestra la evolución de la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ (donde V_{12} es el módulo de la velocidad relativa de una pareja de partículas) y los cumulantes cuarto y sexto [ver ecuación (4.19)] para $\alpha = 0.9$ y $\alpha = 0.5$, respectivamente. El valor promedio $\langle V_{12}^3 \rangle$ es interesante físicamente porque es proporcional a la verdadera tasa de enfriamiento ζ del gas IHS. De hecho, hemos comprobado en las simulaciones que el valor de ζ obtenido a partir de la ecuación (2.19) está de acuerdo con el calculado directamente a partir de la pérdida de energía en las colisiones, ecuación (2.18). Sin embargo, el segundo de los métodos es mucho más ruidoso que el primero ya que involucra solamente aquellas parejas de partículas que colisionan, mientras que para el cálculo de $\langle V_{12}^3 \rangle$ se consideran todas las posibles parejas de partículas [ver, sin embargo, la ecuación (4.46) y

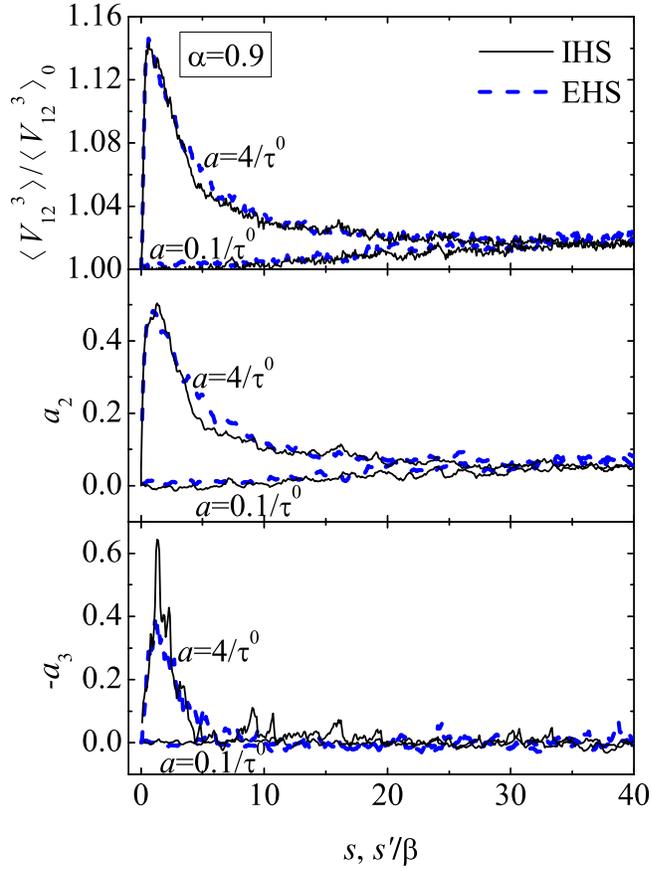


Figura 4.11: Evolución de la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$, el cuarto cumulante a_2 y el sexto cumulante $-a_3$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.9$ con $a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17).

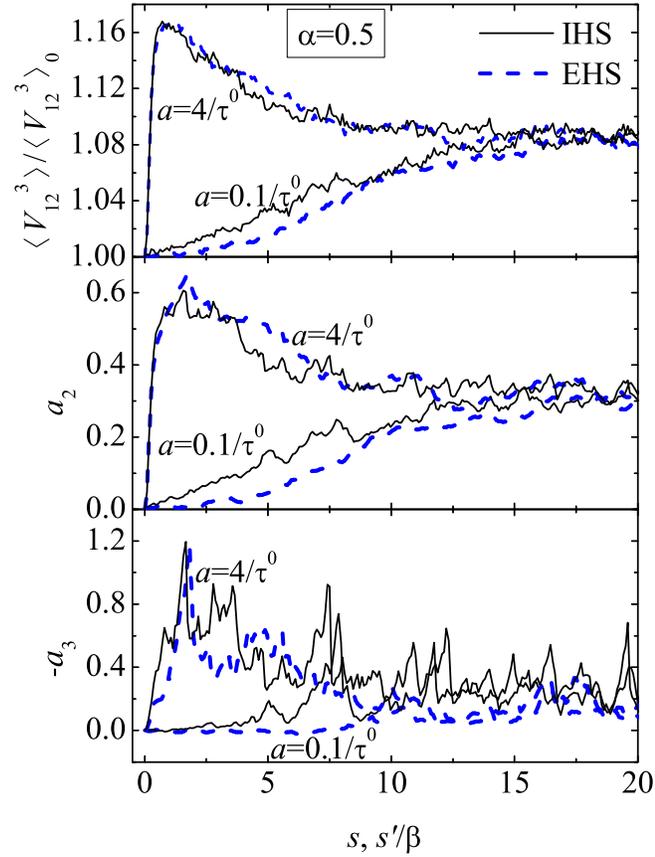


Figura 4.12: Evolución de la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$, el cuarto cumulante a_2 y el sexto cumulante $-a_3$ para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.5$ con $a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17).

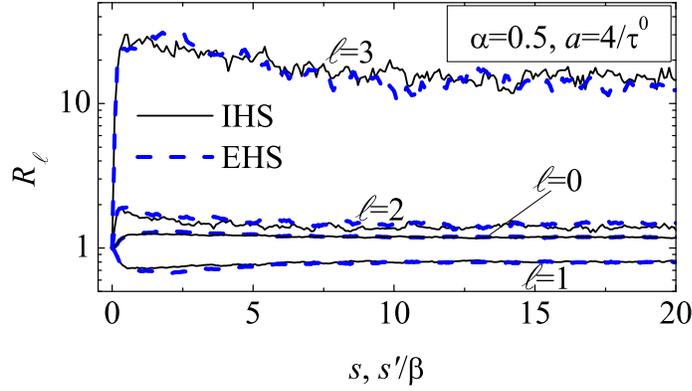


Figura 4.13: Evolución de las razones R_0 , R_1 , R_2 y R_3 [ver ecuación (4.20)] para IHS (líneas continuas) y EHS (líneas segmentadas) en el caso $\alpha = 0.5$ con $a\tau^0 = 4$. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por (4.17).

los comentarios que la preceden].

Como ya ocurría en las figuras 4.7 y 4.8, los datos de simulación de cada una de las tres magnitudes dibujadas (en el caso $a\tau^0 = 4$) presentan un máximo respectivo durante la etapa cinética de la evolución. Estos máximos representan la mayor desviación respecto del comportamiento maxwelliano. Es importante hacer notar que, en el caso del gas IHS, las fluctuaciones estadísticas de las magnitudes representadas en las figuras 4.11 y 4.12 son mayores que en el caso del gas EHS. Por lo demás, la evolución temporal transitoria y el estado estacionario son muy similares en ambos sistemas.

Observamos también que $\langle V_{12}^3 \rangle > \langle V_{12}^3 \rangle_0$, siendo esta diferencia más acentuada a medida que la inelasticidad aumenta. Esto explica por qué la tasa de enfriamiento interna debida a las colisiones (ζ) del gas IHS es mayor que la tasa de enfriamiento externa debida a la fricción (ζ_0) impuesta al gas EHS, como ya se ha comentado en conexión con la figura 4.8. Sin embargo, a pesar de que la tasa de enfriamiento aplicada al gas EHS es la correspondiente a la aproximación de equilibrio local, este sistema es capaz de reproducir satisfactoriamente la distorsión respecto del equilibrio local presente en el gas IHS y que es medida por $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$.

Los cumulantes, especialmente a_3 , sondan básicamente la cola de energía alta de la función de distribución de velocidades. El hecho de que el cuarto cumulante a_2 sea positivo, tanto en el caso IHS como EHS, es un indicativo de un exceso de población importante en la región de energía alta (respecto de la distribución de Maxwell-Boltzmann), inducido por el movimiento de cizalladura. Este efecto de exceso de población es mayor (y también de naturaleza diferente)

al presente típicamente en estados homogéneos⁴ de gases granulares⁵ (van Noije and Ernst, 1998; Montanero and Santos, 2000). El valor correspondiente al estado estacionario del sexto cumulante a_3 es prácticamente cero para $\alpha = 0.9$. Por otro lado, para $\alpha = 0.5$ se tiene que $-a_3 > 0$, que está relacionado nuevamente con el exceso de población en la región de energía alta.

Las razones R_ℓ definidas por la ecuación (4.20) proporcionan una información más directa de la evolución de la función de distribución. En la figura 4.13 se presentan estos cocientes en el caso de $\alpha = 0.5$ y $a\tau^0 = 4$. La desviación máxima respecto de la distribución de Maxwell–Boltzmann ocurre durante la etapa cinética ($s \lesssim 1$). A partir de entonces, las curvas relajan suavemente hacia sus valores estacionarios $R_0 \simeq 1.18$, $R_1 \simeq 0.81$, $R_2 \simeq 1.39$ y $R_3 \simeq 15$, siendo los tiempos de relajación prácticamente los mismos en los cuatro casos ($s \approx 10$). Durante la etapa hidrodinámica y en el estado estacionario, la población de partículas (medida por R_3) que tienen un módulo de la velocidad mayor que tres veces la velocidad térmica $v_0(t) = \sqrt{2T(t)/m}$ es notablemente más alta que la esperada a partir de la distribución de Maxwell–Boltzmann. Este efecto de exceso de población inducido por el movimiento de cizalladura también está presente en el intervalo $2v_0(t) < V < 3v_0(t)$, es decir, $R_2 > 1$. A lo largo de la etapa hidrodinámica, entre el 90 % y el 93 % de las partículas se mueven con un módulo de la velocidad menor que $2v_0(t)$ (en contraste con el valor del 95.4 % dado por la aproximación de equilibrio local), siendo ésta la región relevante para los momentos de orden bajo. Mientras que la región de velocidad baja $V < v_0(t)$ (medida por R_0) presenta un exceso de población del 20 % aproximadamente respecto de la distribución de Maxwell–Boltzmann, la región intermedia $v_0(t) < V < 2v_0(t)$ (medida por R_1) presenta un defecto de población de prácticamente la misma cantidad. De hecho, la fracción de partículas moviéndose con $V < v_0(t)$ y $v_0(t) < V < 2v_0(t)$ es del 51 % y 42 %, respectivamente, en el estado estacionario, mientras que los valores de equilibrio local correspondientes son 42.8 % y 52.6 %, respectivamente. Como se puede comprobar en la figura 4.13, el sistema EHS + fricción es capaz de capturar con éxito todas estas características, incluso para este valor tan elevado de la inelasticidad.

El hecho de que $\langle V_{12}^3 \rangle > \langle V_{12}^3 \rangle_0$ nos sugiere que se podría esperar un mejor acuerdo entre la dinámica del gas IHS y la del sistema EHS si el coeficiente de fricción de éste último fuese $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0 \langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ en lugar de $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$, de modo que la tasa de enfriamiento del gas EHS tendría la misma dependencia funcional de f que el gas IHS. Para comprobar esta suposición, hemos realizado nuevas simulaciones del gas EHS, pero con esta versión más refinada del coeficiente de fricción, en el caso $\alpha = 0.5$, $a\tau^0 = 4$. Con la finalidad de ganar en claridad, no se han incluido las correspondientes curvas en las figuras 4.5, 4.6, 4.8, 4.10, 4.12 y 4.13. Los resultados muestran que, en general, las cantidades asociadas

⁴El estado de enfriamiento homogéneo, por ejemplo.

⁵En esta clase de estados homogéneos y considerando un gas EHS + fricción, este efecto de exceso de población no se da, puesto que en ese caso la función de distribución de velocidades es de tipo gaussiano.

a los momentos de orden bajo (temperatura y tensor de presiones) están efectivamente más cercanas a los valores del gas IHS que con la elección más sencilla $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$. Merece la pena comentar que ahora la temperatura del gas EHS es ligeramente menor que la del sistema IHS, al contrario de lo que sucedía antes. Sin embargo, en los casos de $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$, a_2 y a_3 , los resultados obtenidos en las simulaciones del gas EHS con $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0 \langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ no resultan ser mejores que los obtenidos con $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$.

4.5.3. Estado estacionario

Una vez que se ha analizado el periodo transitorio hacia el estado estacionario en los casos representativos $\alpha = 0.5$ y $\alpha = 0.9$, nos vamos a centrar en las propiedades más relevantes del estado estacionario para todos los valores $\alpha = 0.5$ – 0.95 considerados. En la figura 4.14 se representan las magnitudes asociadas con los momentos de la velocidad de segundo orden, tales como el gradiente de velocidad reducido $a_s^* = a\tau_\eta(T_s) \propto 1/\sqrt{T_s}$, la tensión tangencial reducida $-P_{xy,s}/nT_s$ y las diferencias de tensiones normales reducidas $(P_{xx,s} - P_{yy,s})/nT_s$ y $(P_{zz,s} - P_{yy,s})/nT_s$. El solapamiento de los datos obtenidos a partir de las simulaciones efectuadas con dos valores muy diferentes del gradiente de velocidad ($a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$) confirma que se ha alcanzado el estado estacionario y que la función de distribución de velocidades intrínseca $f_s^*(\mathbf{C})$ [ver ecuación (4.21)] depende solamente de α y no de la preparación inicial del sistema. En el caso de las magnitudes a_s^* y $-P_{xy,s}/nT_s$, que son las más relevantes en el problema del flujo tangencial uniforme, se da un buen acuerdo entre los resultados proporcionados por los modelos IHS y EHS para $\alpha \gtrsim 0.7$. Sin embargo, para valores mayores de la inelasticidad, la temperatura estacionaria correspondiente al sistema EHS es mayor que la del gas IHS. Consecuentemente, a_s^* presenta el comportamiento contrario, es decir, es menor en el gas EHS que en el IHS. Esto conlleva que la anisotropía sea ligeramente menor en el sistema elástico que en el inelástico, y así le sucede a la tensión tangencial reducida $-P_{xy,s}/nT_s$. En el caso de las diferencias de tensiones normales reducidas $(P_{xx,s} - P_{yy,s})/nT_s$ y, especialmente, $(P_{zz,s} - P_{yy,s})/nT_s$, éstas comienzan a diferir en ambos sistemas a partir de $\alpha \lesssim 0.85$. Merece la pena hacer notar que el modelo cinético BGK, que tiene una solución explícita en el estado estacionario (Santos and Astillero, 2005; Santos, Garzó and Dufty, 2004) que ha sido descrita en la subsección 2.4.3, hace una buena predicción de las propiedades de transporte, especialmente en el caso del sistema EHS. Una excepción a esto la constituye la magnitud $(P_{zz,s} - P_{yy,s})/nT_s$, que se hace cero en el caso del modelo BGK pero toma valores positivos (aunque pequeños) en las simulaciones.

En la figura 4.14 se incluyen también resultados obtenidos a partir de simulaciones de control del sistema EHS en el caso $\alpha = 0.5$, utilizando la versión más refinada del coeficiente de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0 \langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ en lugar de la más sencilla $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$. Observamos que el acuerdo con los resultados del gas IHS mejora en aquellas magnitudes, como T_s , $P_{xy,s}$ y $P_{xx,s} - P_{yy,s}$, que ya eran reproducidas

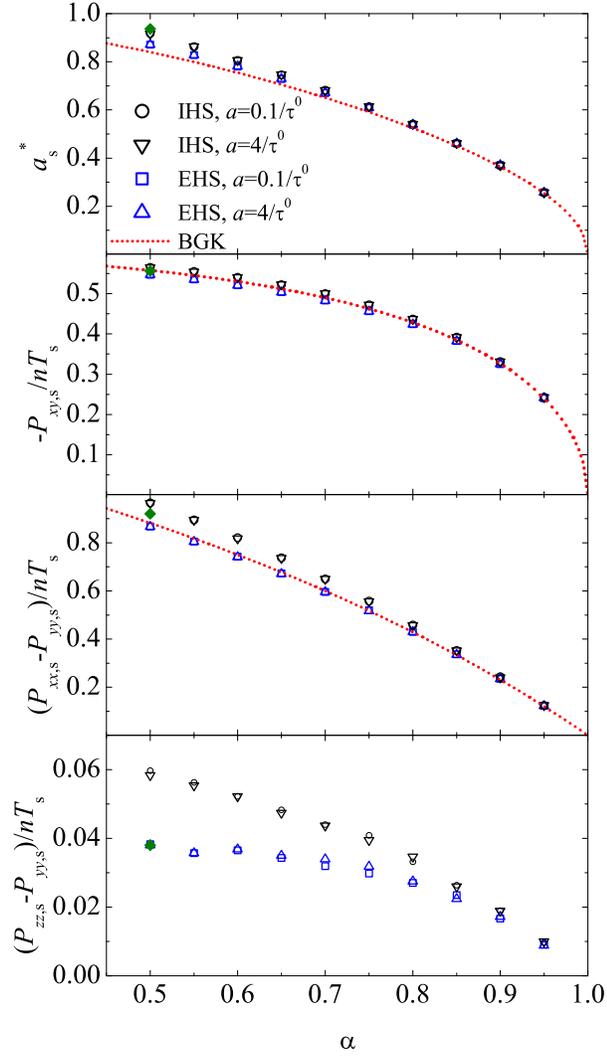


Figura 4.14: Valores correspondientes al estado estacionario del gradiente de velocidad reducido $a^* = a\tau_\eta$, la tensión tangencial reducida $-P_{xy}/nT$ y las diferencias de tensiones normales reducidas $(P_{xx} - P_{yy})/nT$ y $(P_{zz} - P_{yy})/nT$ en función del coeficiente de restitución normal α . Los símbolos pertenecen a resultados de simulación para IHS y EHS y dos valores distintos del gradiente de velocidad, mientras que las líneas punteadas representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Nótese que $P_{zz,s} = P_{yy,s}$ en el modelo BGK. Los símbolos en forma de rombo representan resultados de simulación del sistema EHS con la constante de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ en el caso $\alpha = 0.5$, $a\tau^0 = 4$.

razonablemente bien por la versión inicial más simple del modelo EHS (es decir, con $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$). Sin embargo, la diferencia de tensiones normales $P_{zz,s} - P_{yy,s}$, que es relativamente pequeña, es aproximadamente un 40% menor en ambos sistemas EHS que en el gas IHS. Esto demuestra que cuando las discrepancias entre los modelos IHS y EHS comienzan a ser relativamente importantes, la elección de una versión más sofisticada del coeficiente de fricción ξ no mejora sustancialmente los resultados.

Desde un punto de vista reológico, resulta conveniente introducir la viscosidad tangencial no lineal $\eta^* = -(P_{xy}/a)/\eta_0 = -(P_{xy}/nT)/a^*$ y las funciones viscométricas $\Psi_1 = (P_{yy} - P_{xx})/nTa^{*2}$ y $\Psi_2 = (P_{zz} - P_{yy})/nTa^{*2}$. En la etapa hidrodinámica, estas magnitudes son funciones de a^* (para un valor dado de α), como ya se mostró en la figura 4.10 en el caso de η^* para $\alpha = 0.5$ y como se discutirá con más detalle en el capítulo 5. Una vez que se alcanza el estado estacionario ($a^* \rightarrow a_s^*$), estas cantidades son únicamente funciones de α . Equivalentemente, podemos eliminar α en favor del gradiente de velocidad reducido estacionario a_s^* , con lo cual las magnitudes anteriores pueden ser vistas también como funciones de a_s^* . Esto aparece representado en la figura 4.15. En primer lugar, observamos que la curva $\eta_s^*(a_s^*)$ para el sistema EHS está muy próxima a la del gas IHS. Se ve también que para un valor dado de α (o, lo que es lo mismo, de a_s^*) los puntos pertenecientes al sistema EHS están ligeramente desplazados respecto a los del gas IHS, siendo este desplazamiento mayor a medida que α disminuye. Por otro lado, los efectos viscométricos son más pronunciados en el caso IHS que en el EHS. Paradójicamente, las curvas de η_s^* y $\Psi_{1,s}$ pertenecientes al modelo de tipo BGK están más próximas a las del modelo IHS que a las del EHS, como se puede comprobar en la figura 4.15. Obsérvese que los puntos aislados correspondientes al modelo EHS con $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0 \langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ son consistentes con la curva que se obtiene uniendo los otros puntos del sistema elástico.

En la figura 4.16 se muestra, para el estado estacionario, la dependencia en α de la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ y de los cumulantes a_2 y a_3 . Recordemos que en el sistema IHS la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ coincide con el cociente ζ/ζ_0 entre la verdadera tasa de enfriamiento y su estimación en la aproximación de equilibrio local. Se observa que la aproximación de equilibrio local infravalora la tasa de enfriamiento en un pequeño porcentaje, siendo esto debido, en gran medida, a la distorsión introducida por el movimiento de cizalladura. El modelo EHS captura bastante bien esta distorsión, a pesar de que, por construcción, su tasa de enfriamiento está dada por ζ_0 . Como ya se ha comentado anteriormente, los valores positivos de a_2 y, especialmente, $-a_3$ son indicadores de un efecto de exceso de población (respecto a la distribución de Maxwell-Boltzmann) en la región de energía alta de la distribución. En realidad, tanto en el estado de enfriamiento homogéneo como en el calentado mediante un forzamiento de ruido blanco, la función de distribución del gas EHS + fricción es una gaussiana. Por lo tanto, el exceso de población medido por a_2 y $-a_3$ es básicamente un efecto motivado por el movimiento de cizalladura. El modelo EHS reproduce bastante bien el cuarto cumulante, pero la magnitud del sexto cumulante es mayor en el

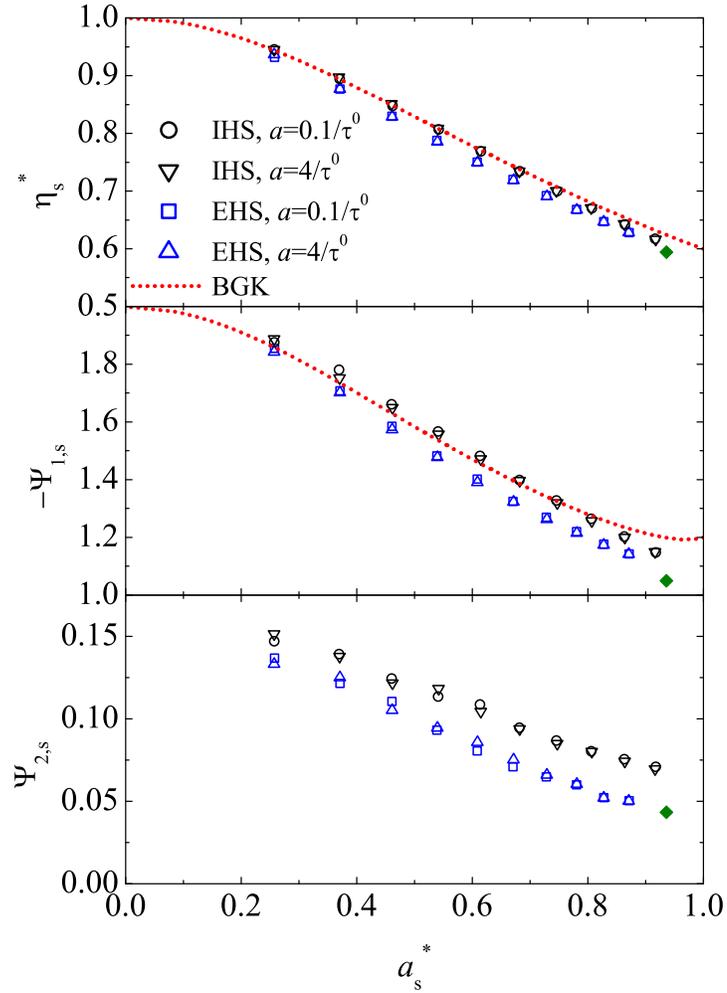


Figura 4.15: Valores estacionarios de la viscosidad tangencial reducida $\eta^* = \eta/\eta_0$ y de las funciones viscométricas $-\Psi_1 = (P_{xx} - P_{yy})/nTa^{*2}$ y $\Psi_2 = (P_{zz} - P_{yy})/nTa^{*2}$ en función del gradiente de velocidad reducido a_s^* . Los símbolos pertenecen a resultados de simulación para IHS y EHS y dos valores distintos del gradiente de velocidad, mientras que las líneas punteadas representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Nótese que $\Psi_{2,s} = 0$ en el modelo BGK. Los símbolos en forma de rombo representan resultados de simulación del sistema EHS con la constante de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0 \langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ en el caso $\alpha = 0.5$, $a\tau^0 = 4$.

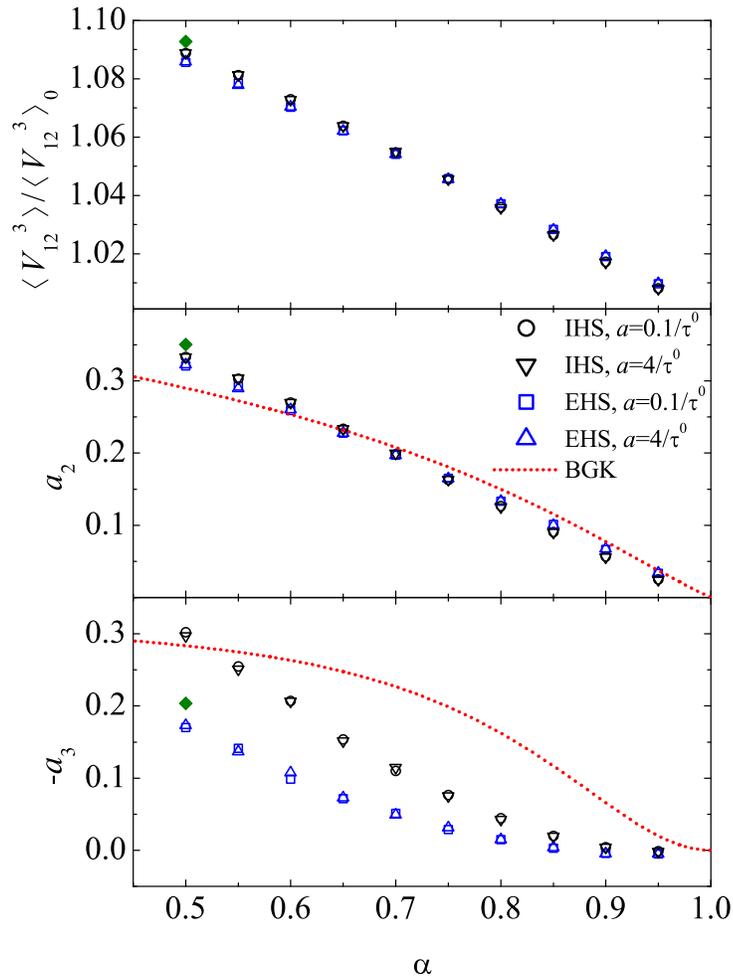


Figura 4.16: Valores estacionarios de la razón $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$, el cuarto cumulante a_2 y el sexto cumulante $-a_3$ en función del coeficiente de restitución normal α . Los símbolos pertenecen a resultados de simulación para IHS y EHS y dos valores distintos del gradiente de velocidad, mientras que las líneas punteadas representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. Los símbolos en forma de rombo representan resultados de simulación del sistema EHS con el coeficiente de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0 \langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ en el caso $\alpha = 0.5$, $a\tau^0 = 4$.

caso inelástico que en el elástico. Como sucede para la diferencia de tensiones normales $P_{zz} - P_{yy}$ (ver el panel inferior de la figura 4.14), el cumulante a_3 es una magnitud muy sensible que sondea aspectos más finos de la función de distribución del gas IHS, aspectos que, el modelo EHS no es capaz de capturar eficazmente para $\alpha \lesssim 0.85$.

Notemos que para $\alpha \gtrsim 0.7$, $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ y a_2 son ligeramente mayores en el gas EHS que en el IHS, mientras que para $\alpha \lesssim 0.7$ sucede lo contrario. En el estado de enfriamiento homogéneo y en el calentado mediante un forzamiento de ruido blanco (van Noije and Ernst, 1998) sucede algo similar, ya que en esos casos $a_2^{\text{IHS}} \leq a_2^{\text{EHS}} = 0$ para $\alpha \geq \sqrt{2}/2 \simeq 0.71$, mientras que $a_2^{\text{IHS}} \geq a_2^{\text{EHS}} = 0$ para $\alpha \leq \sqrt{2}/2$. De hecho, hemos comprobado que la diferencia $a_2^{\text{IHS}} - a_2^{\text{EHS}}$ en el caso del flujo tangencial uniforme está muy cercana a la correspondiente al caso del estado calentado mediante un forzamiento de ruido blanco. La figura 4.16 muestra también una importante correlación entre los valores de $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ y los de a_2 . De hecho, hemos comprobado de forma empírica que $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0 \simeq 1 + 0.27a_2$ tanto para IHS como para EHS en el flujo tangencial uniforme, en contraste con $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0 \simeq 1 + \frac{3}{16}a_2$ en estados homogéneos (van Noije and Ernst, 1998).

En la figura 4.16 hemos incluido también las predicciones del modelo tipo BGK para los cumulantes a_2 y a_3 . La evaluación de $\langle V_{12}^3 \rangle$ [ver ecuación (2.20)], que no está asociada a ningún momento convencional de la velocidad, a partir de la función de distribución del modelo BGK requiere un arduo trabajo numérico y por ello no ha sido incluida en la figura 4.16. Observamos que el modelo BGK captura bien el incremento de a_2 a medida que lo hace la inelasticidad. Sin embargo, la dependencia en α de $-a_3$ es descrita por el modelo BGK solamente a un nivel cualitativo, prediciendo generalmente valores demasiado altos.

En lo que respecta a las simulaciones de control del gas EHS con $\alpha = 0.5$ y $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0 \langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$, observamos que $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ y a_2 no mejoran, mientras que la mejora en a_3 es bastante reducida.

Las magnitudes representadas en las figuras 4.14–4.16 proporcionan de forma indirecta información muy útil acerca de la función de distribución de velocidades correspondiente al estado estacionario del flujo tangencial uniforme. Sin embargo, sondan esencialmente la región de velocidades bajas o moderadas (por ejemplo, $V \lesssim 2\sqrt{2T/m}$), excepto quizás los casos de a_2 y, especialmente, a_3 , que son más sensibles a la región de energía alta. Con el objetivo de analizar directamente la forma de la función de distribución de velocidades, su anisotropía y la región de energía alta, hemos calculado en las simulaciones las distribuciones marginales definidas en las ecuaciones (4.23)–(4.25) en el estado estacionario. A modo de ejemplos representativos, las figuras 4.17 (escala lineal) y 4.18 (escala logarítmica) muestran $g_x^{(+)}(C_x)$, $g_y^{(+)}(C_y)$ y $F(C)$ para $\alpha = 0.9$ y $\alpha = 0.5$. Hemos comprobado que se cumplen las propiedades de simetría (4.26) y que las curvas obtenidas con los dos valores del gradiente de velocidad ($a\tau^0 = 4$ y $a\tau^0 = 0.1$) prácticamente coinciden. De hecho, para mejorar la estadística, los

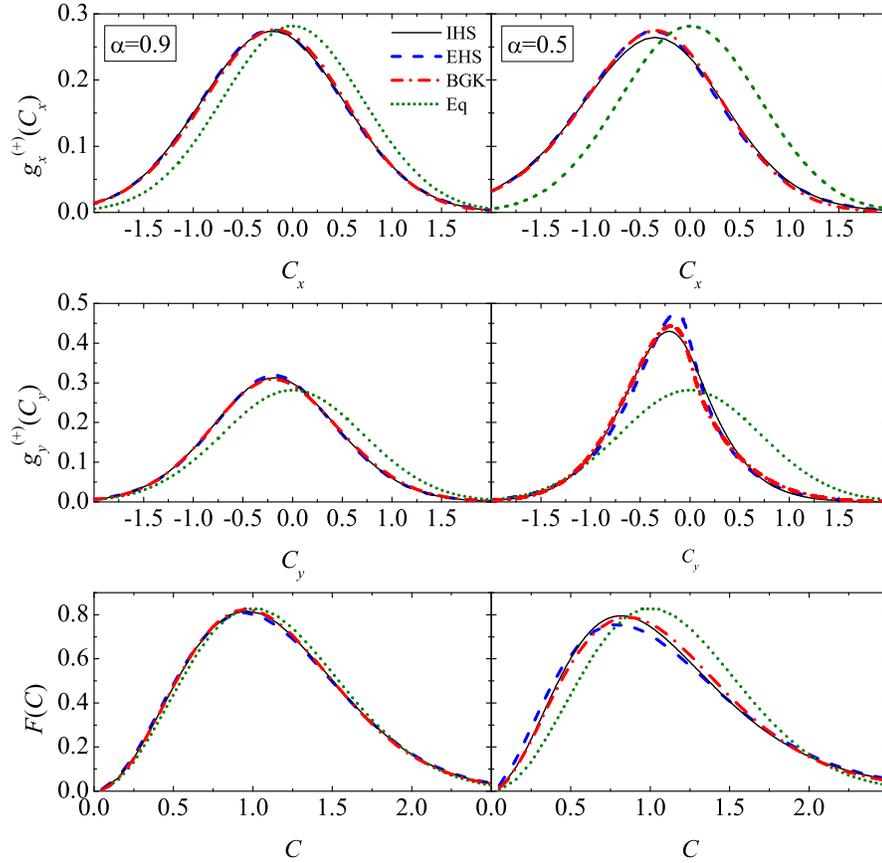


Figura 4.17: Representaciones lineales de las funciones de distribución de velocidades marginales $g_x^{(+)}(C_x)$, $g_y^{(+)}(C_y)$ y $F(C)$ para $\alpha = 0.9$ (paneles de la izquierda) y $\alpha = 0.5$ (paneles de la derecha). Las líneas continuas y segmentadas corresponden a resultados de simulación para IHS y EHS, respectivamente, las segmentos puntuadas representan las predicciones del modelo BGK y las puntuadas son las distribuciones de equilibrio (local).

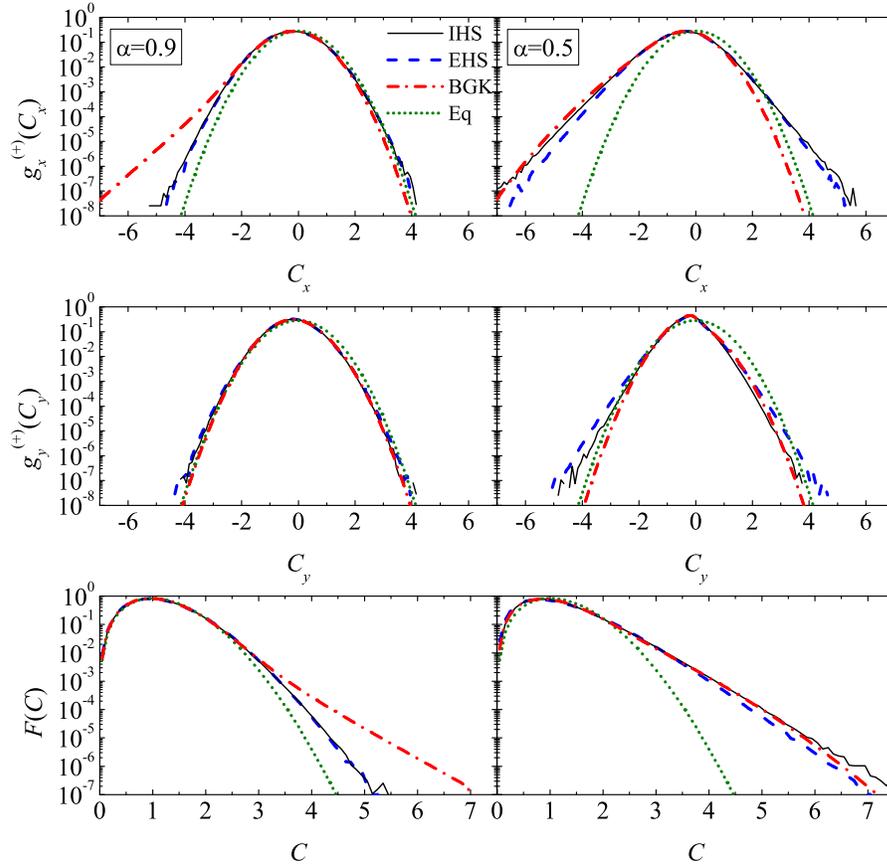


Figura 4.18: Representaciones logarítmicas de las funciones de distribución de velocidades marginales $g_x^{(+)}(C_x)$, $g_y^{(+)}(C_y)$ y $F(C)$ para $\alpha = 0.9$ (paneles de la izquierda) y $\alpha = 0.5$ (paneles de la derecha). Las líneas continuas y segmentadas corresponden a resultados de simulación para IHS y EHS, respectivamente, las segmentos puntuadas representan las predicciones del modelo BGK y las puntuadas son las distribuciones de equilibrio (local).

datos de simulación presentados en las figuras 4.17 y 4.18 han sido promediados para ambos valores del gradiente de velocidad y, además, hemos empleado las propiedades de simetría (4.26) para hacer

$$g_x^{(+)}(C_x) \rightarrow \frac{1}{2} \left[g_x^{(+)}(C_x) + g_x^{(-)}(-C_x) \right], \quad g_y^{(+)}(C_y) \rightarrow \frac{1}{2} \left[g_y^{(+)}(C_y) + g_y^{(-)}(-C_y) \right] \quad (4.52)$$

Dos rasgos de anisotropía propios del flujo tangencial uniforme aparecen claramente. En primer lugar, las funciones $g_x^{(+)}(C_x)$ y $g_y^{(+)}(C_y)$ son visiblemente asimétricas, a saber $g_x^{(+)}(|C_x|) < g_x^{(+)}(-|C_x|)$ y $g_y^{(+)}(|C_y|) < g_y^{(+)}(-|C_y|)$. Esto es un efecto físico inducido por el movimiento de cizalladura, en consistencia con $P_{xy} \propto \langle C_x C_y \rangle < 0$. El segundo de los rasgos es la propiedad no newtoniana de anisotropía $g_x^{(+)} \neq g_y^{(+)}$. Más específicamente, la distribución marginal $g_x^{(+)}$ es más ancha que $g_y^{(+)}$, de acuerdo con el hecho de que $P_{xx} - P_{yy} \propto \langle C_x^2 \rangle - \langle C_y^2 \rangle > 0$. Estos dos efectos son más pronunciados para $\alpha = 0.5$ que para $\alpha = 0.9$.

La figura 4.17 muestra que, para $\alpha = 0.9$ y en la región de velocidades bajas e intermedias, existe un acuerdo excelente entre los modelos IHS y EHS, en congruencia con los resultados presentados en las figuras 4.14–4.16. Para $\alpha = 0.5$, se observa que las distribuciones $g_x^{(+)}(C_x)$, $g_y^{(+)}(C_y)$ y $F(C)$ del gas EHS están más pobladas que las correspondientes al gas IHS en los intervalos $-1 \lesssim C_x \lesssim 0$, $-0.3 \lesssim C_y \lesssim 0$ y $C \lesssim 0.5$, respectivamente. Es interesante observar que, en la región de velocidades térmicas, la función de distribución $F(C)$ se encuentra menos distorsionada respecto de la distribución de Maxwell–Boltzmann que las distribuciones marginales $g_x^{(+)}(C_x)$ y $g_y^{(+)}(C_y)$, especialmente en el caso $\alpha = 0.9$. Otra cuestión importante y que no podemos pasar por alto es que el modelo cinético BGK, no solamente captura bien las propiedades “globales” o promediadas, tales como las magnitudes hidrodinámicas [ver figuras 4.14–4.16], sino también los detalles “locales” de la función de distribución de velocidades.

En la figura 4.18 hemos utilizado la escala logarítmica para poder visualizar mejor las regiones de energía alta (colas de velocidad alta) de las distribuciones. Observamos un exceso de población en ambas colas de $g_x^{(+)}$, particularmente para $\alpha = 0.5$. En el caso de $g_y^{(+)}$, sin embargo, el exceso de población parece darse sólo en la cola $C_y < 0$. Donde se aprecia claramente el exceso de población en la región de energía alta es en la función de distribución del módulo de la velocidad, $F(C)$. En un artículo reciente, (Bobylev, Gamba and Panferov, 2004) han probado que, para velocidades asintóticamente grandes en el estado de flujo tangencial uniforme, $\ln F(C) \sim -C^\mu$ con $\mu \geq 1$. Aunque no podemos afirmar con seguridad que nuestros datos de simulación han alcanzado el régimen de velocidades altas en el que domina la ley asintótica $\ln F(C) \sim -C^\mu$, los paneles inferiores de la figura 4.18 parecen ser consistentes con esta ley con $\mu \simeq 1$.

Los comentarios efectuados en el párrafo anterior son válidos tanto para el gas IHS como para el EHS. En realidad, en el caso $\alpha = 0.9$ los datos de simulación son prácticamente indistinguibles entre ambos sistemas. Por contra, en el caso $\alpha = 0.5$ y en la región de energía alta, los valores de $g_x^{(+)}(C_x)$ y $F(C)$ son mayores para IHS que para EHS, sucediendo lo contrario para $g_y^{(+)}(C_y)$. En el caso de la función de distribución de velocidades del modelo BGK, no es de esperar que proporcione buenos resultados más allá de la región de velocidades térmicas. Esto se ve confirmado por la figura 4.18, donde podemos observar, para $\alpha = 0.9$, que el modelo BGK exagera intensamente el efecto de exceso de población de $g_x^{(+)}(C_x)$ y $F(C)$. Esto ocasiona un valor demasiado grande del sexto cumulante $-a_3$, según vimos en la figura 4.16. Por otro lado, para $\alpha = 0.5$ el valor de $-a_3$ dado por el modelo BGK está de acuerdo, por accidente, con el del gas IHS. Esto confirma el hecho de que en este caso la cola de energía alta predicha por el modelo BGK acuerda bastante bien con la del sistema inelástico. Sin embargo, tanto la cola de $g_x^{(+)}(C_x)$ para $C_x > 0$ como la de $g_y^{(+)}(C_y)$ para $C_y < 0$ están fuertemente infravaloradas por el modelo BGK para $\alpha = 0.5$.

Con la idea de ganar en claridad, no hemos incluido en los paneles derechos de las figuras 4.17 y 4.18 las curvas correspondientes a las simulaciones del sistema EHS para $\alpha = 0.5$ y el coeficiente de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$. En cualquier caso, los resultados proporcionados por el modelo son muy parecidos a los obtenidos con el coeficiente de fricción original $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$. Esto nos muestra que las diferencias cuantitativas más importantes entre los sistemas altamente disipativos IHS y EHS, en particular las colas de velocidad alta, son intrínsecas a las dinámicas internas diferentes de ambos sistemas. Por tanto, un ajuste más fino de la fuerza de fricción que actúa sobre el gas EHS no mejora sustancialmente los resultados.

Capítulo 5

Comportamiento hidrodinámico de un gas granular en el flujo tangencial uniforme

5.1. Introducción

Como es bien sabido, en la descripción hidrodinámica de un fluido convencional las ecuaciones de balance de las densidades de las cantidades conservadas (masa, cantidad de movimiento y energía) [ver ecuaciones (2.6)–(2.8)] se convierten en ecuaciones cerradas cuando las ecuaciones constitutivas de los flujos de cantidad de movimiento y energía son conocidas. Dichas ecuaciones proporcionan la relación existente entre los flujos de momento y energía con las densidades conservadas y sus gradientes. Si los gradientes hidrodinámicos son débiles, podemos suponer que los flujos son lineales en esos gradientes, siendo esto conocido como la descripción hidrodinámica de Navier–Stokes (NS). Por otro lado, incluso si los gradientes son intensos, es posible un régimen hidrodinámico (no newtoniano) más allá del de Navier–Stokes. El escenario convencional para la relajación hacia el “comportamiento hidrodinámico” en un gas convencional puede describirse del siguiente modo (Dorfman and van Beijeren, 1977). Dado un estado inicial arbitrario, la evolución tiene lugar en dos etapas sucesivas. En primer lugar, durante la denominada etapa *cinética* hay una relajación rápida (que dura unas pocas colisiones por partícula) a una función de distribución de velocidades “universal” (o “normal”) $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t)$ que es una funcional de los campos hidrodinámicos (densidad numérica, velocidad media y temperatura). Posterior-

mente, la etapa “hidrodinámica” está descrita por una evolución más lenta de los campos hidrodinámicos a medida que se aproximan o bien a un estado de equilibrio o bien a un estado estacionario de no equilibrio impuesto externamente. La primera de las dos etapas es muy sensible a la preparación inicial del sistema, mientras que en la etapa hidrodinámica el sistema prácticamente ha “olvidado” los detalles de las condiciones iniciales (excepto por una dependencia implícita de las condiciones iniciales a través de los campos hidrodinámicos). Si los gradientes hidrodinámicos son lo suficientemente pequeños cuando se alcanza la etapa hidrodinámica, ésta puede ser descrita por los términos de Navier–Stokes del desarrollo de Chapman–Enskog (Chapman and Cowling, 1970). No obstante, una función de distribución de velocidades normal (o hidrodinámica) no se encuentra restringida exclusivamente al dominio de Navier–Stokes, sino que puede existir también en situaciones muy alejadas del equilibrio (régimen no newtoniano) (Garzó and Santos, 2003).

La aplicabilidad de una descripción hidrodinámica a fluidos granulares no es del todo evidente (Kadanoff, 1999). En particular, como se observa en la ecuación (2.8), la no conservación de la energía ocasiona la aparición de un término sumidero en la ecuación de balance de la energía. Dado que la escala temporal para la temperatura está dada por dicho término sumidero más que por los gradientes espaciales, pudiera ocurrir que el papel de la temperatura como variable hidrodinámica (lenta) dejara de ser cierto a medida que la disipación aumentara. Sin embargo, al menos en el régimen de Navier–Stokes, hay evidencias convincentes tanto teóricas (Brey and Dufty, 2005; Santos and Dufty, 2006), como de simulaciones en ordenador (Brey, Ruiz-Montero and Moreno, 2001; Brey et al., 2002; Dahl et al., 2002) y experimentos (Rericha et al., 2002; Yang et al., 2002; Huan et al., 2004) que apoyan la validez del tratamiento hidrodinámico de los fluidos granulares. Por otra parte, la inherente falta de separación de escalas en gases granulares sometidos a cizalladura invalida una descripción de Navier–Stokes, de modo que la aplicación de la hidrodinámica a esos estados ha sido motivo de controversia (Tan and Goldhirsch, 1998; Dufty and Brey, 1999; Tan and Goldhirsch, 1999). Es sabido que el escenario de relajación hacia el comportamiento hidrodinámico descrito más arriba se cumple en dos casos límite: disipación finita en ausencia de gradientes (es decir, en la evolución hacia el estado de enfriamiento homogéneo (Dahl et al., 2002)) y disipación nula pero gradientes altos (Garzó and Santos, 2003). Teniendo en cuenta esto, la pregunta que queremos abordar en este capítulo es si ese escenario que acabamos de discutir puede seguir aplicándose a gases granulares con una fuerte disipación y en el régimen no newtoniano.

Con la finalidad de clarificar la cuestión anterior y su posible respuesta de un modo más riguroso de cómo lo abordamos en el capítulo 4, consideramos de nuevo un gas tridimensional de esferas duras inelásticas en condiciones de flujo tangencial uniforme descrito en el sistema de referencia lagrangiano. Podemos justificar la elección de este tipo particular de flujo en base a tres razones principales (Astillero and Santos, 2007*a*). En primer lugar, es un flujo sencillo desde

un punto de vista macroscópico puesto que sólo hay un gradiente hidrodinámico ($a = \partial u_x / \partial y$) que, además, es constante. En segundo lugar, este flujo tiene un estado estacionario (resultado del balance entre el enfriamiento debido a la inelasticidad de las colisiones y el calentamiento viscoso) que es inherentemente no newtoniano (Santos, Garzó and Dufty, 2004) como vimos en la subsección 4.5.3. Por último, puesto que tanto la densidad n como la velocidad media $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ son independientes del tiempo la posible evolución hacia el régimen hidrodinámico está gobernada por la evolución temporal de la temperatura granular, que es precisamente la magnitud que pone en duda la aplicabilidad de una descripción hidrodinámica.

En el flujo tangencial uniforme la ecuación de continuidad de la masa, ecuación (2.6), se satisface de forma trivial, mientras que la conservación de la cantidad de movimiento, ecuación (2.7), implica que la tensión tangencial P_{xy} es uniforme. La ecuación de balance de la energía (2.8) se reduce a

$$\partial_t T(t) = -\frac{2a}{dn} P_{xy}(t) - \zeta(t)T(t), \quad (5.1)$$

Como ya vimos en el capítulo 4, dados un gradiente de velocidad a y un coeficiente de restitución normal α , se alcanza una temperatura estacionaria $T_s = \lim_{t \rightarrow \infty} T(t)$ cuando el calentamiento viscoso y el enfriamiento disipativo se compensan mutuamente, es decir, $\frac{2}{3}a|P_{xy,s}|/nT_s = \zeta_s$. La temperatura se aproxima a su valor estacionario desde abajo ($T(t) < T_s$) cuando el gradiente de velocidad es lo suficientemente grande y/o la inelasticidad pequeña, de modo que la tasa de calentamiento (debida a efectos viscosos) $\frac{2}{3}a(t)|P_{xy}(t)|$ prevalece sobre la tasa de enfriamiento (debida a la inelasticidad) $\zeta(t)$; nos referiremos a esta situación como el caso de *calentamiento*. Si por el contrario, el valor estacionario de la temperatura se alcanza desde arriba, nos referiremos a esta situación como el caso de *enfriamiento*. En este contexto, la pregunta planteada más arriba se puede expresar ahora de la manera siguiente: ¿puede existir, tanto en el caso de calentamiento como en el de enfriamiento, un régimen hidrodinámico antes que se alcance el estado estacionario?

Restringiéndonos a estados que son uniformes en el sistema de referencia no inercial *lagrangiano* [ver ecuación (2.85)], la ecuación de Boltzmann está dada por (Garzó and Santos, 2003; Santos, Garzó and Dufty, 2004)

$$(\partial_t - aV_y \partial_{V_x}) f(\mathbf{V}, t) = J[f(t), f(t)], \quad (5.2)$$

donde por comodidad hemos omitido el superíndice (α) en el operador de colisión de Boltzmann inelástico. La ecuación (5.2) debe ser complementada con una condición inicial $f(\mathbf{V}, 0) = f^0(\mathbf{V})$, de modo que la solución es una funcional de la función de distribución inicial, es decir, $f(\mathbf{V}, t) = f(\mathbf{V}, t|f^0)$. Análogamente, los momentos de f , tales como el tensor de presiones $P(t|f^0)$, son también fun-

cionales de f^0 . Puesto que la única magnitud hidrodinámica dependiente del tiempo es la temperatura granular $T(t)$ y el único gradiente hidrodinámico es el de velocidad a , la existencia de un régimen hidrodinámico implica que, tras un cierto número de colisiones por partícula, se verifica la ecuación (4.50), es decir,

$$f(\mathbf{V}, t|f^0) \rightarrow n \left[\frac{m}{2T(t)} \right]^{3/2} f^*(\mathbf{C}(t); a^*(t)), \quad (5.3)$$

donde de nuevo $\mathbf{C}(t) \equiv \mathbf{V}/\sqrt{2T(t)/m}$ es la velocidad peculiar en unidades de la velocidad térmica y $a^*(t) = a\tau_\eta(T(t))$ es el gradiente de velocidad reducido, siendo $\tau_\eta(T)$ el tiempo característico definido por las ecuaciones (4.1) y (4.4). La función de distribución de velocidades $f^*(\mathbf{C}; a^*)$ es, para un valor dado del coeficiente de restitución α , una función *universal* en el sentido que es independiente del estado inicial f^0 y depende del gradiente de velocidad aplicado a únicamente a través de la cantidad reducida a^* . En otras palabras, si es posible una descripción hidrodinámica, las diferentes soluciones $f(\mathbf{V}, t|f^0)$ de la ecuación de Boltzmann (5.2) deben ser “atraídas” por la forma universal (5.3). Para tiempos asintóticamente grandes, finalmente se alcanzará el estado estacionario, es decir, $f^*(\mathbf{C}; a^*) \rightarrow f_s^*(\mathbf{C}) = f^*(\mathbf{C}; a_s^*)$. La ecuación (5.3) tiene su homóloga al nivel de los momentos de la función de distribución de velocidades. En particular, el tensor de presiones $\mathbf{P}(t|f^0)$ será

$$\mathbf{P}(t|f^0) \rightarrow nT(t)\mathbf{P}^*(a^*(t)) \quad (5.4)$$

donde $\mathbf{P}^*(a^*)$ es independiente de f^0 . El carácter no newtoniano del régimen hidrodinámico puede ser caracterizado por la viscosidad tangencial (reducida) no lineal $\eta^*(a^*) = -P_{xy}^*(a^*)/a^*$ y las funciones viscométricas (reducidas) $\Psi_1(a^*) = [P_{yy}^*(a^*) - P_{xx}^*(a^*)]/a^{*2}$ y $\Psi_2(a^*) = [P_{zz}^*(a^*) - P_{yy}^*(a^*)]/a^{*2}$, que ya introdujimos en el capítulo 4.

5.2. Un modelo reológico sencillo basado en el modelo cinético BGK

Antes de presentar los resultados de simulación, merece la pena considerar el sencillo modelo cinético tipo BGK (Brey, Dufty and Santos, 1999; Santos and Astillero, 2005) descrito por la ecuación (2.67). Aplicado al flujo tangencial uniforme, el modelo cinético BGK cierra la ecuación (5.1) o, equivalentemente, la ecuación (2.88), con las ecuaciones de evolución (2.89) y (2.90) (Santos, Garz3 and Dufty, 2004; Brey, Ruiz-Montero and Moreno, 1997; Santos and Astillero, 2005).

Al final de los cálculos tomaremos $\beta = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$ y $\zeta_0 = \zeta_0^* \nu_0$ con $\zeta_0^* = (d+2)(1 - \alpha^2)/4d$. No obstante, por el momento es suficiente considerar β y ζ^* como parámetros constantes. En principio, el sistema de ecuaciones acopladas (2.88)–(2.90) debe resolverse numéricamente (Santos, Garzó and Dufty, 2004), en cuyo caso la solución incluye tanto el régimen transitorio cinético como la etapa de evolución hidrodinámica, sin una separación totalmente nítida entre ambas etapas. Esta solución numérica es la que se ha presentado, por ejemplo, en las figuras 4.5, 4.7, 4.8 y 4.10.

Al objeto de extraer la solución hidrodinámica de un modo analítico, aunque aproximado, introduciremos un procedimiento semejante al que se ha llevado a cabo en el caso elástico (Garzó and Santos, 2003; Karlin, Dukek and Nonnenmacher, 1997; Karlin, Dukek and Nonnenmacher, 1998). Como sabemos, para un gas de esferas duras $\nu_0(T) \propto T^{1/2}$ [ver ecuación (2.27)]. El método que emplearemos consiste en generalizar las ecuaciones (2.88)–(2.90) al caso $\nu_0(T) \propto T^q$, llevar a cabo un desarrollo perturbativo alrededor de $q = 0$ y tomar $q = \frac{1}{2}$ al final de los cálculos. Es interesante destacar que modelos inelásticos consistentes con $\nu_0(T) \propto T^q$ han sido introducidos por (Ernst, Trizac and Barrat, 2006b; Ernst, Trizac and Barrat, 2006a).

Al objeto de analizar las ecuaciones (2.88)–(2.90) con q arbitrario, es conveniente primero introducir las magnitudes adimensionales

$$\tilde{a} = \frac{a}{\beta \nu_0} = \frac{a^*}{\beta}, \quad \tilde{\zeta} = \frac{\zeta_0}{\beta \nu_0} = \frac{\zeta_0^*}{\beta}. \quad (5.5)$$

En términos de dichas cantidades adimensionales, las ecuaciones (2.88)–(2.90) pueden ser reescritas como

$$\partial_s \ln T = -\frac{2}{d} \tilde{a} P_{xy}^* - \tilde{\zeta}, \quad (5.6)$$

$$\partial_s P_{xy}^* = -\tilde{a} P_{yy}^* - \left(1 - \frac{2}{d} \tilde{a} P_{xy}^*\right) P_{xy}^*, \quad (5.7)$$

$$\partial_s P_{yy}^* = 1 - \left(1 - \frac{2}{d} \tilde{a} P_{xy}^*\right) P_{yy}^*, \quad (5.8)$$

donde $ds = \beta \nu_0 dt$. Con independencia del valor de q , la solución del sistema (5.6)–(5.8) correspondiente al estado estacionario es

$$\tilde{a}_s = \sqrt{d\tilde{\zeta}/2(1 + \tilde{\zeta})}, \quad P_{xy,s}^* = -\frac{\sqrt{d\tilde{\zeta}/2}}{1 + \tilde{\zeta}}, \quad P_{yy,s}^* = \frac{1}{1 + \tilde{\zeta}}, \quad (5.9)$$

que es equivalente a las ecuaciones (2.91)–(2.94).

Consideremos ahora el caso matemático $q = 0$ ¹, de modo que la frecuencia de colisión ν_0 es independiente de la temperatura, y como consecuencia, también del tiempo. Esto lleva aparejado que el gradiente de velocidad reducido a^* (o, equivalentemente, \tilde{a}) es fijo y no cambia con el tiempo. En este caso, a partir de las ecuaciones (5.6) y (5.7) obtenemos

$$P_{xy}^* = -\frac{d}{2\tilde{a}} \left(\tilde{\zeta} + \partial_s \ln T \right) \quad (q = 0), \quad (5.10)$$

$$P_{yy}^* = \frac{d}{2\tilde{a}^2} \left[\tilde{\zeta}(1 + \tilde{\zeta}) + (1 + 2\tilde{\zeta})\partial_s \ln T + T^{-1}\partial_s^2 T \right] \quad (q = 0). \quad (5.11)$$

Sustituyendo las ecuaciones (5.10) y (5.11) en la ecuación (5.8) llegamos a la siguiente ecuación cerrada para la temperatura:

$$\left(\tilde{\zeta} + \partial_s \right) \left(1 + \tilde{\zeta} + \partial_s \right)^2 T = \frac{2}{d} \tilde{a}^2 T \quad (q = 0), \quad (5.12)$$

que es una ecuación diferencial ordinaria homogénea de tercer orden de coeficientes constantes. Su característica asociada es

$$\left(\tilde{\zeta} + \lambda \right) \left(1 + \tilde{\zeta} + \lambda \right)^2 = \frac{2}{d} \tilde{a}^2, \quad (5.13)$$

cuyas tres raíces son

$$\lambda_1 = 2\gamma(\tilde{a}) - \tilde{\zeta}, \quad (5.14)$$

$$\lambda_{2,3} = -1 - \gamma(\tilde{a}) \pm i\omega(\tilde{a}) - \tilde{\zeta}, \quad (5.15)$$

donde hemos hallado

$$\gamma(\tilde{a}) \equiv \frac{2}{3} \sinh^2 \left[\frac{1}{6} \cosh^{-1} \left(1 + \frac{27}{d} \tilde{a}^2 \right) \right], \quad (5.16)$$

$$\omega(\tilde{a}) = \left\{ 2\gamma(\tilde{a}) \left[\frac{3}{2}\gamma(\tilde{a}) + 1 \right] \right\}^{1/2}. \quad (5.17)$$

¹Modelo de Maxwell para colisiones elásticas.

Observemos que $\gamma(\tilde{a})$ es la raíz real de la ecuación cúbica

$$\gamma(1 + 2\gamma)^2 = \frac{1}{d}\tilde{a}^2. \quad (5.18)$$

La solución general de la ecuación (5.12) es entonces

$$T(s) = e^{(2\gamma - \tilde{\zeta})s} \left[A + e^{-(1+3\gamma)s} (B \cos \omega s + C \sin \omega s) \right] \quad (q = 0), \quad (5.19)$$

donde las constantes A , B y C vienen dadas por las condiciones iniciales. Para tiempos suficientemente largos, $s \gg (1 + 3\gamma)^{-1}$, la ecuación (5.19) se reduce a

$$T(s) \rightarrow Ae^{(2\gamma - \tilde{\zeta})s} \quad (q = 0). \quad (5.20)$$

Por tanto, las ecuaciones (5.10) y (5.11) se convierten en

$$P_{xy}^* = -\frac{d\gamma(\tilde{a})}{\tilde{a}} = -\frac{\tilde{a}}{[1 + 2\gamma(\tilde{a})]^2} \quad (q = 0), \quad (5.21)$$

$$P_{yy}^* = \frac{d}{\tilde{a}^2} \gamma(\tilde{a}) [1 + 2\gamma(\tilde{a})] = \frac{1}{1 + 2\gamma(\tilde{a})} \quad (q = 0), \quad (5.22)$$

donde en los últimos pasos hemos usado la ecuación (5.18). Las ecuaciones (5.21) y (5.22) proporcionan la dependencia no newtoniana *hidrodinámica* de P_{xy}^* y P_{yy}^* de \tilde{a} (o, equivalentemente, de a^*) en el caso $q = 0$. De forma general, de acuerdo con la ecuación (5.20), la temperatura decrece monótonamente si $\tilde{\zeta} > 2\gamma(\tilde{a})$ y aumenta si $\tilde{\zeta} < 2\gamma(\tilde{a})$. Por otro lado, la temperatura alcanza un valor estacionario si $\tilde{a} = \tilde{a}_s$, donde

$$\gamma(\tilde{a}_s) = \frac{1}{2}\tilde{\zeta}. \quad (5.23)$$

Empleando la ecuación (5.18), se puede mostrar que se reobtiene la ecuación (5.9) a partir de las ecuaciones (5.21)–(5.23).

Recordemos que las ecuaciones (5.10)–(5.23) están referidas al caso sencillo $q = 0$. Volvamos ahora al caso general en el que $q > 0$. Como consecuencia, ν_0 y \tilde{a} dependen del tiempo a través de su dependencia de la temperatura, con lo cual

$$\partial_s \tilde{a} = -q\tilde{a} \partial_s \ln T. \quad (5.24)$$

Sustituyendo la variable temporal s por \tilde{a} , las ecuaciones (5.7) y (5.8) dan lugar a

$$q \left(\frac{2}{d} \tilde{a} P_{xy}^* + \tilde{\zeta} \right) \tilde{a} \frac{\partial P_{xy}^*}{\partial \tilde{a}} + \tilde{a} P_{yy}^* + \left(1 - \frac{2}{d} \tilde{a} P_{xy}^* \right) P_{xy}^* = 0, \quad (5.25)$$

$$q \left(\frac{2}{d} \tilde{a} P_{xy}^* + \tilde{\zeta} \right) \tilde{a} \frac{\partial P_{yy}^*}{\partial \tilde{a}} + \left(1 - \frac{2}{d} \tilde{a} P_{xy}^* \right) P_{yy}^* = 1. \quad (5.26)$$

En el límite de gradiente de velocidad pequeño, es de esperar por razones físicas que $-P_{xy}^* \propto \tilde{a}$ y $1 - P_{yy}^* \propto \tilde{a}^2$. A partir de las ecuaciones (5.25) y (5.26) obtenemos que en dicho límite

$$P_{xy}^* \rightarrow -\frac{\tilde{a}}{1 + q\tilde{\zeta}}, \quad (5.27)$$

$$1 - P_{yy}^* \rightarrow \frac{2}{d} \frac{\tilde{a}^2}{(1 + q\tilde{\zeta})(1 + 2q\tilde{\zeta})}. \quad (5.28)$$

La ecuación (5.27) proporciona la viscosidad tangencial de Navier–Stokes, mientras que la ecuación (5.28) da un coeficiente de Burnett, ambos funciones de q . En el límite opuesto de gradientes de velocidad grandes, las ecuaciones (5.25) y (5.26) se comportan como

$$P_{xy}^* \rightarrow -A_{xy} \tilde{a}^{-1/3}, \quad A_{xy} = \left[\frac{4}{d^2} \left(1 + \frac{q}{3} \right) \left(1 + \frac{2q}{3} \right) \right]^{-1/3}, \quad (5.29)$$

$$P_{yy}^* \rightarrow A_{yy} \tilde{a}^{-1/3}, \quad A_{yy} = \left[\frac{d}{2} \left(1 + \frac{q}{3} \right) \left(1 + \frac{2q}{3} \right)^{-2} \right]^{1/3}. \quad (5.30)$$

El sistema de dos ecuaciones diferenciales acopladas no lineales (5.25) y (5.26) tiene que ser resuelto de forma general con unas condiciones iniciales dadas, describiendo la solución tanto el régimen cinético como el hidrodinámico. Con la finalidad de aislar la solución hidrodinámica, debemos aplicar las condiciones de contorno apropiadas (5.27) y (5.28) en $\tilde{a} \rightarrow 0$ (y obtener entonces la rama correspondiente a $\tilde{a} < \tilde{a}_s$) y (5.29) y (5.30) en $\tilde{a} \rightarrow \infty$ (y obtener entonces la rama correspondiente a $\tilde{a} > \tilde{a}_s$). Sin embargo, incluso en esos casos debemos resolver numéricamente las ecuaciones diferenciales (5.25) y (5.26). Dado que estamos interesados en obtener una solución explícita (aunque aproximada), formalmente tomamos q como un parámetro pequeño y perturbamos alrededor de $q = 0$,

$$P^*(\tilde{a}) = P^{*(0)}(\tilde{a}) + qP^{*(1)}(\tilde{a}) + \dots, \quad (5.31)$$

donde $P^{*(0)}(\tilde{a})$ viene dado por las ecuaciones (5.21) y (5.22). Sustituyendo (5.31) en las ecuaciones (5.25) y (5.26) y despreciando los términos de orden q^2 y superior, obtenemos

$$(\tilde{\zeta} - 2\gamma) \tilde{a} \frac{\partial P_{xy}^{*(0)}}{\partial \tilde{a}} + \tilde{a} P_{yy}^{*(1)} + (1 + 4\gamma) P_{xy}^{*(1)} = 0, \quad (5.32)$$

$$(\tilde{\zeta} - 2\gamma) \tilde{a} \frac{\partial P_{yy}^{*(0)}}{\partial \tilde{a}} + (1 + 2\gamma) P_{yy}^{*(1)} - 2 \frac{\gamma(1 + 2\gamma)}{\tilde{a}} P_{xy}^{*(1)} = 0. \quad (5.33)$$

La solución a estas ecuaciones es

$$P_{xy}^{*(1)} = \tilde{a} (\tilde{\zeta} - 2\gamma) \frac{1 - 6\gamma}{(1 + 2\gamma)^2 (1 + 6\gamma)^2}, \quad (5.34)$$

$$P_{yy}^{*(1)} = 6 (\tilde{\zeta} - 2\gamma) \frac{\gamma}{(1 + 2\gamma)(1 + 6\gamma)^2}, \quad (5.35)$$

donde se han utilizado las relaciones

$$\frac{\partial \gamma}{\partial \tilde{a}} = \frac{2\tilde{a}}{d} \frac{1}{(1 + 2\gamma)(1 + 6\gamma)}, \quad (5.36)$$

$$\frac{\partial P_{xy}^{*(0)}}{\partial \tilde{a}} = - \frac{1 - 2\gamma}{(1 + 2\gamma)^2 (1 + 6\gamma)}, \quad (5.37)$$

$$\frac{\partial P_{yy}^{*(0)}}{\partial \tilde{a}} = - \frac{4\tilde{a}}{d} \frac{1}{(1 + 2\gamma)^3 (1 + 6\gamma)}. \quad (5.38)$$

En resumen, la solución *hidrodinámica* de las ecuaciones (5.25) y (5.26), a primer orden en q , es

$$P_{xy}^* = - \frac{\tilde{a}}{(1 + 2\gamma)^2} \left[1 - q (\tilde{\zeta} - 2\gamma) \frac{1 - 6\gamma}{(1 + 6\gamma)^2} \right] + \dots, \quad (5.39)$$

$$P_{yy}^* = 1 - \frac{2}{d} \frac{\tilde{a}^2}{(1 + 2\gamma)^3} \left[1 - 3q \frac{\tilde{\zeta} - 2\gamma}{(1 + 6\gamma)^2} \right] + \dots. \quad (5.40)$$

En principio, es posible continuar el proceso y obtener los términos de órdenes q^2 , q^3 , \dots . No obstante, para nuestros propósitos es suficiente con retener los términos lineales únicamente y construir los aproximantes de Padé para satisfacer los comportamientos (5.27) y (5.28) (gradiente de velocidad pequeño). Con esta aproximación obtenemos las expresiones,

$$P_{xy}^*(\tilde{a}) = -\frac{\tilde{a}}{[1+2\gamma(\tilde{a})]^2} \left\{ 1 + q \left[\tilde{\zeta} - 2\gamma(\tilde{a}) \right] \frac{1-6\gamma(\tilde{a})}{[1+6\gamma(\tilde{a})]^2} \right\}^{-1}, \quad (5.41)$$

$$P_{yy}^*(\tilde{a}) = 1 - \frac{2}{d} \frac{\tilde{a}^2}{[1+2\gamma(\tilde{a})]^3} \left\{ 1 + q \frac{\tilde{\zeta} - 2\gamma(\tilde{a})}{[1+6\gamma(\tilde{a})]^2} \right\}^{-1} \left\{ 1 + 2q \frac{\tilde{\zeta} - 2\gamma(\tilde{a})}{[1+6\gamma(\tilde{a})]^2} \right\}^{-1}. \quad (5.42)$$

La solución aproximada (5.41) y (5.42) del modelo cinético puede ser reescrita en términos de la viscosidad tangencial (reducida) no lineal y de la primera función viscométrica (reducida) como

$$\begin{aligned} \eta^*(a^*) &= \frac{1}{\beta [1+2\gamma(a^*/\beta)]^2} \left\{ 1 + \frac{1}{2} [\zeta_0^*/\beta - 2\gamma(a^*/\beta)] \right. \\ &\quad \left. \times \frac{1-6\gamma(a^*/\beta)}{[1+6\gamma(a^*/\beta)]^2} \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (5.43)$$

$$\begin{aligned} \Psi_1(a^*) &= -\frac{2}{\beta^2 [1+2\gamma(a^*/\beta)]^3} \left\{ 1 + \frac{\zeta_0^*/\beta - 2\gamma(a^*/\beta)}{2[1+6\gamma(a^*/\beta)]^2} \right\}^{-1} \\ &\quad \times \left\{ 1 + \frac{\zeta_0^*/\beta - 2\gamma(a^*/\beta)}{[1+6\gamma(a^*/\beta)]^2} \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (5.44)$$

donde hemos tomado $q = \frac{1}{2}$, hemos pasado de $(\tilde{a}, \tilde{\zeta})$ a (a^*, ζ_0^*) y en la ecuación (5.44) hemos tenido en cuenta que $P_{yy}^* = P_{zz}^* = \dots = P_{dd}^*$, con lo cual $P_{xx}^* = d - (d-1)P_{yy}^*$. Hemos comprobado que, al menos para $\alpha \geq 0.5$, el modelo reológico simplificado constituido por las ecuaciones (5.43) y (5.44) proporciona valores que están en muy buen acuerdo con los obtenidos a partir de la solución numérica de las ecuaciones (2.88)–(2.90).

5.3. Simulaciones de Monte Carlo

Con la finalidad de comprobar de modo cuidadoso si el régimen hidrodinámico (5.3) existe o no, hemos resuelto la ecuación de Boltzmann (5.2) haciendo uso

para ello del método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC) (Bird, 1994). Los parámetros de las simulaciones son los mismos que los del capítulo 4, con la salvedad que ahora los resultados son promediados sobre 100 realizaciones independientes para mejorar la estadística. Los valores del coeficiente de restitución considerados han sido $\alpha = 0.5, 0.7$ y 0.9 . Para cada valor de α , se han tomado cuatro valores diferentes del gradiente de velocidad: $a = 0.01/\tau^0$, $a = 0.1/\tau^0$, $a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$, donde τ^0 es el tiempo característico inicial y T^0 la temperatura inicial [ver ecuación (4.27)]. Los dos valores primeros del gradiente de velocidad ($a = 0.01/\tau^0$ y $a = 0.1/\tau^0$) son lo suficientemente pequeños para corresponder a casos de enfriamiento, incluso para el sistema menos inelástico ($\alpha = 0.9$), mientras que los otros dos valores ($a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$) son lo suficientemente grandes para representar casos de calentamiento, incluso para el sistema más inelástico ($\alpha = 0.5$). Para cada uno de los doce pares (α, a) , se han tomado cinco condiciones iniciales diferentes, de modo que en total se han simulado sesenta estados independientes. La primera condición inicial (que denotaremos por A) está representada por la función de distribución de velocidades correspondiente a la aproximación de equilibrio local (4.17), es decir,

$$f^0(\mathbf{V}) = n \left(m/2\pi T^0 \right)^{3/2} e^{-mV^2/2T^0}. \quad (5.45)$$

Las otras cuatro condiciones iniciales presentan la forma altamente anisotrópica

$$f^0(\mathbf{V}) = \frac{n}{2} \left(\frac{m}{2\pi T^0} \right)^{1/2} e^{-mV_z^2/2T^0} [\delta(V_x - V^0 \cos \phi) \delta(V_y + V^0 \sin \phi) + \delta(V_x + V^0 \cos \phi) \delta(V_y - V^0 \sin \phi)], \quad (5.46)$$

donde $V^0 \equiv \sqrt{2T^0/m}$ es la velocidad térmica inicial y $\phi \in [0, \pi]$ es el ángulo que caracteriza cada condición particular y δ es la función delta de Dirac. El tensor de presiones correspondiente a la ecuación (5.46) está dado por $P_{xx}^0 = 2nT^0 \cos^2 \phi$, $P_{yy}^0 = 2nT^0 \sin^2 \phi$, $P_{zz}^0 = nT^0$ y $P_{xy}^0 = -nT^0 \sin 2\phi$. Los cuatro valores de ϕ considerados son $\phi = k\pi/4$ con $k = 0, 1, 2$ y 3 ; denotaremos las respectivas condiciones iniciales del tipo (5.46) como B0, B1, B2 y B3, respectivamente. Observemos que $P_{xy}^0 = 0$ para las condiciones iniciales A, B0 y B2, mientras que $P_{xy}^0 = -nT^0$ en el caso B1. Por otra parte, P_{xy}^0 toma un valor positivo “artificial” ($P_{xy}^0 = nT^0$) cuando el sistema es preparado inicialmente con la condición B3. De acuerdo con la ecuación (5.1), esto significa que durante las primeras colisiones el fluido experimenta un doble efecto de enfriamiento: el enfriamiento disipativo más un enfriamiento artificial debido a $P_{xy} > 0$. Lleva algún tiempo antes que $P_{xy}(t)$ tome un valor negativo “natural” y el efecto de calentamiento viscoso usual compita contra el enfriamiento disipativo.

5.4. Resultados y discusión

Como vimos también en el capítulo 4, la resolución de la ecuación de Boltzmann (5.2) empleando el método DSMC nos permite seguir la evolución temporal de los momentos de la velocidad, tales como la temperatura granular $T(t)$ y el tensor de presiones $P(t)$, así como la propia función de distribución de velocidades $f(\mathbf{V}, t)$. En particular, podemos analizar la evolución temporal del gradiente de velocidad reducido $a^*(t) = a\tau_\eta(T(t))$ (el cual decrece en los estados de calentamiento y aumenta en los estados de enfriamiento) y de la viscosidad tangencial reducida $\eta^*(t) = -P_{xy}(t)/nT(t)a^*(t)$. Una representación paramétrica de $\eta^*(t)$ frente a $a^*(t)$ semejante a la de la figura 4.10 es muy útil para comprobar el establecimiento de un régimen hidrodinámico en el cual $\eta^*(t) \rightarrow \eta^*(a^*(t))$, donde la función $\eta^*(a^*)$ debe ser independiente de las condiciones iniciales. Lo mismo debe suceder para una representación paramétrica de las funciones viscométricas $\Psi_1(t)$ y $\Psi_2(t)$ frente a $a^*(t)$. Esta representación paramétrica se muestra en la figura 5.1 para el gas más inelástico ($\alpha = 0.5$) y para los casos de calentamiento ($a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$). Se han incluido también las curvas correspondientes al modelo teórico (5.43) y (5.44). Está bastante claro que, para cada magnitud, las diez curvas son atraídas hacia una curva universal común la cual, además, resulta estar excelentemente descrita por nuestro modelo simplificado. El panel inferior de la figura 5.1 muestra la evolución temporal (medida por el número acumulado de colisiones por partícula) de $a^*(t)$. Podemos observar que los estados con el efecto de calentamiento más alto ($a = 10/\tau^0$) alcanzan el régimen hidrodinámico después de aproximadamente 1 colisión por partícula solamente, mientras que este periodo de envejecimiento lleva un poco más de tiempo (aproximadamente 2 colisiones por partícula) en los estados con $a = 4/\tau^0$. Una vez que el estado se une a la curva hidrodinámica, se mueve a lo largo de ella hasta que alcanza el estado estacionario, lo que típicamente ocurre después de 10 colisiones por partícula desde el estado inicial. Esto significa que aproximadamente el 80–90 % de la duración (medida por el número de colisiones) de la evolución hacia el estado estacionario corresponde a la etapa hidrodinámica. También es interesante comentar que, para un valor dado de a , el calentamiento más lento tiene lugar para la condición inicial B0, seguida por B3, A y B1, mientras que el calentamiento más rápido corresponde a B2. Esto implica que el estado que comenzó en B0 es el que se une a la curva hidrodinámica para un valor más grande de a^* ($a^* \simeq 7$ y $a^* \simeq 3$ para $a = 10/\tau^0$ y $a = 4/\tau^0$, respectivamente), mientras que el estado que comenzó en B2 lo hace para un valor más pequeño ($a^* \simeq 3$ y $a^* \simeq 1.5$ para $a = 10/\tau^0$ y $a = 4/\tau^0$, respectivamente).

Consideremos ahora los casos $a = 0.01/\tau^0$ y $a = 0.1/\tau^0$. Ahora la evolución temporal está dominada por el enfriamiento disipativo (es decir, la escala de tiempo ζ^{-1} asociada al enfriamiento es más corta que la escala de tiempo $\frac{3}{2}nT/a|P_{xy}|$ asociada al calentamiento viscoso) y de este modo la existencia de un régimen hidrodinámico puede parecer más dudosa que en los casos de calen-

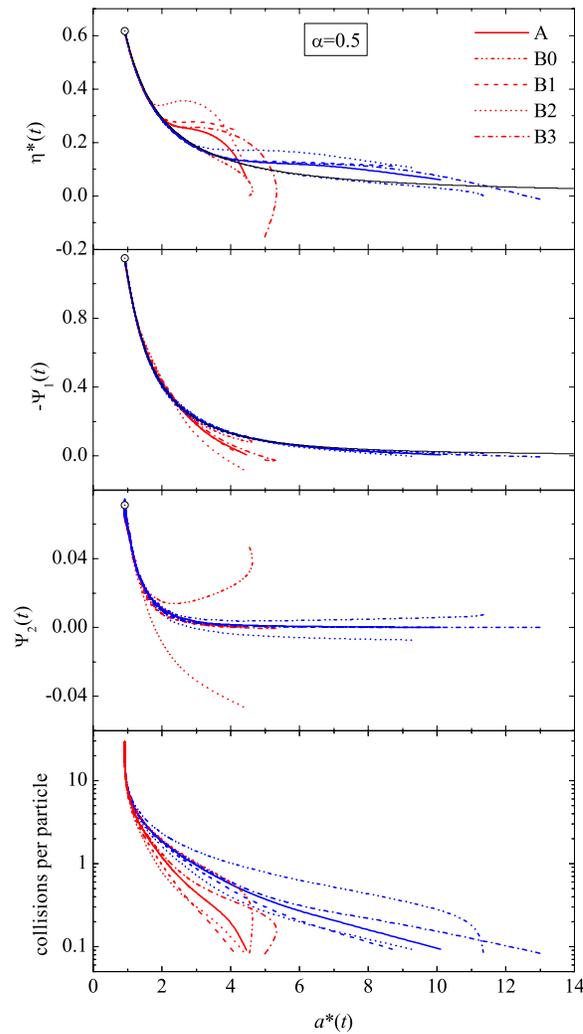


Figura 5.1: Viscosidad tangencial reducida $\eta^*(t)$, funciones viscométricas $-\Psi_1(t)$ y $\Psi_2(t)$, y número de colisiones por partícula frente al gradiente de velocidad reducido $a^*(t)$ para $\alpha = 0.5$ en los dos casos de calentamiento ($a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$). En los tres primeros paneles, el círculo representa el punto correspondiente al estado estacionario (a_s^*, η_s^*), mientras que la línea sólida delgada corresponde a las funciones hidrodinámicas, ecuaciones (5.43) y (5.44), obtenidas a partir de nuestro modelo reológico simplificado. Nótese que en dicho modelo $\Psi_2(t) = 0$.

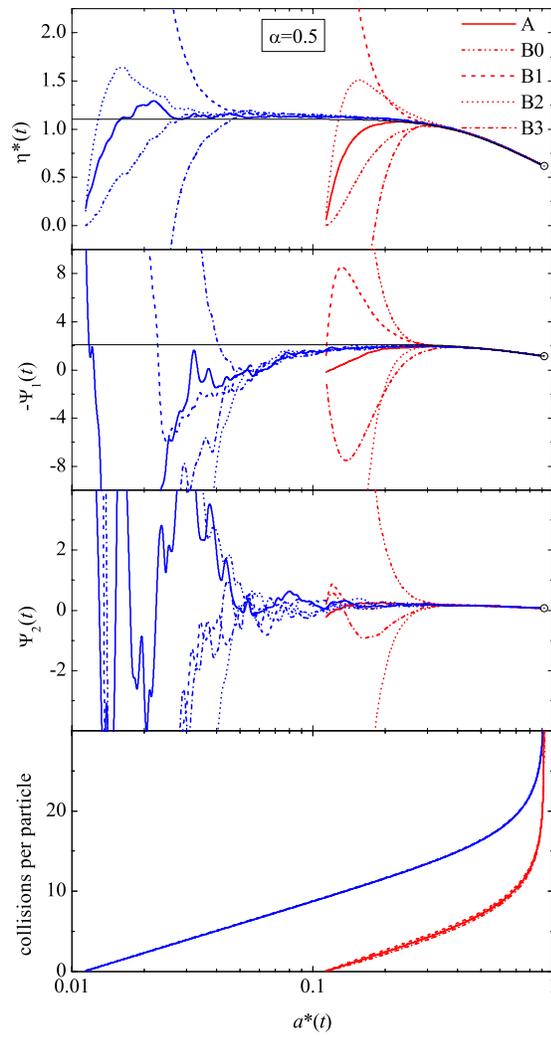


Figura 5.2: Igual que en la figura 5.1, pero para los dos casos de enfriamiento ($a = 0.01/\tau^0$ y $a = 0.1/\tau^0$). Obsérvese la escala logarítmica en los ejes horizontales y la escala lineal en el eje vertical del panel inferior.

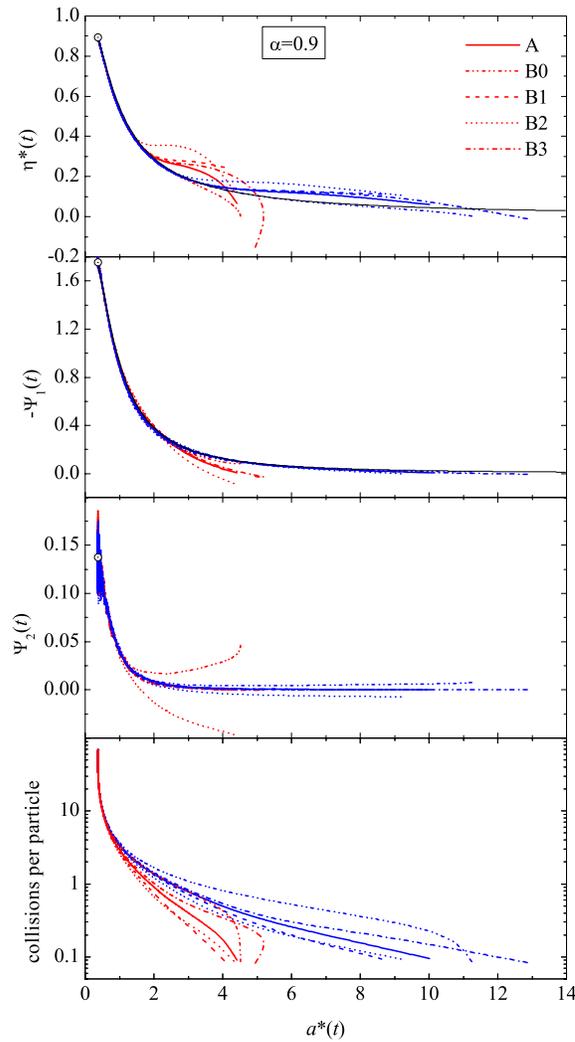


Figura 5.3: Viscosidad tangencial reducida $\eta^*(t)$, funciones viscométricas $-\Psi_1(t)$ y $\Psi_2(t)$, y número de colisiones por partícula frente al gradiente de velocidad reducido $a^*(t)$ para $\alpha = 0.9$ en los dos casos de calentamiento ($a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$). En los tres primeros paneles, el círculo representa el punto correspondiente al estado estacionario (a_s^*, η_s^*), mientras que la línea sólida delgada corresponde a las funciones hidrodinámicas, ecuaciones (5.43) y (5.44), obtenidas a partir de nuestro modelo reológico simplificado. Nótese que en dicho modelo $\Psi_2(t) = 0$.

tamiento. Esto no es así, como se puede concluir de la observación de la figura 5.2. De nuevo, las diez curvas tienden a colapsar hacia una curva común y de nuevo ésta última prácticamente coincide con las predicciones teóricas (5.43) y (5.44), excepto quizá en las proximidades de la región de Navier–Stokes para valores pequeños de a^* . En contraste con los casos de calentamiento representados en la figura 5.1, sin embargo, la evolución temporal de $T(t)$, y por consiguiente, de $a^*(t) \propto T^{-1/2}(t)$ es prácticamente independiente de la condición inicial, especialmente en el caso $a = 0.01/\tau^0$. Esto es una consecuencia del hecho que para estos valores bajos de $a\tau^0$ el término viscoso en la ecuación (5.1) se puede despreciar para tiempos cortos y de este modo la temperatura inicialmente evoluciona como en el caso del estado de enfriamiento homogéneo (disminuyendo casi exponencialmente con el número de colisiones), apenas afectada por los detalles del estado inicial. Para el tiempo en el que el efecto de calentamiento viscoso empieza a ser comparable al de enfriamiento disipativo, se ha alcanzado ya el régimen hidrodinámico. Es importante observar que el número de colisiones necesarias para alcanzar el comportamiento hidrodinámico (aproximadamente 5 y 10 colisiones por partícula para $a = 0.01/\tau^0$ y $a = 0.1/\tau^0$, respectivamente) es mayor en los casos de enfriamiento que en los de calentamiento. Por otro lado, la duración total del periodo de evolución es también mayor que en los casos de calentamiento y de este modo el gas granular permanece en la curva hidrodinámica la mayor parte del tiempo de evolución. La duración de la etapa transitoria cinética en los casos de enfriamiento (en torno a 5–10 colisiones por partícula) es consistente con la que se ha observado en simulaciones de dinámica molecular del estado de enfriamiento homogéneo (Dahl et al., 2002).

Hemos observado comportamientos similares a los de las figuras 5.1 y 5.2 para las otras inelasticidades ($\alpha = 0.7$ y $\alpha = 0.9$). Como ilustración, la figura 5.3 presenta los casos de calentamiento para $\alpha = 0.9$. Mientras que el número de colisiones que el sistema necesita para olvidar el estado inicial es prácticamente independiente de α , la duración total del periodo de evolución tiende a aumentar con α , especialmente en los casos de enfriamiento (Astillero and Santos, 2007b). Esto quiere decir que cuanto más elástico es el sistema, más pequeña es la fracción de tiempo que el sistema pasa en la etapa cinética previa a la etapa hidrodinámica.

Las partes hidrodinámicas comunes de las funciones $\eta^*(a^*)$, $-\Psi_1^*(a^*)$ y $\Psi_2^*(a^*)$ para los diez casos de calentamiento y para los diez casos de enfriamiento se han representado en la figura 5.4 para cada una de las tres inelasticidades consideradas. Esto corresponde a las ventanas de gradiente de velocidad $0.4 \leq a^* \leq 1.3$, $0.3 \leq a^* \leq 1.3$ y $0.2 \leq a^* \leq 1.2$ para $\alpha = 0.5, 0.7$ y 0.9 , respectivamente. El grado de solapamiento de las curvas es excelente, aunque las fluctuaciones estadísticas son más importantes para $-\Psi_1^*(a^*)$ y $\Psi_2^*(a^*)$ que para $\eta^*(a^*)$, especialmente en la rama de enfriamiento de las curvas. Está claro que nuestro modelo simplificado, ecuaciones (5.43) y (5.44), describe razonablemente bien las propiedades reológicas de un gas granular en condiciones de flujo tangencial uniforme, excepto en el caso de la segunda función viscométrica, en cuyo caso

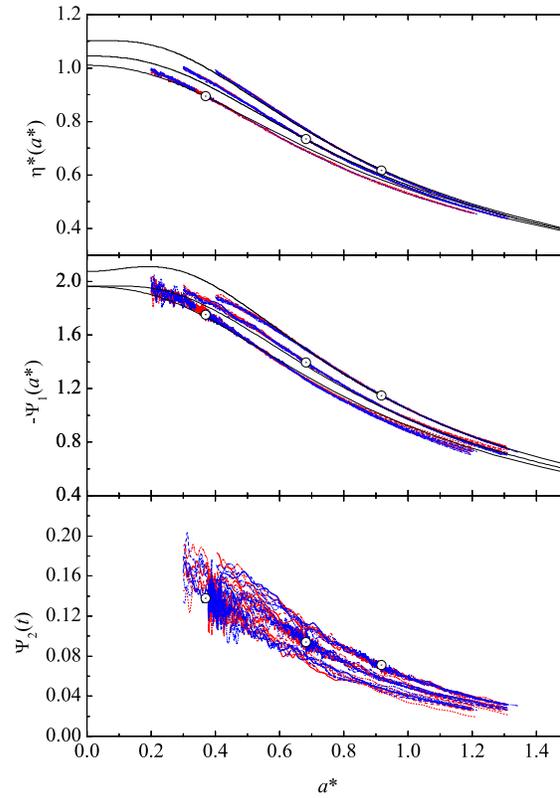


Figura 5.4: Viscosidad tangencial reducida $\eta^*(a^*)$ y funciones viscométricas $-\Psi_1(a^*)$ y $\Psi_2(a^*)$ correspondientes a la parte hidrodinámica de la evolución hacia el estado estacionario (representado por un círculo) para, de arriba abajo, $\alpha = 0.5, 0.7$ y 0.9 . Las líneas sólidas delgadas corresponden a las funciones hidrodinámicas, ecuaciones (5.43) y (5.44), obtenidas a partir de nuestro modelo teórico simplificado. Nótese que en dicho modelo $\Psi_2(a^*) = 0$.

el modelo predice $\Psi_2(a^*) = 0$.

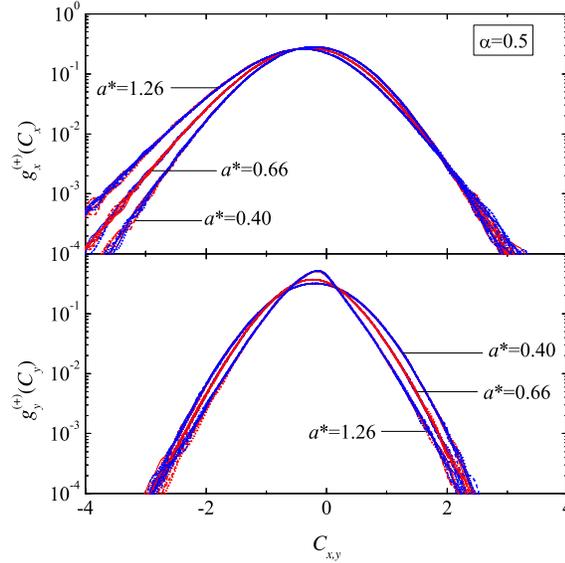


Figura 5.5: Funciones de distribución de velocidades marginales $g_x^{(+)}(C_x)$ y $g_y^{(+)}(C_y)$ para $\alpha = 0.5$ y $a^* = 0.40, 0.66$ y 1.26 .

Las figuras 5.1–5.4 confirman la ecuación (5.4), es decir, la existencia de funciones reológicas hidrodinámicas bien definidas $P^*(a^*)$ actuando como atractores en la evolución del tensor de presiones $P(t|f^0)$, independientemente de la preparación inicial f^0 . De hecho, esto proporciona un apoyo indirecto a la afirmación más fuerte referida a la función de distribución, ecuación (5.3). Para comprobarlo de un modo directo, hemos considerado las funciones de distribución de velocidades marginales $g_x^{(+)}(C_x; a^*)$, $g_y^{(+)}(C_y; a^*)$ y $F(C; a^*)$ definidas por las ecuaciones (4.23)–(4.25), para $\alpha = 0.5$ y tres valores de a^* que, de acuerdo con las figuras 5.1–5.4, se encuentran dentro del rango hidrodinámico, a saber $a^* = 0.40, 0.66$ (rama de enfriamiento) y 1.26 (rama de calentamiento). Los resultados se presentan en las figuras 5.5 y 5.6, que muestran un solapamiento excelente de las diez curvas para cada valor de a^* , aunque obviamente en las colas de la distribución existen fluctuaciones estadísticas más grandes que en la región térmica. Como esperábamos, los rasgos de anisotropía y los efectos de exceso de población de la distribución de velocidades aumentan a medida que el gradiente de velocidad también lo hace. El estado estacionario corresponde a $a_s^* = 0.92$ y por tanto las formas de las distribuciones asociadas (representadas en la figura 4.18 pero, por claridad, no en las figuras 5.5 y 5.6) se encuentran en medio de las correspondientes a $a^* = 0.66$ y las de $a^* = 1.26$.

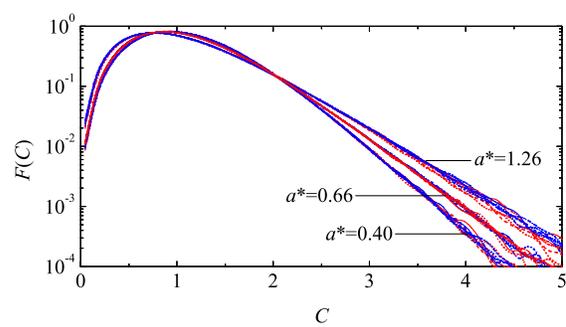


Figura 5.6: Función de distribución marginal $F(C)$ para $\alpha = 0.5$ y $a^* = 0.40$, 0.66 y 1.26.

Capítulo 6

Coeficientes de transporte para mezclas de Maxwell inelásticas

6.1. Introducción

La evaluación de los coeficientes de transporte a partir de la ecuación de Boltzmann para esferas duras inelásticas (“inelastic hard spheres”, IHS) es una tarea bastante compleja. De hecho, para obtener resultados explícitos usualmente se considera el primer orden en un desarrollo en polinomios de Sonine de la función de distribución de velocidades. Estas dificultades se multiplican cuando se consideran sistemas multicomponentes puesto que no sólo es mayor el número de coeficientes de transporte que en el caso de un gas monocomponente sino que, además, éstos son funciones de parámetros tales como la composición, las masas, los tamaños y los coeficientes de restitución. Como sucede en el caso elástico, una posible forma de soslayar parcialmente estos problemas es considerar otros modelos de interacción que simplifiquen la compleja estructura matemática de las integrales de colisión de la ecuación de Boltzmann para IHS. Por esta razón, los conocidos como modelos de Maxwell inelásticos (“inelastic Maxwell models”, IMM) se han utilizado con profusión en los últimos años como un modelo para caracterizar la influencia de la inelasticidad de las colisiones sobre las propiedades físicas de los fluidos granulares. Los IMM comparten con las moléculas de Maxwell elásticas la propiedad que la frecuencia de colisión es independiente de la velocidad pero, por otro lado, sus reglas de colisión son las mismas que para IHS. En este sentido, aunque estos IMM no representan ningún potencial de interacción microscópico, numerosos autores (Bobylev, Carrillo and Gamba, 2000; Carrillo, Cercignani and Gam-

ba, 2000; Ben-Naim and Krapivsky, 2000; Ernst and Brito, 2002*b*; Baldassarri, Marconi and Puglisi, 2002; Krapivsky and Ben-Naim, 2002; Bobylev and Cercignani, 2003; Bobylev, Cercignani and Toscani, 2003; Brito and Ernst, 2003; Garzó and Astillero, 2005) han demostrado que el costo de sacrificar realismo físico es compensado en parte por la cantidad de resultados analíticos exactos obtenidos. Por otro lado, además de su interés académico, hay que resaltar que este modelo (IMM) ha descrito correctamente experimentos recientes (Kohlstedt et al., 2005) con granos magnéticos con interacciones dipolares en aire y considerando una geometría bidimensional. De este modo, el excelente acuerdo encontrado entre los experimentos con partículas magnéticas (Kohlstedt et al., 2005) y los modelos de Maxwell sugiere que podemos considerar estas partículas magnéticas como un banco de pruebas ideal para comprobar las predicciones teóricas de estos modelos.

La mayor parte de los estudios efectuados considerando IMM se han dedicado a estados homogéneos, especialmente al análisis de los excesos de población en las colas de energía alta (Ernst and Brito, 2002*b*; Krapivsky and Ben-Naim, 2002; Bobylev and Cercignani, 2003; Bobylev, Cercignani and Toscani, 2003; Ernst and Brito, 2002*a*; Santos and Ernst, 2003). No obstante, en el caso de situaciones *inhomogéneas* se conoce mucho menos y, más específicamente, sobre la dependencia de los coeficientes de transporte del grado de disipación. En el caso de un gas granular monocomponente en condiciones de flujo tangencial uniforme, los IMM se han usado para calcular las propiedades reológicas (tensiones tangenciales y normales) en tres dimensiones (Cercignani, 2001). Más recientemente, este estudio se ha extendido (Garzó, 2003) a sistemas multicomponentes, donde los resultados exactos obtenidos con IMM han mostrado un acuerdo excelente con los obtenidos analíticamente para IHS en la primera aproximación de Sonine (Montanero and Garzó, 2002*b*) y con los obtenidos mediante simulaciones de Monte Carlo (Montanero and Garzó, 2002*b*; Montanero and Garzó, 2003*a*). Todos estos resultados están restringidos a problemas de flujo tangencial uniforme en el estado estacionario sin ninguna limitación en la intensidad del gradiente de velocidad. Para problemas inhomogéneos generales y en el caso de un gas monocomponente, se ha resuelto la ecuación de Boltzmann para IMM (Santos, 2003) haciendo uso del método de Chapman–Enskog (Chapman and Cowling, 1970) para estados próximos al estado de enfriamiento (local) homogéneo. Se han obtenido expresiones explícitas de los coeficientes de transporte de IMM (orden de Navier–Stokes) en d dimensiones para sistemas sin fuerzas externas así como para sistemas forzados por termostatos. En contraste con los resultados obtenidos en la referencia (Garzó, 2003), la comparación con los coeficientes de transporte de IHS (Brey et al., 1998; Garzó and Montanero, 2002) muestra que la dependencia de éstos de la inelasticidad es capturada por los coeficientes de transporte de IMM solamente de forma cualitativa.

El objetivo de este capítulo es obtener las ecuaciones hidrodinámicas de una mezcla binaria d -dimensional de gases de Maxwell inelásticos diluidos. De forma semejante al caso del gas monocomponente (Santos, 2003), obtendremos una

solución *normal* del sistema de ecuaciones de Boltzmann acopladas de las dos especies, utilizando el método estándar de Chapman–Enskog (Chapman and Cowling, 1970) convenientemente generalizado al caso de colisiones inelásticas. En el primer orden de los gradientes espaciales de los campos hidrodinámicos, se determinarán las correspondientes ecuaciones hidrodinámicas de Navier–Stokes con expresiones explícitas de los coeficientes de transporte relevantes de la mezcla. Para mezclas de fluidos moleculares, el conjunto específico de gradientes que contribuyen a cada flujo está restringido por la simetría del fluido, la invariancia bajo inversión temporal (relaciones de Onsager) y la producción de entropía (de Groot and Mazur, 1984). Sin embargo, en el caso de colisiones inelásticas, solamente se verifica la condición de simetría del fluido, y por tanto, existe una flexibilidad mayor a la hora de representar los flujos e identificar los correspondientes coeficientes de transporte. En el caso del tensor de presiones, consideraciones relativas a la simetría del fluido implican que su forma, a primer orden en los gradientes, sea la misma que en el caso del gas monocomponente. En los casos de los flujos de masa y calor, se pueden utilizar varias elecciones diferentes (pero equivalentes) de los campos hidrodinámicos y se debe tener cierto cuidado cuando se comparen los coeficientes de transporte provenientes de representaciones diferentes. Como sucede en el caso de IHS (Garzó and Dufty, 2002; Garzó and Montanero, 2007a; Garzó and Montanero, 2007b), en este estudio utilizaremos los gradientes de la fracción molar, la presión (hidrostática), la temperatura y la velocidad media del fluido como los gradientes independientes del sistema. Como consecuencia, en esta representación hay siete coeficientes de transporte independientes: los coeficientes de autodifusión, de presión difusión y de difusión térmica asociados al flujo de masa, la viscosidad tangencial correspondiente al tensor de presiones y el coeficiente de Dufour, la conductividad térmica y el coeficiente de energía–presión asociados al flujo de calor. Todos estos coeficientes se dan en términos de los coeficientes de restitución así como de los cocientes de concentraciones, masas y tamaños de las partículas. Además, al igual que en el estudio previo para IHS (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b), nuestra teoría tiene en cuenta el efecto de las diferencias de temperatura (ruptura del teorema de equipartición de la energía) en los coeficientes de transporte, lo cual origina dependencias adicionales de éstos de la concentración.

6.2. Modelos de Maxwell inelásticos para una mezcla binaria granular

Consideremos una mezcla binaria de gases de Maxwell inelásticos diluidos. La ecuación de Boltzmann para IMM (Ben-Naim and Krapivsky, 2000; Ernst and Brito, 2002b; Ernst and Brito, 2002a; Ben-Naim and Krapivsky, 2002) se puede obtener a partir de la ecuación de Boltzmann (3.9) para IHS reemplazando la frecuencia de colisión entre partículas de las especies i y j por una frecuencia de

colisión promedio independiente de la velocidad, la cual es proporcional a la raíz cuadrada de la temperatura “granular” T . Con esta simplificación, en ausencia de fuerzas externas las funciones de distribución de velocidades $f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t)$ ($i = 1, 2$) de cada especie satisfacen el siguiente sistema de ecuaciones acopladas de Boltzmann:

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) = \sum_j J_{ij}[\mathbf{v}|f_i(t), f_j(t)] , \quad (6.1)$$

donde el operador de colisión de Boltzmann $J_{ij}[\mathbf{v}|f_i, f_j]$ está dado por

$$\begin{aligned} J_{ij}[\mathbf{v}_1|f_i, f_j] &= \frac{\omega_{ij}(\mathbf{r}, t; \alpha_{ij})}{n_j(\mathbf{r}, t)\Omega_d} \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ &\times [\alpha_{ij}^{-1} f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1'', t) f_j(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2'', t) - f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) f_j(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t)] \end{aligned} \quad (6.2)$$

En la ecuación (6.2), $\omega_{ij} \neq \omega_{ji}$ es una frecuencia de colisión efectiva (a ser determinada posteriormente) para colisiones del tipo i - j , Ω_d es el ángulo sólido total en d dimensiones [ver ecuación (2.25)]. Las reglas de colisión pos y precolisionales están dadas por las ecuaciones (3.1) y (3.2), con μ_{ij} dado por (3.3). Las frecuencias de colisión ω_{ij} se pueden ver como parámetros libres del modelo. Su dependencia de los coeficientes de restitución α_{ij} puede ser escogida para optimizar el acuerdo con los resultados obtenidos a partir de la ecuación de Boltzmann para IHS. Por supuesto, la elección no es única y puede depender de la propiedad de interés. En el caso monocomponente, la ecuación (6.2) se reduce a la ecuación (3.54) si $\omega_{ij} \rightarrow (d+2)\nu_0/2$, donde ν_0 está definida por la ecuación (2.27).

Existe otra versión más refinada del modelo IMM (Bobylev, Carrillo and Gamba, 2000; Carrillo, Cercignani and Gamba, 2000; Bobylev and Cercignani, 2002) donde la frecuencia de colisión tiene la misma dependencia del producto escalar ($\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{g}}_{12}$) que en el caso de esferas duras. No obstante, ambas versiones de IMM conducen a resultados similares en problemas tan delicados como las colas de energía alta (Ernst and Brito, 2002b). Por tanto, en aras de la simplicidad, aquí consideraremos la versión dada por las ecuaciones (3.1), (3.2) y (6.2).

Los campos hidrodinámicos relevantes en una mezcla binaria son las densidades numéricas n_i , la velocidad media del fluido \mathbf{u} y la temperatura granular T . Están definidas en términos de la distribución f_i por las ecuaciones (3.5), (3.7) y (3.8), respectivamente. Además, la segunda igualdad en la ecuación (3.8) define las temperaturas cinéticas T_i de cada especie, que miden sus energías cinéticas medias.

Los operadores de colisión conservan el número de partículas de cada especie y la cantidad de movimiento total, pero no la energía total [ver ecuaciones (3.11),

(3.13) y (3.14)], donde ζ es identificado como la tasa de enfriamiento debida a las colisiones inelásticas entre todas las especies. A un nivel cinético, es conveniente introducir las “tasas de enfriamiento” ζ_i correspondientes a las temperaturas parciales T_i . Están definidas por

$$\zeta_i = -\frac{m_i}{dn_i T_i} \sum_j \int d\mathbf{v} V^2 J_{ij}[\mathbf{v}|f_i, f_j]. \quad (6.3)$$

La tasa de enfriamiento total ζ se puede escribir como una media ponderada de las tasas de enfriamiento parciales ζ_i en la forma

$$\zeta = T^{-1} \sum_i x_i T_i \zeta_i, \quad (6.4)$$

donde $x_i = n_i/n$ es la fracción molar de la especie i .

A partir de las ecuaciones (3.5)–(3.14), se pueden obtener las ecuaciones de balance macroscópico para la mezcla binaria. Están dadas por

$$D_t n_i + n_i \nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{\nabla \cdot \mathbf{j}_i}{m_i} = 0, \quad (6.5)$$

$$D_t \mathbf{u} + \rho^{-1} \nabla \cdot \mathbf{P} = 0, \quad (6.6)$$

$$D_t T - \frac{T}{n} \sum_i \frac{\nabla \cdot \mathbf{j}_i}{m_i} + \frac{2}{dn} (\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{P} : \nabla \mathbf{u}) = -\zeta T. \quad (6.7)$$

A partir de las ecuaciones (6.5) y (6.7) se pueden obtener también las ecuaciones de balance para la fracción molar x_1 y la presión $p = nT$:

$$D_t x_1 + \frac{\rho}{n^2 m_1 m_2} \nabla \cdot \mathbf{j}_1 = 0, \quad (6.8)$$

$$D_t p + p \nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{2}{dn} (\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{P} : \nabla \mathbf{u}) = -\zeta T. \quad (6.9)$$

En las ecuaciones anteriores,

$$\mathbf{j}_i = m_i \int d\mathbf{v} \mathbf{V} f_i(\mathbf{v}) \quad (6.10)$$

es el flujo de masa para la especie i relativo al flujo local,

$$\mathbf{P} = \sum_i \int d\mathbf{v} m_i \mathbf{V} \mathbf{V} f_i(\mathbf{v}) \quad (6.11)$$

es el tensor de presiones total, y

$$\mathbf{q} = \sum_i \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} m_i V^2 \mathbf{V} f_i(\mathbf{v}) \quad (6.12)$$

es el flujo de calor total. Nótese que $\mathbf{j}_1 = -\mathbf{j}_2$. Las ecuaciones de balance (6.5)–(6.7) generalizan las ecuaciones (2.6)–(2.8) del caso monocomponente y son válidas con independencia de los detalles del modelo considerado para las colisiones inelásticas. Sin embargo, la influencia del modelo de colisión aparece a través de la dependencia de la tasa de enfriamiento y de los flujos hidrodinámicos de los coeficientes de restitución α_{ij} .

Como sucede en el caso de colisiones elásticas (Garzó and Santos, 2003), la ventaja principal de considerar IMM es que un momento de la velocidad de orden k del operador de colisión de Boltzmann solamente involucra momentos de orden menor o igual a k (Bobylev and Cercignani, 2002). Esto nos permite determinar los momentos colisionales del operador $J_{ij}[f_i, f_j]$ sin el conocimiento explícito de la función de distribución de velocidades. Los primeros momentos del operador de colisión de Boltzmann $J_{ij}[f_i, f_j]$ se evalúan explícitamente en el apéndice A. En particular, de acuerdo con la ecuación (6.3), el segundo momento de $J_{ij}[f_i, f_j]$ nos permite obtener una relación entre las frecuencias de colisión ω_{ij} y las tasas de enfriamiento ζ_i . A partir de la ecuación (A.2), obtenemos

$$\zeta_i = \sum_j \frac{2\omega_{ij}}{d} \mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) \left[1 - \frac{\mu_{ji}}{2} (1 + \alpha_{ij}) \frac{\theta_i + \theta_j}{\theta_j} + \frac{\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) - 1}{d\rho_j p_i} \mathbf{j}_i \cdot \mathbf{j}_j \right], \quad (6.13)$$

donde

$$\theta_i = \frac{m_i}{\gamma_i} \sum_j m_j^{-1}, \quad (6.14)$$

$p_i = n_i T_i$ es la presión parcial de la especie i y $\gamma_i \equiv T_i/T$.

Al objeto de obtener resultados explícitos, necesitamos fijar los parámetros ω_{ij} . La elección más natural para optimizar el acuerdo con los resultados de IHS consiste en ajustar las tasas de enfriamiento ζ_i de IMM, ecuación (6.13), para que coincidan con las encontradas para IHS (Garzó and Dufty, 1999b).

Aunque las tasas de enfriamiento para IHS no se conocen de forma exacta, se puede obtener una buena estimación de éstas considerando la aproximación gaussiana (3.20) para las funciones de distribución de velocidades f_i . En esta aproximación, se obtiene la ecuación (3.22), es decir,

$$\zeta_i^{\text{IHS}} \rightarrow \frac{2\Omega_d}{\sqrt{\pi}d} \sum_j n_j \mu_{ji} \sigma_{ij}^{d-1} v_0 \left(\frac{\theta_i + \theta_j}{\theta_i \theta_j} \right)^{1/2} (1 + \alpha_{ij}) \left[1 - \frac{\mu_{ji}}{2} (1 + \alpha_{ij}) \frac{\theta_i + \theta_j}{\theta_j} \right], \quad (6.15)$$

donde $v_0(t) = \sqrt{2T(m_1 + m_2)/m_1 m_2}$ es una velocidad térmica definida en términos de la temperatura $T(t)$ de la mezcla. De este modo, de acuerdo con la ecuación (6.13), las frecuencias de colisión ω_{ij} están dadas por

$$\omega_{ij} = 4x_j \left(\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_{12}} \right)^{d-1} \left(\frac{\theta_i + \theta_j}{\theta_i \theta_j} \right)^{1/2} \nu_M, \quad (6.16)$$

donde ν_M es una frecuencia de colisión efectiva dada por

$$\nu_M = \frac{\Omega_d}{4\sqrt{\pi}} n \sigma_{12}^{d-1} v_0. \quad (6.17)$$

En la derivación de (6.16) se ha hecho uso del hecho que el flujo de masa \mathbf{j}_i se anula en la aproximación gaussiana (3.20). En lo que sigue, tomaremos la elección (6.16) para ω_{ij} . En el caso de partículas mecánicamente equivalentes ($\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma, m_1 = m_2 = m, \alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_{12} = \alpha$) a la misma temperatura ($T_1 = T_2 = T$) se tiene que $\nu_M = (d+2)\nu_0/8$ y $\omega_{ij} = x_j(d+2)\nu_0/2$.

6.3. Estado de enfriamiento homogéneo

Como paso previo a determinar los coeficientes de transporte de Navier–Stokes a partir del método de Chapman–Enskog (Chapman and Cowling, 1970), necesitamos en primer lugar analizar la solución *homogénea* de la ecuación de Boltzmann (6.1). En este caso (estados espacialmente homogéneos e isótropos), la ecuación de Boltzmann (6.1) viene dada por

$$\partial_t f_i(v; t) = \sum_j J_{ij}[v|f_i, f_j]. \quad (6.18)$$

A partir de la ecuación (6.18), se obtienen las ecuaciones de evolución temporal de T y T_i :

$$\partial_t T = -\zeta T, \quad \partial_t T_i = -\zeta_i T_i. \quad (6.19)$$

La dependencia temporal del cociente de temperaturas $\gamma \equiv T_1(t)/T_2(t)$ se obtiene a partir de la segunda igualdad de la ecuación (6.19):

$$\partial_t \ln \gamma = \zeta_2 - \zeta_1. \quad (6.20)$$

Además, dado que el flujo de masa se anula en el estado homogéneo, la ecuación (6.13) da la relación

$$\zeta_i = \sum_j \frac{2\omega_{ij}}{d} \mu_{ji} (1 + \alpha_{ij}) \left[1 - \frac{\mu_{ji}}{2} (1 + \alpha_{ij}) \frac{\theta_i + \theta_j}{\theta_j} \right], \quad (6.21)$$

donde ω_{ij} viene definido por la ecuación (6.16).

El estado de enfriamiento homogéneo (HCS) está caracterizado por la existencia de una solución *normal* en la cual toda la dependencia temporal de $f_i(v; t)$ es a través de la temperatura global $T(t)$. Consecuentemente, a partir del análisis dimensional se sigue que $f_i(v; t)$ tiene la siguiente forma escalada

$$f_i(v, t) = n_i v_0^{-d}(t) f_i^*(v/v_0(t)), \quad (6.22)$$

donde v_0 es la velocidad térmica previamente introducida. El hecho que la dependencia temporal de $f_i(v; t)$ solamente tenga lugar a través de la temperatura $T(t)$ (que es la relevante desde un punto de vista hidrodinámico) implica que las tres temperaturas $T_1(t)$, $T_2(t)$ y $T(t)$ son proporcionales las unas a las otras y que sus cocientes son todos constantes. Una posibilidad es que las tres temperaturas sean iguales, como en el caso de las colisiones elásticas (Chapman and Cowling, 1970). No obstante, como veremos después, las temperaturas parciales son diferentes en sistemas granulares multicomponentes. Dado que el cociente de temperaturas debe ser independiente del tiempo, la ecuación (6.20) conduce a la igualdad de las tasas de enfriamiento:

$$\zeta_1(t) = \zeta_2(t) = \zeta(t). \quad (6.23)$$

Cuando se introduce la expresión (6.21) en la (6.23), obtenemos una ecuación no lineal cerrada para γ cuya solución numérica proporciona la dependencia del cociente de temperaturas de los parámetros del problema. Excepto para partículas mecánicamente equivalentes ($\sigma_1 = \sigma_2$, $m_1 = m_2$, $\alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_{12} = \alpha$), nuestros resultados muestran que, aunque ambas especies tengan una tasa de

enfriamiento común, sus temperaturas parciales son claramente distintas. Esto implica una ruptura de la equipartición de la energía. La violación de la equipartición de la energía en sistemas granulares multicomponentes (Garzó and Dufty, 1999*b*; Ben-Naim and Krapivsky, 2002; Martin and Piasecki, 1999; Barrat and Trizac, 2002; Marconi and Puglisi, 2002*a*; Marconi and Puglisi, 2002*b*) se ha confirmado también en simulaciones computacionales (Montanero and Garzó, 2002*a*; Dahl et al., 2002; Krouskop and Talbot, 2003; q. Wang, j. Jin and q. Ma, 2003; Brey, Ruiz-Montero and Moreno, 2005; Ferguson and Chakraborty, 2006; Schroter et al., 2006) e incluso observado en experimentos reales en dos (Wildman and Parker, 2002) y tres dimensiones (Feitosa and Menon, 2002). Se debe comentar que el hecho que $T_1(t) \neq T_2(t)$ no quiere decir que existan grados de libertad hidrodinámicos adicionales ya que las temperaturas parciales T_i pueden ser expresadas en términos de la temperatura granular T como

$$T_1(t) = \frac{\gamma}{1 + x_1(\gamma - 1)} T(t), \quad T_2(t) = \frac{1}{1 + x_1(\gamma - 1)} T(t), \quad (6.24)$$

donde $\gamma \equiv T_1/T_2$.

Por tanto, el problema es resolver la ecuación de Boltzmann para distribuciones de la forma (6.22) sujeta a la ligadura (6.23). En términos de la velocidad reducida $v^* = v/v_0$, la ecuación de Boltzmann (6.18) para la distribución reducida f_i^* definida en la ecuación (6.22) se convierte en

$$\frac{1}{2}\zeta^* \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}^*} \cdot (\mathbf{v}^* f_i^*) = \sum_j J_{ij}^*[v^* | f_i^*, f_j^*], \quad (6.25)$$

con $\zeta^* = \zeta/\nu_M$. Además,

$$J_{ij}^*[f_i^*, f_j^*] = \frac{\omega_{ij}^*}{\Omega_d} \int d\mathbf{v}_2^* \int d\hat{\sigma} [\alpha_{ij}^{-1} f_i^*(v_1^{**}) f_j^*(v_2^{**}) - f_i^*(v_1^*) f_j^*(v_2^*)], \quad (6.26)$$

donde $\omega_{ij}^* = \omega_{ij}/\nu_M$. En la ecuación (6.25), hemos tenido en cuenta la dependencia temporal de f_i , la cual implica que

$$\partial_t f_i = -\zeta T \partial_T f_i = \frac{1}{2}\zeta \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{v} f_i). \quad (6.27)$$

Aunque la forma exacta de la distribución f_i^* no se conoce ni incluso en el caso monocomponente, una información indirecta de f_i^* puede inferirse a través del conocimiento de sus momentos. En particular, la desviación de f_i^* respecto de su forma maxwelliana $f_{i,M}^*$ se puede caracterizar haciendo uso del cuarto cumulante

$$c_i = 2 \left[\frac{4}{d(d+2)} \theta_i^2 \langle v^{*4} \rangle_i - 1 \right], \quad (6.28)$$

donde

$$\langle v^{*4} \rangle_i = \int d\mathbf{v}^* v^{*4} f_i^*(v^*). \quad (6.29)$$

$$f_{i,M}^*(v^*) = \pi^{-d/2} \theta_i^{d/2} e^{-\theta_i v^{*2}}. \quad (6.30)$$

Para calcular el cuarto momento de la velocidad, multiplicamos los dos miembros de la ecuación de Boltzmann (6.25) por v^{*4} e integramos para la velocidad. El resultado es

$$-2\zeta^* \langle v^{*4} \rangle_i = \sum_j \int d\mathbf{v}^* v^{*4} J_{ij}^*[v^* | f_i^*, f_j^*]. \quad (6.31)$$

El momento colisional que aparece en la parte derecha de la ecuación (6.31) se ha evaluado en el apéndice A con el resultado

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{v}^* v^{*4} J_{ij}^*[f_i^*, f_j^*] &= \frac{\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})}{d(d+2)} \omega_{ij}^* \{ 3\mu_{ji}^3(1 + \alpha_{ij})^3 \langle v^{*4} \rangle_j \\ &\quad + [2d + 3\mu_{ji}^2(1 + \alpha_{ij})^2 - 6\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) + 4] \\ &\quad \times [\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) - 2] \langle v^{*4} \rangle_i \\ &\quad + \frac{d(d+2)}{4} \mu_{ji} \theta_i^{-1} \theta_j^{-1} (1 + \alpha_{ij}) \\ &\quad \times [2d + 4 - 12\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) \\ &\quad + 6\mu_{ji}^2(1 + \alpha_{ij})^2] \}. \end{aligned} \quad (6.32)$$

La sustitución de la ecuación (6.32) en la ecuación (6.31) conduce a un sistema de ecuaciones lineales acopladas para $\langle v^{*4} \rangle_1$ y $\langle v^{*4} \rangle_2$ (o equivalentemente, para los cumulantes c_1 y c_2). La resolución de este sistema da c_1 y c_2 en función del espacio de parámetros del problema. En el caso unidimensional ($d = 1$), nuestros resultados se reducen a los obtenidos previamente por (Marconi and Puglisi, 2002a) a partir del denominado modelo escalar de Maxwell (es decir, tomando $\omega_{ij} \propto n_j$). Además, para partículas mecánicamente equivalentes ($\sigma_1 = \sigma_2$, $m_1 = m_2$, $\alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_{12} = \alpha$), son recuperados los resultados obtenidos por (Santos, 2003) en el caso del gas monocomponente, a saber, $\gamma = 1$ y

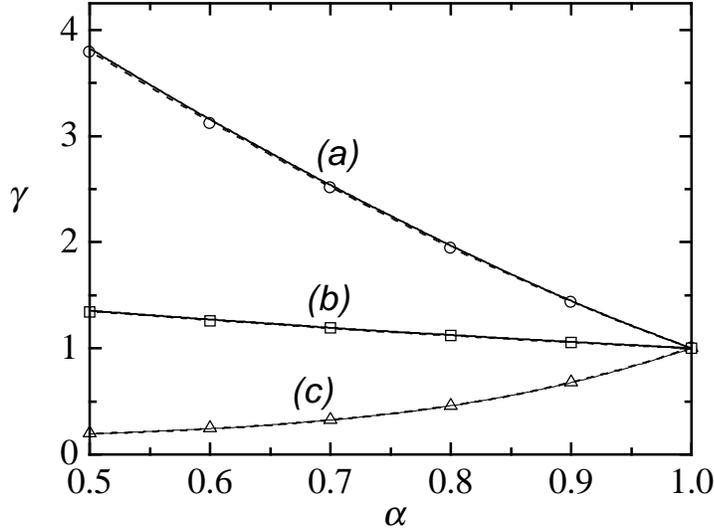


Figura 6.1: Representación del cociente de temperaturas $\gamma = T_1/T_2$ frente al coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ para $d = 3$, $x_1 = \frac{2}{3}$, $\sigma_1/\sigma_2 = 1$ y tres valores diferentes del cociente de masas m_1/m_2 : (a) $m_1/m_2 = 10$ (círculos), (b) $m_1/m_2 = 2$ (cuadrados) y (c) $m_1/m_2 = 0.1$ (triángulos). Las líneas sólidas representan los resultados obtenidos aquí para IMM, las líneas segmentadas son los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 1999b) y los símbolos corresponden a resultados de simulaciones de Monte Carlo para IHS (Montanero and Garzó, 2002a).

$$c \equiv c_1 = c_2 = \frac{12(1 - \alpha)^2}{4d - 7 + 3\alpha(2 - \alpha)}. \quad (6.33)$$

Nótese que el coeficiente $c = 2a_2^{\text{hc}}$, donde a_2^{hc} viene expresado por la ecuación (3.57).

Una presentación completa de los resultados es complicada debido al elevado número de parámetros que intervienen en el problema: α_{11} , α_{12} , α_{22} , m_1/m_2 , x_1 y σ_1/σ_2 . Por concretar, de aquí en adelante vamos a considerar el caso $\alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha_{12} \equiv \alpha$. En la figura 6.1 mostramos la dependencia de γ de α en el caso tridimensional para $x_1 = \frac{2}{3}$, $\sigma_1/\sigma_2 = 1$ y tres valores diferentes del cociente de masas m_1/m_2 . Incluimos los resultados analíticos obtenidos para IMM y para IHS (Garzó and Dufty, 1999b), así como los resultados (símbolos) obtenidos (Montanero and Garzó, 2002a) mediante la resolución numérica de la ecuación de Boltzmann a partir del método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC) (Bird, 1994). Es evidente que los resultados analíticos para IMM y para IHS son prácticamente indistinguibles sobre el rango de valores de α considerado y que

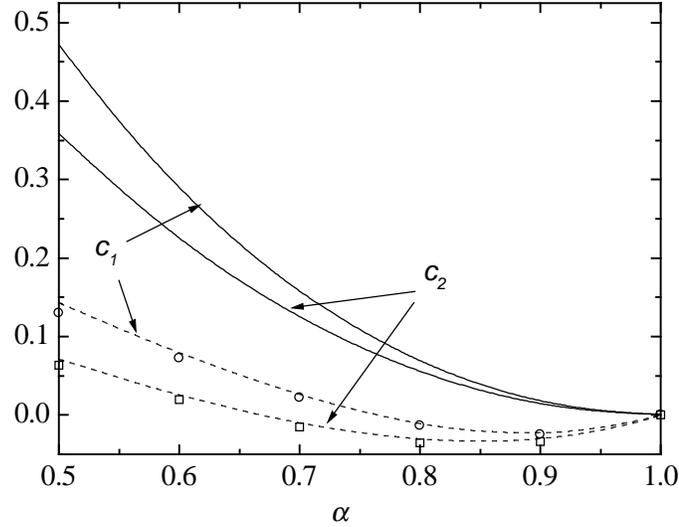


Figura 6.2: Representación de los coeficientes c_i frente al coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ para $d = 3$, $x_1 = \frac{1}{2}$, $\sigma_1/\sigma_2 = 1$ y $m_1/m_2 = 2$. Las líneas sólidas representan los resultados derivados aquí para IMM, las líneas segmentadas son los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 1999b) y los símbolos corresponden a resultados de simulaciones de Monte Carlo para IHS (Montanero and Garzó, 2002a). Los círculos corresponden a c_1 mientras que los cuadrados lo hacen a c_2 .

el acuerdo de ambas aproximaciones con las simulaciones es excelente. También observamos que la ruptura de la equipartición de la energía es mayor a medida que la disparidad de masas aumenta. Además, la temperatura de la especie en exceso es mayor (menor) que la de la especie en defecto cuando la especie en exceso es más pesada (más ligera) que la especie en defecto. En la figura 6.2 se representa también la dependencia de los coeficientes c_1 y c_2 del coeficiente de restitución α para el caso tridimensional y para $x_1 = \frac{1}{2}$, $\sigma_1/\sigma_2 = 1$ y $m_1/m_2 = 2$. Se puede observar que el estado de enfriamiento homogéneo para IMM se desvía de la distribución gaussiana (la cual corresponde a $c_1 = c_2 = 0$) mucho más que para IHS. Esto es consistente con el hecho que los modelos IMM presentan un exceso de población en la cola de energía alta más importante (Ernst and Brito, 2002b; Ernst and Brito, 2002a; Marconi and Puglisi, 2002a; Ernst, Trizac and Barrat, 2006b; Bobylev and Gamba, 2006; Ernst, Trizac and Barrat, 2006a) que los sistemas IHS (van Noije and Ernst, 1998). Para ambos modelos de interacción, la desviación de f_i^* de su forma gaussiana es más significativa para la especie más pesada. También comprobamos que el valor de la curtosis c_i predicho por el IMM exhibe discrepancias cuantitativas con el encontrado para IHS, especialmente para disipación intensa.

6.4. Solución de la ecuación de Boltzmann para IMM mediante el método de Chapman–Enskog

En esta sección, aplicaremos el método de Chapman–Enskog (Chapman and Cowling, 1970) generalizado a colisiones inelásticas al sistema de ecuaciones de Boltzmann (6.1) para IMM, al objeto de encontrar expresiones explícitas de los coeficientes de transporte de Navier–Stokes en función de los coeficientes de restitución y los parámetros de la mezcla (masas, composición y tamaños).

Las ecuaciones de balance (6.5)–(6.7) devienen un sistema cerrado de ecuaciones hidrodinámicas para los campos n_i , \mathbf{u} y T una vez que los flujos (6.10)–(6.12) y la tasa de enfriamiento ζ se expresan en términos de los campos hidrodinámicos y sus gradientes. Como apuntamos en la sección 6.1, mientras que el tensor de presiones tiene la misma forma que para un sistema monocomponente, existe una mayor libertad a la hora de representar los flujos de masa y calor. Aquí, como se hizo en el caso IHS (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b), tomamos los gradientes de la fracción molar $x_1 = n_1/n$, la presión hidrostática $p = nT$, la temperatura T y la velocidad media del fluido \mathbf{u} como gradientes independientes. Así, en esta representación, las relaciones constitutivas fenomenológicas para los flujos en el régimen de baja densidad tienen la forma (de Groot and Mazur, 1984)

$$\mathbf{j}_1 = -\frac{m_1 m_2 n}{\rho} D \nabla x_1 - \frac{\rho}{p} D_p \nabla p - \frac{\rho}{T} D' \nabla T, \quad \mathbf{j}_2 = -\mathbf{j}_1, \quad (6.34)$$

$$\mathbf{q} = -T^2 D'' \nabla x_1 - L \nabla p - \lambda \nabla T, \quad (6.35)$$

$$P_{\alpha\beta} = p \delta_{\alpha\beta} - \eta \left(\nabla_\beta u_\alpha + \nabla_\alpha u_\beta - \frac{2}{d} \delta_{\alpha\beta} \nabla \cdot \mathbf{u} \right). \quad (6.36)$$

Los coeficientes de transporte en estas ecuaciones son el coeficiente de autodifusión D , el coeficiente de difusión térmica D' , el coeficiente de presión difusión D_p , el coeficiente de Dufour D'' , la conductividad térmica λ , el coeficiente de energía presión L y la viscosidad tangencial η .

El método de Chapman–Enskog asume la existencia de una solución *normal* en la cual toda la dependencia espacio–temporal de la función de distribución de velocidades tiene lugar a través de una dependencia funcional de los campos hidrodinámicos:

$$f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f_i[\mathbf{v}|x_1(t), p(t), T(t), \mathbf{u}(t)]. \quad (6.37)$$

En el caso de variaciones espaciales débiles, la dependencia funcional (6.37) se puede hacer local tanto en el espacio como en el tiempo mediante un desarrollo en los gradientes de los campos hidrodinámicos. Para generar dicho desarrollo, f_i se representa mediante un desarrollo en serie en potencias de un parámetro formal ϵ que mide la no uniformidad del sistema.

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \dots, \quad (6.38)$$

donde cada factor de ϵ se refiere a un gradiente implícito de un campo hidrodinámico. El estado de referencia $f_i^{(0)}$ se escoge de modo que dé los mismos primeros momentos que la distribución exacta f_i , o equivalentemente, el resto del desarrollo debe obedecer las condiciones de ortogonalidad

$$\int d\mathbf{v} [f_i(\mathbf{v}) - f_i^{(0)}(\mathbf{v})] = 0, \quad (6.39)$$

$$\sum_i \int d\mathbf{v} m_i \mathbf{v} [f_i(\mathbf{v}) - f_i^{(0)}(\mathbf{v})] = \mathbf{0}, \quad (6.40)$$

$$\sum_i \int d\mathbf{v} \frac{m_i}{2} v^2 [f_i(\mathbf{v}) - f_i^{(0)}(\mathbf{v})] = 0. \quad (6.41)$$

El uso del desarrollo (6.38) en las definiciones de los flujos (6.10)–(6.12) y la tasa de enfriamiento (6.3) origina el correspondiente desarrollo para estas cantidades:

$$\mathbf{j}_1 = \mathbf{j}_1^{(0)} + \epsilon \mathbf{j}_1^{(1)} + \dots, \quad (6.42)$$

$$P_{\alpha\beta} = P_{\alpha\beta}^{(0)} + \epsilon P_{\alpha\beta}^{(1)} + \dots, \quad (6.43)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}^{(0)} + \epsilon \mathbf{q}^{(1)} + \dots, \quad (6.44)$$

$$\zeta = \zeta^{(0)} + \epsilon \zeta^{(1)} + \dots. \quad (6.45)$$

Las derivadas temporales de los campos también son desarrolladas como

$$\partial_t = \partial_t^{(0)} + \epsilon \partial_t^{(1)} + \dots. \quad (6.46)$$

Los coeficientes del desarrollo de las derivadas temporales se identifican cuando se sustituyen los desarrollos (6.42)–(6.45) en las ecuaciones de balance (6.6)–(6.9). En particular, las ecuaciones de balance macroscópicas de orden cero vienen dadas por

$$\partial_t^{(0)} x_1 = 0, \quad \partial_t^{(0)} \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad T^{-1} \partial_t^{(0)} T = p^{-1} \partial_t^{(0)} p = -\zeta^{(0)}. \quad (6.47)$$

Por otra parte, de acuerdo con la ecuación (6.16), la frecuencia de colisión efectiva ω_{ij} es una funcional de f_i y f_j solamente a través de la fracción molar x_j , la presión p y la temperatura T . Dado que dichos campos se definen a partir de las distribuciones de orden cero, entonces $\omega_{ij}^{(0)} = \omega_{ij}$ y $\omega_{ij}^{(1)} = \omega_{ij}^{(2)} = \dots = 0$.

En el orden cero, $f_i^{(0)}$ obedece la ecuación cinética

$$\frac{1}{2} \zeta^{(0)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\mathbf{V} f_i^{(0)}) = \sum_j J_{ij}[f_i^{(0)}, f_j^{(0)}], \quad (6.48)$$

donde hemos utilizado la relación (6.27) con $\zeta^{(0)} = \zeta_i^{(0)}$ dado por la ecuación (6.21). La distribución $f_i^{(0)}$ está dada por la forma escalada (6.22) salvo que $n_i \rightarrow n_i(\mathbf{r}, t)$ y $T \rightarrow T(\mathbf{r}, t)$ son cantidades locales y $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$. Puesto que $f_i^{(0)}$ es isótropa, llegamos a que

$$\mathbf{j}_1^{(0)} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{q}^{(0)} = \mathbf{0}, \quad P_{\alpha\beta}^{(0)} = p \delta_{\alpha\beta}, \quad (6.49)$$

En el primer orden, la función de distribución $f_i^{(1)}$ satisface la ecuación cinética

$$\left(\partial_t^{(0)} + \mathcal{L}_1 \right) f_1^{(1)} + \mathcal{M}_1 f_2^{(1)} = - \left(D_t^{(1)} + \mathbf{V} \cdot \nabla \right) f_1^{(0)}, \quad (6.50)$$

donde $D_t^{(1)} = \partial_t^{(1)} + \mathbf{u} \cdot \nabla$ y hemos introducido los operadores de colisión linealizados

$$\mathcal{L}_1 f_1^{(1)} = - \left(J_{11}[f_1^{(0)}, f_1^{(1)}] + J_{11}[f_1^{(1)}, f_1^{(0)}] + J_{12}[f_1^{(1)}, f_2^{(0)}] \right), \quad (6.51)$$

$$\mathcal{M}_1 f_2^{(1)} = -J_{12}[f_1^{(0)}, f_2^{(1)}]. \quad (6.52)$$

Una ecuación análoga para $f_2^{(1)}$ puede obtenerse a partir de la ecuación (6.50) haciendo el cambio $1 \leftrightarrow 2$. La acción de las derivadas temporales $D_t^{(1)}$ sobre los campos hidrodinámicos viene dada por

$$D_t^{(1)} x_1 = 0, \quad \frac{d}{d+2} D_t^{(1)} \ln p = \frac{d}{2} D_t^{(1)} \ln T = -\nabla \cdot \mathbf{u}, \quad D_t^{(1)} \mathbf{u} = -\rho^{-1} \nabla p. \quad (6.53)$$

En estas ecuaciones hemos hecho uso de los resultados (6.49) y de la identidad $\zeta^{(1)} = 0$. La última igualdad es una consecuencia de la ecuación (6.13). La parte derecha de la ecuación (6.50) se puede evaluar haciendo uso de la ecuación (6.53), de modo que la ecuación para $f_1^{(1)}$ la podemos escribir como

$$\left(\partial_t^{(0)} + \mathcal{L}_1 \right) f_1^{(1)} + \mathcal{M}_1 f_2^{(1)} = \mathbf{A}_1 \cdot \nabla x_1 + \mathbf{B}_1 \cdot \nabla p + \mathbf{C}_1 \cdot \nabla T + D_{1,\alpha\beta} \nabla_\alpha u_\beta, \quad (6.54)$$

donde

$$\mathbf{A}_1(\mathbf{V}) = - \left(\frac{\partial}{\partial x_1} f_1^{(0)} \right)_{p,T} \mathbf{V}, \quad (6.55)$$

$$\mathbf{B}_1(\mathbf{V}) = -\frac{1}{p} \left[f_1^{(0)} \mathbf{V} + \frac{p}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} f_1^{(0)} \right) \right], \quad (6.56)$$

$$\mathbf{C}_1(\mathbf{V}) = \frac{1}{T} \left[f_1^{(0)} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\mathbf{V} f_1^{(0)}) \right] \mathbf{V}, \quad (6.57)$$

$$D_{1,\alpha\beta}(\mathbf{V}) = \frac{\partial}{\partial V_\beta} (V_\alpha f_1^{(0)}) - \frac{1}{d} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\mathbf{V} f_1^{(0)}). \quad (6.58)$$

Merece la pena indicar que las ecuaciones (6.54)–(6.58) tienen la misma estructura que las correspondientes a la ecuación de Boltzmann para IHS (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007*b*). La única diferencia entre ambos modelos radica en la forma explícita de los operadores linealizados \mathcal{L}_i y \mathcal{M}_i .

Ahora estamos en condiciones de obtener las expresiones del flujo de masa, del tensor de presiones y del flujo de calor a primer orden en los gradientes. Estas expresiones nos permiten identificar los coeficientes de transporte relevantes de la mezcla mediante las ecuaciones (6.34)–(6.36).

6.5. Coeficientes de transporte de Navier–Stokes

Esta sección está dedicada a la determinación de los coeficientes de transporte de Navier–Stokes asociados a los flujos irreversibles. Aquí sólo presentamos

las expresiones finales de los coeficientes de transporte. En el apéndice B pueden encontrarse algunos detalles técnicos de los cálculos realizados.

A primer orden en los gradientes hidrodinámicos, el flujo de masa tiene la forma dada por la ecuación (6.34). Los coeficientes de transporte D , D_p y D' están dados por

$$D = \frac{\rho}{m_1 m_2 n} \left(\nu - \frac{1}{2} \zeta^{(0)} \right)^{-1} \left[p \left(\frac{\partial}{\partial x_1} x_1 \gamma_1 \right)_{p,T} + \rho \left(\frac{\partial \zeta^{(0)}}{\partial x_1} \right)_{p,T} (D_p + D') \right], \quad (6.59)$$

$$D_p = \frac{n_1 T_1}{\rho} \left(1 - \frac{m_1 n T}{\rho T_1} \right) \left(\nu - \frac{3}{2} \zeta^{(0)} + \frac{\zeta^{(0)2}}{2\nu} \right)^{-1}, \quad (6.60)$$

$$D' = -\frac{\zeta^{(0)}}{2\nu} D_p, \quad (6.61)$$

donde

$$\nu = \frac{\rho \omega_{12}}{d \rho_2} \mu_{21} (1 + \alpha_{12}) = \frac{4}{d} \frac{\rho}{n(m_1 + m_2)} \left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{\theta_1 \theta_2} \right)^{1/2} \nu_M (1 + \alpha_{12}). \quad (6.62)$$

Dado que $\mathbf{j}_1 = -\mathbf{j}_2$ y $\nabla x_1 = -\nabla x_2$, D debe ser simétrico mientras que D_p y D' deben ser antisimétricos respecto al cambio $1 \leftrightarrow 2$. Esto se puede comprobar observando que $n_1 T_1 + n_2 T_2 = nT$. Para colisiones elásticas, $\zeta^{(0)} = 0$, $T_1 = T_2 = T$ y así las ecuaciones (6.59)–(6.61) dan

$$D = \frac{d}{8} \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \frac{p}{\nu_M}, \quad (6.63)$$

$$D_p = \frac{d}{8} (m_2^2 - m_1^2) \frac{n_1 n_2 p}{\rho^3 \nu_M} = \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho^3} (m_2 - m_1) D, \quad (6.64)$$

$$D' = 0, \quad (6.65)$$

donde $\rho_i = m_i n_i$ y hemos utilizado de nuevo la ecuación (6.16). En el caso de partículas mecánicamente equivalentes pero inelásticas, $\gamma = 1$, $D_p = D' = 0$, con lo cual la ecuación (6.59) nos da la expresión del coeficiente de autodifusión

$$D = \frac{p}{m} \left(\nu - \frac{1}{2} \zeta^{(0)} \right)^{-1}. \quad (6.66)$$

que coincide con el resultado dado por las ecuaciones (2.59) y (3.59).

El tensor de presiones tiene la forma (6.36) con el coeficiente de viscosidad tangencial η dado por

$$\eta = \eta_1 + \eta_2. \quad (6.67)$$

La expresión de las contribuciones parciales η_i es

$$\eta_1 = 2 \frac{p_1(2\tau_{22} - \zeta^{(0)}) - 2p_2\tau_{12}}{\zeta^{(0)2} - 2\zeta^{(0)}(\tau_{11} + \tau_{22}) + 4(\tau_{11}\tau_{22} - \tau_{12}\tau_{21})}, \quad (6.68)$$

donde las cantidades τ_{11} y τ_{12} están definidas por las ecuaciones (B.11) y (B.12), respectivamente. Se puede obtener una expresión similar para η_2 haciendo los cambios $1 \leftrightarrow 2$. Para partículas mecánicamente equivalentes, la ecuación (6.68) da $\eta_1/x_1 = \eta_2/x_2 = \eta$, donde

$$\eta = \frac{p}{\nu_\eta - \frac{1}{2}\zeta^{(0)}}, \quad \nu_\eta = \frac{(1 + \alpha)(d + 1 - \alpha)}{d(d + 2)}\omega, \quad (6.69)$$

y $\omega = \omega_{ij}/x_j = (d+2)\nu_0/2$. La expresión (6.69) coincide con la obtenida previamente en el caso del gas monocomponente (Santos, 2003) [véanse las ecuaciones (2.37) y (3.55)].

El caso del flujo de calor es algo más complicado. Su forma está dada por la ecuación (6.35) donde los coeficientes D'' , L y λ son

$$D'' = D''_1 + D''_2, \quad L = L_1 + L_2, \quad \lambda = \lambda_1 + \lambda_2. \quad (6.70)$$

Usando notación matricial, el sistema acoplado de seis ecuaciones para las incógnitas

$$\{D''_1, D''_2, L_1, L_2, \lambda_1, \lambda_2\} \quad (6.71)$$

puede ser escrito como

$$\Lambda_{\sigma\sigma'} X_{\sigma'} = Y_\sigma. \quad (6.72)$$

Aquí, $X_{\sigma'}$ es la matriz columna definida por el sistema (6.71) y $\Lambda_{\sigma\sigma'}$ es la matriz cuadrada

$$\Lambda = \begin{pmatrix} T^2(\frac{3}{2}\zeta^{(0)} - \beta_{11}) & -T^2\beta_{12} & p\left(\frac{\partial\zeta^{(0)}}{\partial x_1}\right)_{p,T} & 0 & T\left(\frac{\partial\zeta^{(0)}}{\partial x_1}\right)_{p,T} & 0 \\ -T^2\beta_{21} & T^2(\frac{3}{2}\zeta^{(0)} - \beta_{22}) & 0 & p\left(\frac{\partial\zeta^{(0)}}{\partial x_1}\right)_{p,T} & 0 & T\left(\frac{\partial\zeta^{(0)}}{\partial x_1}\right)_{p,T} \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\zeta^{(0)} - \beta_{11} & -\beta_{12} & T\zeta^{(0)}/p & 0 \\ 0 & 0 & -\beta_{21} & \frac{5}{2}\zeta^{(0)} - \beta_{22} & 0 & T\zeta^{(0)}/p \\ 0 & 0 & -p\zeta^{(0)}/2T & 0 & \zeta^{(0)} - \beta_{11} & -\beta_{12} \\ 0 & 0 & 0 & -p\zeta^{(0)}/2T & -\beta_{21} & \zeta^{(0)} - \beta_{22} \end{pmatrix}. \quad (6.73)$$

La matriz columna \mathbf{Y} es

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \\ Y_5 \\ Y_6 \end{pmatrix}, \quad (6.74)$$

donde

$$Y_1 = \frac{m_1 m_2 n}{\rho} A_{12} D - \frac{d+2}{2} \frac{n T^2}{m_1} \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\left(1 + \frac{c_1}{2}\right) x_1 \gamma_1^2 \right], \quad (6.75)$$

$$Y_2 = -\frac{m_1 m_2 n}{\rho} A_{21} D - \frac{d+2}{2} \frac{n T^2}{m_2} \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\left(1 + \frac{c_2}{2}\right) x_2 \gamma_2^2 \right], \quad (6.76)$$

$$Y_3 = \frac{\rho}{p} A_{12} D_p - \frac{d+2}{2} \frac{n_1 T_1^2}{m_1 p} \left(1 - \frac{m_1 p}{\rho T_1} + \frac{c_1}{2}\right), \quad (6.77)$$

$$Y_4 = -\frac{\rho}{p} A_{21} D_p - \frac{d+2}{2} \frac{n_2 T_2^2}{m_2 p} \left(1 - \frac{m_2 p}{\rho T_2} + \frac{c_2}{2}\right), \quad (6.78)$$

$$Y_5 = \frac{\rho}{T} A_{12} D' - \frac{d+2}{2} \frac{n_1 T_1^2}{m_1 T} \left(1 + \frac{c_1}{2}\right), \quad (6.79)$$

$$Y_6 = -\frac{\rho}{T} A_{21} D' - \frac{d+2}{2} \frac{n_2 T_2^2}{m_2 T} \left(1 + \frac{c_2}{2}\right). \quad (6.80)$$

Las expresiones de las cantidades β_{ij} y A_{ij} aparecen en el apéndice B. La solución de la ecuación (6.72) es

$$X_\sigma = (\Lambda^{-1})_{\sigma\sigma'} Y_{\sigma'}. \quad (6.81)$$

Esta relación proporciona una expresión explícita para los coeficientes D''_i , L_i y λ_i en términos de los coeficientes de restitución y los parámetros de la mezcla. A partir de estas expresiones obtenemos de la ecuación (6.70) los coeficientes de transporte D'' , L y λ . Como era de esperar, las ecuaciones (6.72)–(6.80) muestran que D'' es antisimétrico respecto al cambio $1 \leftrightarrow 2$, mientras que L y λ son simétricos. Esto implica que en el caso de partículas mecánicamente equivalentes, el coeficiente de Dufour D'' se anula. Además, en este límite, la ecuación (6.81) conduce a la siguiente expresión para el flujo de calor

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n, \quad (6.82)$$

donde

$$\kappa = \lambda + nL = \frac{d+2}{2} \frac{p}{m} \frac{1+c}{\nu_\kappa - 2\zeta^{(0)}}, \quad (6.83)$$

$$\mu = TL = \frac{T}{n} \frac{\kappa(\zeta^{(0)} + \frac{1}{2}c\nu_\kappa)}{(1+c)(\nu_\kappa - \frac{3}{2}\zeta^{(0)})}, \quad (6.84)$$

con

$$\nu_\kappa = \frac{4(d-1) + (8+d)(1-\alpha)}{4d + 4(1-\alpha)} \nu_\eta. \quad (6.85)$$

Obsérvese que para obtener la ecuación (6.82) hemos hecho uso de la relación $\nabla p = n\nabla T + T\nabla n$. De nuevo, las ecuaciones (6.82)–(6.85) coinciden con los resultados obtenidos en el caso monocomponente (Santos, 2003) [véanse las ecuaciones (2.38), (2.39) y (3.56)]. Como ya se señaló en el capítulo 3, las ecuaciones (6.83)–(6.85) muestran que los coeficientes κ y μ divergen para $d = 2$ y $d = 3$ cuando $\alpha = \alpha_0 = (4-d)/3d$. De este modo, κ y μ se hacen negativos para $0 \leq \alpha < \alpha_0$. Este comportamiento no físico podría ser debido al fallo de la descripción hidrodinámica para valores del coeficiente de restitución más pequeños que α_0 o quizá a la existencia de algún tipo de inestabilidad hidrodinámica. No obstante, dado que el valor de α_0 es bastante pequeño ($\alpha_0 = \frac{1}{3}$ para $d = 2$ y $\alpha_0 = \frac{1}{9}$ para $d = 3$) este comportamiento singular podría ser interpretado efectivamente como una ruptura del comportamiento hidrodinámico. La aclaración de este punto requiere un análisis más exhaustivo del problema. Debe indicarse

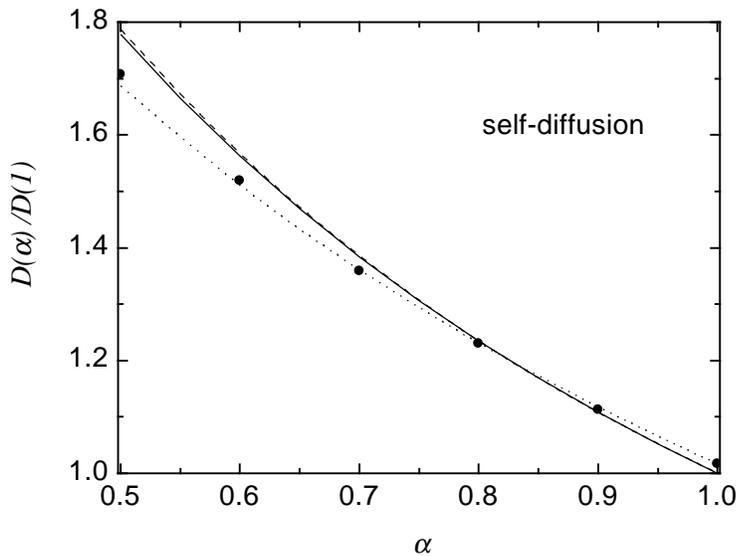


Figura 6.3: Representación del coeficiente de autodifusión reducido $D(\alpha)/D(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para IMM (línea sólida) y para IHS en la primera (línea segmentada) (Brey et al., 2000) y segunda (línea punteada) (Garzó and Montanero, 2004) aproximaciones de Sonine. Los símbolos corresponden a simulaciones de Monte Carlo para IHS (Garzó and Montanero, 2004; Brey et al., 2000).

que el inconveniente anterior no se presenta en el caso de IHS, dado que todos los coeficientes de transporte son funciones continuas de α para todo d .

Los resultados obtenidos en esta sección en el caso de partículas mecánicamente equivalentes para los coeficientes de autodifusión (6.66), viscosidad tangencial (6.69), conductividad térmica (6.83) y coeficiente μ (6.84) coinciden con los presentados en la sección 3.4.

6.6. Comparación con los coeficientes de transporte de IHS

Las expresiones de los coeficientes de transporte de IHS han sido recientemente obtenidas (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b) en la primera aproximación de Sonine para un número arbitrario de dimensiones. Estas expresiones se han evaluado para varios valores de los cocientes de diámetros y masas en los casos del coeficiente de autodifusión (Garzó and Montanero, 2004; Garzó and Montanero, 2007b)

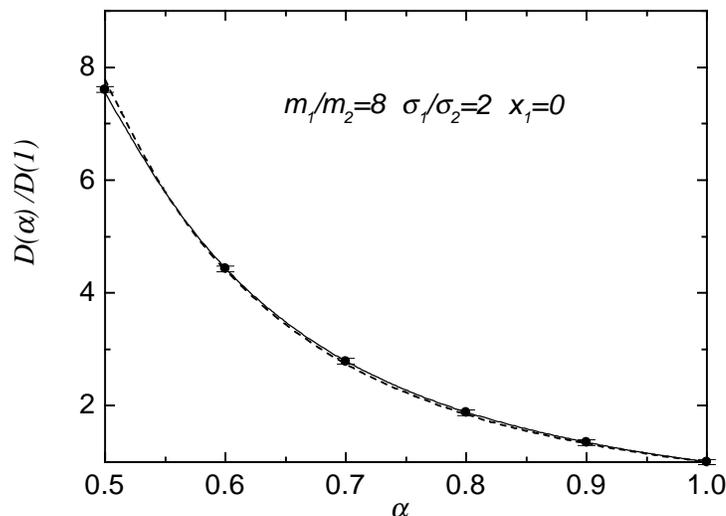


Figura 6.4: Representación del coeficiente de autodifusión reducido $D(\alpha)/D(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1/\sigma_2 = 2$, $x_1 = 0$ (límite de partícula trazadora) y $m_1/m_2 = 8$. La línea sólida corresponde a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM, mientras que la línea segmentada representa los resultados obtenidos para IHS en la segunda aproximación de Sonine (Garzó and Montanero, 2004). Los símbolos corresponden a simulaciones de Monte Carlo para IHS (Garzó and Montanero, 2004).

y de la viscosidad tangencial (Montanero and Garzó, 2003b; Garzó and Montanero, 2007b), mostrando un acuerdo bastante bueno con las simulaciones de Monte Carlo. En esta sección, comparamos los resultados obtenidos para los coeficientes de transporte de IMM (en el caso de los coeficientes de transporte D, D_p, D' y η) con los obtenidos para IHS en el caso $d = 3$. Al igual que los casos estudiados en la sección 6.3, consideramos por simplicidad un coeficiente de restitución común, es decir, $\alpha_{11} = \alpha_{12} = \alpha_{22} \equiv \alpha$.

Consideremos primero el coeficiente de autodifusión D en los casos límite de autodifusión (partículas mecánicamente equivalentes) y de partícula trazadora ($x_1 \rightarrow 0$). La figura 6.3 muestra el coeficiente de autodifusión reducido $D(\alpha)/D(1)$ en función del coeficiente de restitución α . Aquí, y en lo que sigue, $D(1)$ hace referencia al coeficiente de autodifusión (6.63) para colisiones elásticas. Incluimos los resultados obtenidos para IHS tanto en la primera aproximación de Sonine (línea segmentada) (Dufty and Garzó, 2001; Brey et al., 2000), como en la segunda aproximación de Sonine (línea punteada), así como simulaciones de Monte Carlo (símbolos) (Garzó and Montanero, 2004). Observamos que el acuerdo entre las predicciones de la primera aproximación de Sonine

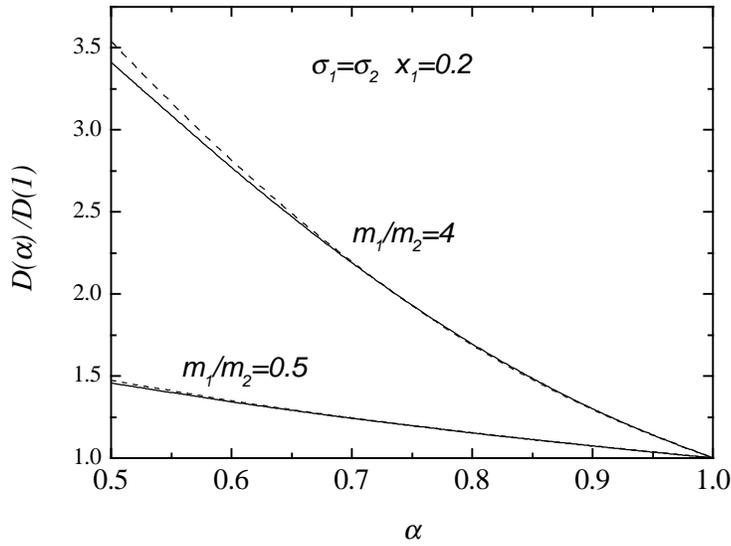


Figura 6.5: Representación del coeficiente de autodifusión reducido $D(\alpha)/D(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y dos valores diferentes del cociente de masas: $m_1/m_2 = 0.5$ y $m_1/m_2 = 4$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b).

para IHS y de IMM es excelente en todo el rango de valores de α considerado. Además, ambas teorías presentan un acuerdo bastante bueno con los resultados de simulación, incluso más allá del límite de muy baja disipación (por ejemplo, $\alpha \geq 0.8$). No obstante, a medida que la disipación aumenta, el acuerdo entre teoría y simulación mejora cuando se considera la segunda aproximación de Sonine. Para partículas mecánicamente diferentes, en la figura 6.4 presentamos $D(\alpha)/D(1)$ frente a α en el límite de partícula trazadora ($x_1 \rightarrow 0$) para $m_1/m_2 = 8$ y $\sigma_1/\sigma_2 = 2$ tanto para IMM, IHS en la segunda aproximación de Sonine (Garzó and Montanero, 2004) y simulaciones de Monte Carlo. Podemos comprobar que ambas teorías son prácticamente indistinguibles y presentan un acuerdo magnífico con los resultados de simulación.

Las figuras 6.5 y 6.6 muestran la dependencia de los coeficientes de transporte reducidos $D(\alpha)/D(1)$, $D_p(\alpha)/D_p(1)$ y $-D^*(\alpha)$ del coeficiente de restitución α para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y dos valores del cociente de masas ($m_1/m_2 = 0.5$ y 4). Aquí, $D_p(1)$ viene dado por la primera igualdad de la ecuación (6.64) y $D^*(\alpha) = -D'(\alpha)/D_p(1)$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados de IMM mientras que las líneas segmentadas se refieren a los resultados obtenidos

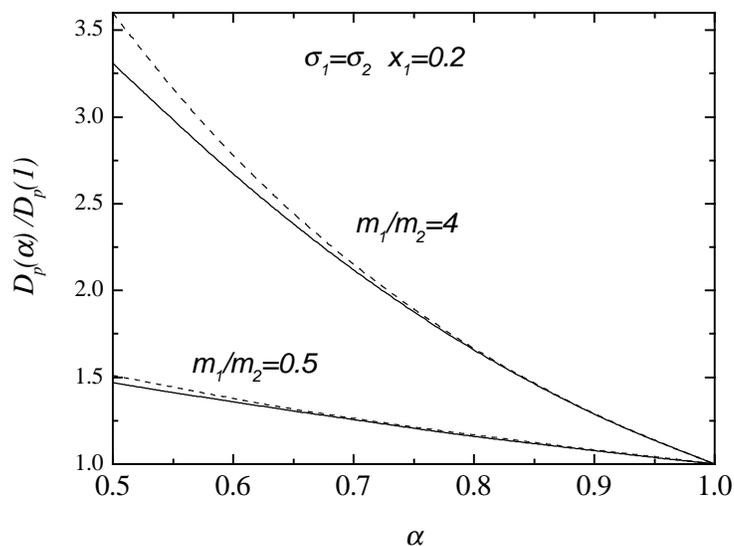


Figura 6.6: Representación del coeficiente de autodifusión reducido $D(\alpha)/D(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y dos valores diferentes del cociente de masas: $m_1/m_2 = 0.5$ y $m_1/m_2 = 4$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b).

para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b). Observamos que, en general, el modelo IMM captura bien el comportamiento cualitativo del IHS. Desde un punto de vista cuantitativo, para una disipación no excesivamente intensa (por ejemplo, $\alpha \geq 0.8$) el acuerdo entre los resultados obtenidos para IMM e IHS es de nuevo bastante bueno, especialmente en el caso de $m_1/m_2 = 0.5$. Sin embargo, las discrepancias entre ambos modelos de interacción se acentúan algo más a medida que el coeficiente de restitución se hace más pequeño. Por ejemplo, para $\alpha = 0.5$, las discrepancias para $D(\alpha)/D(1)$, $D_p(\alpha)/D_p(1)$ y $-D^*(\alpha)$ son aproximadamente del 4%, 5% y 8%, respectivamente, para $m_1/m_2 = 4$, mientras que son del 1%, 3% y 3%, respectivamente, para $m_1/m_2 = 0.5$.

La dependencia del coeficiente de viscosidad tangencial reducido, $\eta(\alpha)/\eta(1)$, de la disipación se representa en la figura 6.8 para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y para dos valores del cociente de masas ($m_1/m_2 = 0.5$ y 4). Aquí, $\eta(1)$ es la viscosidad tangencial correspondiente a las colisiones elásticas. Aunque de nuevo las predicciones del modelo IMM concuerdan cualitativamente bien con las del modelo IHS, observamos que las discrepancias entre ambos modelos al nivel de

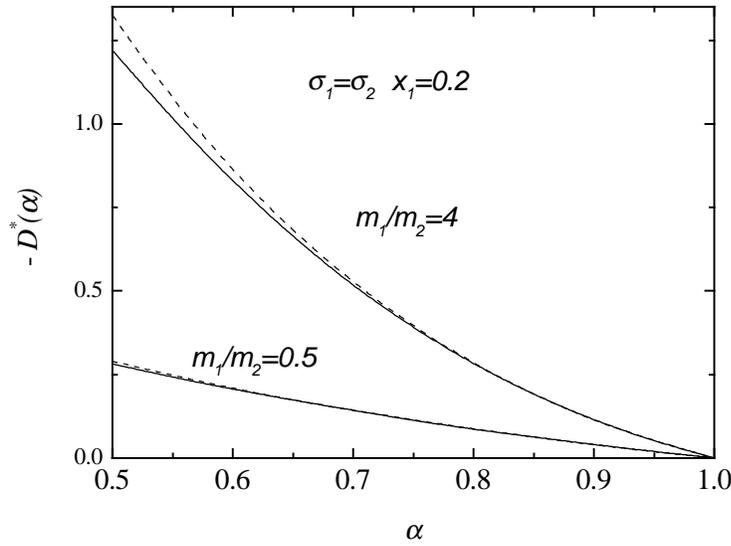


Figura 6.7: Representación del coeficiente reducido $-D^*(\alpha) = -D'(\alpha)/D_p(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y dos valores diferentes del cociente de masas: $m_1/m_2 = 0.5$ y $m_1/m_2 = 4$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b).

la viscosidad tangencial son mayores que las encontradas en los coeficientes de transporte del flujo de masa. Por ejemplo, las diferencias son aproximadamente de un 4% para $\alpha = 0.8$ y de un 9% para $\alpha = 0.5$. Las discrepancias observadas en la figura 6.8 son similares a las encontradas en el caso del gas monocomponente (Santos, 2003). Por otro lado, y al igual que sucede en el caso simple, se espera que el desacuerdo entre los modelos IMM e IHS sea más significativo cuando se comparen momentos de grado superior, tales como el flujo de calor. Para mostrar estas diferencias, en la figura 6.9 representamos los coeficientes reducidos $\kappa(\alpha)/\kappa(1)$ y $\mu^*(\alpha) = n\mu(\alpha)/T\kappa(1)$ para $d = 3$ en el caso del gas monocomponente. Aquí, $\kappa(\alpha)$ viene dado por la ecuación (6.83) mientras que el coeficiente $\mu(\alpha)$ está dado por (6.84). Como ya se apuntó en la referencia (Santos, 2003), las tendencias observadas para IHS son exageradas intensamente por el modelo IMM, donde κ y μ divergen para $\alpha = \frac{1}{9}$.

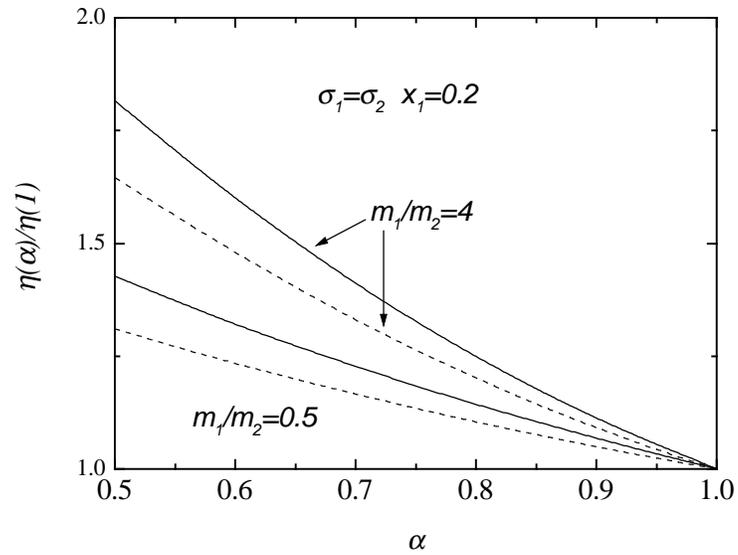


Figura 6.8: Representación de la viscosidad tangencial reducida $\eta(\alpha)/\eta(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para $\sigma_1 = \sigma_2$, $x_1 = 0.2$ y dos valores diferentes del cociente de masas: $m_1/m_2 = 0.5$ y $m_1/m_2 = 4$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos aquí para IMM mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Montanero and Garzó, 2003b).

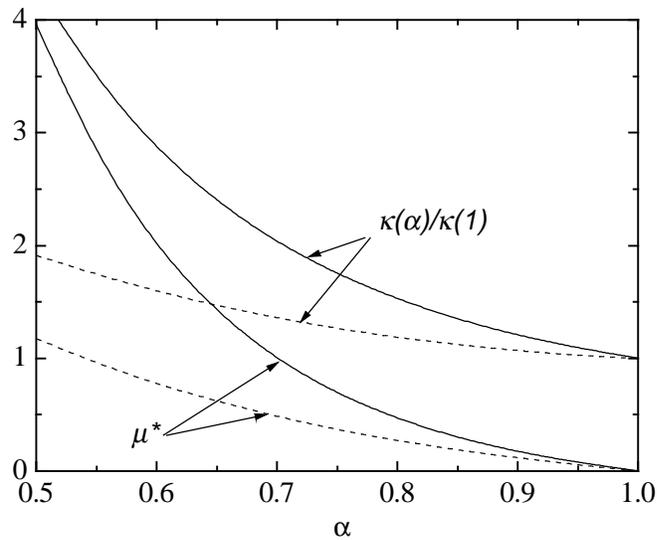


Figura 6.9: Representación de los coeficientes reducidos $\kappa(\alpha)/\kappa(1)$ y $\mu^*(\alpha) = n\mu(\alpha)/T\kappa(1)$ en función del coeficiente de restitución común $\alpha \equiv \alpha_{ij}$ en el caso tridimensional para un gas monocomponente. Las líneas sólidas corresponden a los resultados exactos obtenidos para IMM (Santos, 2003) mientras que las líneas segmentadas representan los resultados obtenidos para IHS en la primera aproximación de Sonine (Brey et al., 1998).

Capítulo 7

Conclusiones y perspectivas

En este capítulo se recogen las reflexiones y conclusiones más importantes derivadas de esta investigación.

7.1. Modelo de esferas duras elásticas sometidas a fricción (capítulos 2 y 3)

El modelo paradigmático para estudiar las propiedades básicas de los medios granulares fluidos está formado por un gas de esferas duras inelásticas (IHS) con un coeficiente de restitución normal α . Desde un punto de vista microscópico, la teoría cinética ha revelado ser una excelente herramienta para describir características fundamentales de esta clase de fluidos (IHS), tales como la inexistencia, en el sentido de Gibbs, de estados de equilibrio¹, excesos de población en las colas de velocidad alta, inestabilidades que conducen a la formación de agregados de partículas, ruptura de la equipartición de la energía, flujos de calor inducidos por la presencia de gradientes de densidad, fenómenos de segregación en mezclas, transiciones de fase en el espacio de las velocidades, etc. La descripción cinética de los fluidos granulares se asienta sobre dos ecuaciones básicas: la ecuación de Boltzmann, para gases diluidos, y la ecuación de Enskog en el caso de sistemas densos. Ambas ecuaciones han sido construidas asumiendo la hipótesis del caos molecular, según la cual las velocidades de dos partículas que se encuentran a punto de colisionar no están correlacionadas. Aunque el grado de validez de esta hipótesis es mucho más limitado en el caso de colisiones inelásticas que en el caso de colisiones elásticas (Soto, Piasecki and Mareschal, 2001), tanto la ecuación

¹Por ejemplo, en el estado de enfriamiento homogéneo la función de distribución del gas IHS es de no equilibrio. Por contra, para el gas EHS + fricción, la función de distribución sí es la de equilibrio de Maxwell–Boltzmann.

de Boltzmann como la de Enskog proporcionan una información muy valiosa para entender el comportamiento tan peculiar de los fluidos granulares.

Desde un punto de vista puramente matemático, la ecuación de Boltzmann para IHS es más compleja que en el caso de esferas duras elásticas (EHS), como consecuencia de la irrupción del coeficiente de restitución normal α . Como se puede comprobar en las ecuaciones (2.3) y (2.14), este coeficiente aparece de dos formas diferentes dentro de la integral del operador de colisiones de Boltzmann. En primer lugar, aparece de modo explícito en forma del factor α^{-2} delante del término de ganancia, como consecuencia de las dos propiedades siguientes: $d\mathbf{v}''d\mathbf{v}_1'' = \alpha^{-1}d\mathbf{v}d\mathbf{v}_1$ y $\mathbf{g}'' \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\alpha^{-1}\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$. En segundo lugar, el coeficiente de restitución normal aparece en la definición de las velocidades precolisionales \mathbf{v}'' y \mathbf{v}_1'' , dadas por la regla de colisión (2.3). La primera consecuencia importante que se extrae del hecho de que $\alpha < 1$ es la pérdida de energía en las colisiones (ecuaciones (2.4) y (2.18)). Esta pérdida de energía viene recogida por la tasa de enfriamiento ζ la cual, a su vez, está dada por las ecuaciones (2.19) y (2.20).

Los capítulos 2 y 3 de esta memoria se han dedicado a la propuesta de un modelo para gases granulares basado en la ecuación de Boltzmann para esferas duras elásticas (EHS). De este modo, la complejidad que la inelasticidad de las colisiones introduce en la teoría cinética de los gases granulares es, en cierto modo, soslayada por un modelo elástico construido sobre dos hipótesis fundamentales. La primera de estas hipótesis constituye el ingrediente clave del modelo: dado que en las colisiones elásticas la energía se conserva, debe introducirse algún género de fricción externa que produzca un efecto de enfriamiento macroscópico similar al ocasionado por la inelasticidad. La elección de esta fuerza de fricción no es única. La posibilidad más intuitiva consiste en suponer que el gas de esferas duras elásticas (EHS) se encuentra sometido a la acción de una fuerza de fricción $\mathbf{F}_{\text{fric}} = -m\xi\mathbf{V}$. Con la finalidad de que en el gas elástico se produzca el mismo efecto de enfriamiento que en el verdadero gas IHS, la constante de fricción se debe ajustar para ser $\xi = \frac{1}{2}\zeta$. En general, ζ es una complicada funcional no lineal de la función de distribución de velocidades de una partícula. Dado que queremos preservar la simplicidad del modelo EHS + fricción, es preferible hacer la aproximación $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$, donde $\zeta_0 \propto nT^{1/2}(1 - \alpha^2)$ es la tasa de enfriamiento en la aproximación de equilibrio local. La segunda de las hipótesis es algo más sutil y tiene que ver con el hecho de que la introducción de la fuerza de fricción al gas EHS no es capaz de reproducir, cuantitativamente hablando, ciertas propiedades colisionales del gas IHS. Para solucionar estas dificultades se ha introducido en el modelo el parámetro libre β que nos va a permitir ajustar en la medida de lo posible los resultados proporcionados por el modelo EHS + fricción a los del modelo IHS. El parámetro β se puede interpretar físicamente de dos maneras distintas pero equivalentes. En primer lugar como un factor de reducción de la frecuencia de colisión del gas EHS frente al gas IHS, pues se cumple que $\beta < 1$. En el régimen diluido, la interpretación anterior es equivalente a considerar que el diámetro σ' de las esferas elásticas es menor que el de las esferas inelásticas σ , a saber, $\sigma'/\sigma = \beta^{1/(d-1)}$. De modo

alternativo, se puede interpretar β como un factor de escala espacial y temporal. La comparación de los coeficientes de transporte de Navier–Stokes obtenidos de la ecuación de Boltzmann (en la primera aproximación de Sonine) para los dos sistemas (IHS y EHS + fricción), sugiere la elección $\beta = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$. Este valor del parámetro β está avalado por la extensión del modelo a los casos de mezclas de gases diluidos [ver sección 3.2] y de sistemas densos monocomponentes [ver sección 3.3], respectivamente, donde también aparece. En este último caso, como consecuencia de la separación física entre las dos partículas que colisionan y la presencia de la función de correlación de pares en el operador de colisión de Enskog, la interpretación de β en términos de diferentes tamaños $\sigma' \neq \sigma$ o como un factor de escala espacio temporal no es literalmente correcta. En este caso, debemos interpretar β como un factor correctivo que modifica la frecuencia de colisión del sistema EHS + fricción relativa a la del gas IHS.

Es obvio que un gas IHS y uno EHS + fricción difieren en muchos aspectos. Por ejemplo, mientras que el último presenta soluciones de tipo gaussiano (con una temperatura dependiente del tiempo en el caso del estado de enfriamiento homogéneo o con una temperatura estacionaria en el caso de un gas calentado por un forzamiento de ruido blanco) el gas IHS exhibe un exceso de población en las colas de velocidad alta. Sin embargo, aunque en principio estas discrepancias podrían parecer relevantes, en el dominio de las velocidades térmicas no lo son tanto, cuantitativamente hablando. De hecho, se puede esperar que en un gas EHS con una constante de fricción $\xi \propto nT^{1/2}$ aparezcan todas las características distintivas propias de los gases granulares (con la salvedad de las dos primeras) enumeradas en el primer párrafo de esta sección.

Consideremos que el gas, en un momento dado, se encuentra en un estado inhomogéneo y/o anisótropo como consecuencia de, por ejemplo, hallarse en una etapa transitoria o experimentar algún género de inestabilidad o por la aplicación de determinadas condiciones de contorno. En estas condiciones, tiene lugar transferencia de cantidad de movimiento y/o de energía, de modo que la función de distribución de velocidades de una partícula presenta desviaciones importantes respecto a la función de equilibrio local, incluso para velocidades pequeñas y moderadas. Es en este tipo de situaciones donde se espera que el modelo EHS + fricción reproduzca las principales propiedades de transporte del gas IHS.

Desde un punto de vista matemático, las ecuaciones de Boltzmann y Enskog para el modelo EHS + fricción son más manejables que las correspondientes al modelo IHS. Aun teniendo en cuenta esto, la resolución de ambas ecuaciones para cualquiera de los dos modelos representa una labor formidable. En el contexto de los fluidos convencionales las dificultades anteriores han estimulado la propuesta de diversos modelos cinéticos, siendo el modelo BGK uno de los más conocidos (Cercignani, 1988; Bhatnagar, Gross and Krook, 1954; Welandar, 1954). En este mismo sentido, una aplicación práctica bastante interesante de la relación IHS \leftrightarrow EHS es la posibilidad de extender aquellos modelos

cinéticos propuestos originalmente para sistemas elásticos a gases granulares. Esto ha posibilitado la recuperación de versiones simplificadas de modelos cinéticos propuestos anteriormente para gases monocomponentes diluidos y densos (Brey, Dufty and Santos, 1999). En el caso de mezclas de gases inelásticos la situación es más complicada, a pesar de que existen varios modelos para mezclas elásticas (Garzó and Santos, 2003). Llegados a este punto es importante hacer notar que nuestro método permite la construcción de modelos cinéticos para el caso de mezclas de gases inelásticos (Astillero and Santos, 2004; Santos and Astillero, 2005). Una propuesta concreta siguiendo esta filosofía ha sido propuesta recientemente (Vega, Garzó and Santos, 2007).

7.2. Gases disipativos y flujo tangencial uniforme (capítulos 4 y 5)

En el capítulo 4 de esta memoria hemos analizado las propiedades principales de no equilibrio de dos clases de gases disipativos que se encuentran en condiciones de flujo tangencial uniforme (USF). Los dos puntos básicos en los que hemos centrado nuestro interés son los siguientes. Por un lado, queríamos hacer un estudio exhaustivo de las propiedades físicas de gases disipativos sometidos al flujo tangencial uniforme, tanto en el régimen transitorio como en el estacionario. Aunque el flujo tangencial uniforme ha sido extensamente estudiado en la literatura sobre fluidos granulares, algunos de sus aspectos más importantes (etapa hidrodinámica transitoria, cumulantes, cola de velocidad alta, ...) han recibido una menor atención. En segundo lugar, tomando el flujo tangencial uniforme como un estado conceptualmente simple y paradigmático de no equilibrio, queríamos intentar dilucidar hasta qué punto el gas EHS es capaz de reproducir las propiedades físicas del verdadero gas granular IHS. Para satisfacer estos objetivos, hemos efectuado simulaciones computacionales de ambas clases de sistemas haciendo uso del método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC), tomando diez valores del coeficiente de restitución normal ($\alpha = 0.5-0.95$ con un paso $\Delta\alpha = 0.05$) y dos valores del gradiente de velocidad ($a = 4/\tau^0$ y $a = 0.1/\tau^0$). A continuación, resumimos las conclusiones más importantes derivadas de nuestro estudio.

La duración del periodo de evolución hacia el estado estacionario, cuando es medida en unidades del número acumulado de colisiones por partícula (s), es prácticamente independiente del gradiente de velocidad impuesto a , así como de las condiciones iniciales, pero es fuertemente dependiente del coeficiente de restitución normal α . A medida que la inelasticidad aumenta, el número de colisiones por partícula necesario para alcanzar el estado estacionario disminuye. Por ejemplo, $s \simeq 40$ para $\alpha = 0.9$, mientras que $s \simeq 20$ para $\alpha = 0.5$. No obstante, cuando la duración se mide utilizando un reloj externo (por ejemplo, en unidades del tiempo medio entre colisiones inicial) apenas sí depende de α ,

haciéndolo en gran medida ahora de a : cuanto menor es el gradiente de velocidad impuesto mayor es la duración del periodo transitorio.

El número acumulado instantáneo de colisiones por partícula, $s(t)$, es ligeramente menor que la estimación de equilibrio local $s_0(t)$. Esto indica que $\langle V \rangle < \langle V \rangle_0$, mientras que $\langle V^2 \rangle = \langle V^2 \rangle_0 = 3T(t)/m$ por definición. La desigualdad $\langle V \rangle < \langle V \rangle_0$ es consistente con un defecto de población (respecto de la distribución de equilibrio local) para velocidades moderadas, que debe estar compensado por un exceso de población en la región de energía alta. Este razonamiento cualitativo se ve confirmado por las desigualdades $\langle V_{12}^3 \rangle > \langle V_{12}^3 \rangle_0$, $\langle V^4 \rangle > \langle V^4 \rangle_0$ y $\langle V^6 \rangle > \langle V^6 \rangle_0$ observadas en las simulaciones. Además de estos efectos, el movimiento de cizalladura induce una anisotropía importante en las tensiones normales, a saber $P_{xx}(t) > nT(t) > P_{zz}(t) \gtrsim P_{yy}(t)$. En otras palabras, tiene lugar una ruptura de la equipartición de la energía, donde la “temperatura” asociada al grado de libertad paralelo al movimiento del fluido es significativamente mayor que las asociadas a los otros dos grados de libertad, como se ha comprobado ya en otros estudios (Campbell and Gong, 1986; Walton and Braun, 1986*b*; Walton and Braun, 1986*a*; Jenkins and Richman, 1988; Campbell, 1989; Hopkins and Shen, 1992; Lun and Bent, 1994; Sela, Goldhirsch and Noskowitz, 1996; Brey, Ruiz-Montero and Moreno, 1997; Montanero et al., 1999; Frezzotti, 2000; Bobylev, Groppi and Spiga, 2002; Alam and Luding, 2003*b*; Alam and Luding, 2003*a*).

Hemos prestado una atención especial a las propiedades del estado estacionario, el cual es intrínsecamente independiente del gradiente de velocidad impuesto, así como de las condiciones iniciales. Como era de esperar, la distorsión respecto a la aproximación de equilibrio local (según es medida por la tensión tangencial, las diferencias de tensiones normales, los cumulantes, ...) aumenta con la inelasticidad. Esta distorsión se hace bastante evidente observando las formas de las funciones de distribución de velocidades (marginales) correspondientes al estado estacionario y definidas por las ecuaciones (4.23)–(4.25). En particular, las colas de velocidad alta de $g_x^{(+)}(C_x)$ y $F(C)$ parecen ser consistentes con una forma exponencial.

Los comentarios precedentes se aplican tanto al gas IHS como al EHS + fricción. Por lo tanto, un gas “equivalente” EHS es capaz de imitar satisfactoriamente las principales propiedades de transporte y de no equilibrio de un auténtico gas granular IHS en situación de flujo tangencial uniforme. Si nos fijamos en las propiedades básicas (tales como los valores estacionarios del gradiente de velocidad reducido a_s^* , la tensión tangencial reducida $P_{xy,s}/nT_s$ o el segundo cumulante a_2) es casi imposible distinguir los valores del modelo EHS de los del IHS si $\alpha \gtrsim 0.7$, siendo todavía las diferencias relativamente pequeñas para $\alpha \lesssim 0.7$. Hemos observado que en el gas EHS $\langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$ y a_2 son ligeramente mayores que en el caso IHS si $\alpha \gtrsim 0.7$, sucediendo lo contrario si $\alpha \lesssim 0.7$; esto es análogo a lo que sucede en el estado de enfriamiento homogéneo y en el calentado mediante un forzamiento de ruido blanco, siendo la función de distribución

de velocidades del gas EHS en ambos estados la de Maxwell–Boltzmann. Es interesante observar que, incluso para $\alpha = 0.5$, la curva hidrodinámica completa $\eta^*(a^*)$ coincide en ambos sistemas, exceptuando la localización del punto correspondiente al estado estacionario $\eta_s^* = \eta^*(a_s^*)$, que cambia ligeramente. Otras magnitudes más delicadas (tales como las diferencias de tensiones normales o el sexto cumulante) continúan siendo prácticamente idénticas en ambos sistemas si $\alpha \gtrsim 0.85$. Incluso al nivel de la función de distribución de velocidades, las curvas correspondientes a los sistemas IHS y EHS prácticamente se solapan para un coeficiente de restitución tan realista como $\alpha = 0.9$. Para $\alpha = 0.5$, sin embargo, las funciones de distribución $g_x^{(+)}(C_x)$ y $F(C)$ del gas IHS exhiben un exceso de población en la región de energía alta visiblemente mayor que el predicho por las correspondientes distribuciones del sistema EHS.

Como se dijo anteriormente, en el modelo EHS hemos escogido el coeficiente de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0 \propto nT^{1/2}(1 - \alpha^2)$, el cual es una funcional de la función de distribución f del gas IHS a través de la densidad y temperatura locales exclusivamente, siendo además explícita su dependencia en α . Puesto que la verdadera tasa de enfriamiento ζ del gas IHS es ligeramente mayor que la estimación dada por la aproximación de equilibrio local, es decir, $\zeta/\zeta_0 = \langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0 > 1$, la imitación de la tasa de enfriamiento inelástica por parte del sistema EHS no es perfecta. Por lo tanto, podría esperarse razonablemente que las discrepancias existentes entre los resultados proporcionados por los modelos IHS y EHS se mitigasen si tomásemos como coeficiente de fricción $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0 \langle V_{12}^3 \rangle / \langle V_{12}^3 \rangle_0$. Para confirmar esta suposición, hemos hecho simulaciones complementarias del sistema EHS con esta versión más refinada del coeficiente de fricción ξ en el caso de mayor disipación, es decir, $\alpha = 0.5$. Los resultados muestran que, allí donde el acuerdo inicial entre IHS y EHS era bueno, el nuevo acuerdo es generalmente mejor. Sin embargo, aquellas magnitudes (tales como la diferencia de tensiones normales $P_{zz} - P_{yy}$ o el sexto cumulante a_3) que resultan ser especialmente sensibles al mecanismo de disipación (inelasticidad de las colisiones frente a fricción externa) permanecen prácticamente inalteradas por la nueva elección de ξ . Además, las colas de velocidad alta de ambas versiones del gas EHS son prácticamente las mismas, siendo ambas también menores que la cola del sistema IHS. Por lo tanto, las discrepancias sutiles que existen entre los sistemas IHS y EHS en situaciones de disipación elevada (por ejemplo, $\alpha \lesssim 0.7$) parecen ser intrínsecas a sus diferentes dinámicas internas. Teniendo esto en cuenta, no hay ninguna razón práctica para proponer un nuevo coeficiente de fricción para la fuerza de fricción que actúa sobre el gas EHS diferente del dado por la aproximación de equilibrio local $\xi = \frac{1}{2}\zeta_0$. En lo que respecta al coeficiente $\beta(\alpha)$, la elección $\beta(\alpha) = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$ viene recomendada por criterios de simplicidad y consistencia con los casos de mezclas y gases densos, como se ha visto en los capítulos 2 y 3.

La equivalencia aproximada IHS \leftrightarrow EHS se puede usar para transferir al campo de los gases granulares parte de la experiencia acumulada sobre teoría cinética de partículas elásticas. En particular, como se ha dicho anteriormente, el

célebre modelo cinético BGK de la ecuación de Boltzmann puede ser extendido fácilmente a gases granulares (Brey, Dufty and Santos, 1999; Santos and Astillero, 2005). Aunque generalmente se ha creído que el modelo BGK sólo funcionaría bien para estados cercanos al equilibrio y/o en el límite cuasi elástico, nuestros resultados muestran que, a pesar de su simplicidad, el modelo captura cuantitativamente con éxito tanto la evolución como los valores correspondientes al estado estacionario de las principales propiedades de transporte (temperatura, tensión tangencial y la diferencia de tensiones normales $P_{xx} - P_{yy}$), incluido el cuarto cumulante a_2 . Sin embargo, el modelo BGK no es capaz de reproducir la diferencia $P_{zz} - P_{yy}$, que, aunque muy reducida, es distinta de cero. Además, el sexto cumulante a_3 está de acuerdo con los resultados de simulación solamente a un nivel cualitativo. Todo esto es consistente con el hecho de que la función de distribución correspondiente al modelo BGK es fiable en la región térmica ($C \lesssim 2$), pero no demasiado en el dominio de velocidades altas.

En resumen, las soluciones de las ecuaciones de Boltzmann para el gas IHS son muy parecidas a las del sistema EHS (en este último caso con una frecuencia de colisión menor y sometido a la acción de una fuerza de fricción adecuada). De esta manera, tanto la evolución temporal hacia el estado estacionario como las propiedades de éste último están gobernadas por el rasgo común a ambos sistemas constituido por la disipación de energía, siendo prácticamente independientes de la naturaleza detallada de dicho mecanismo. Únicamente para disipación elevada (por ejemplo, $\alpha \lesssim 0.7$) y para magnitudes que sondan el dominio de velocidades situado más allá de la región térmica, es donde el gas IHS imprime su huella característica, diferenciándose del sistema equivalente EHS.

De forma incipiente en el capítulo 4 y más extensa en el capítulo 5 hemos investigado si el escenario convencional de evolución hacia una descripción hidrodinámica sigue siendo aplicable a gases granulares con un alto grado de disipación, incluso si la descripción hidrodinámica es no newtoniana. Utilizando de nuevo el ejemplo del flujo tangencial uniforme, hemos observado que, en contra del excepticismo expresado por algunos autores (Kadanoff, 1999; Tan and Goldhirsch, 1998), una descripción hidrodinámica es generalmente válida para los gases granulares. De acuerdo con nuestros datos de simulación, la evolución hacia el estado estacionario tiene lugar en dos etapas. La primera etapa (cinética) depende en gran medida de la preparación inicial del sistema y tiene una duración aproximada de unas pocas colisiones por partícula. A esto le sigue una etapa hidrodinámica mucho más lenta que, a medida que pasa el tiempo, se va haciendo cada vez más independiente de las condiciones iniciales. Una vez escalada convenientemente con la velocidad térmica $v_0(t) = \sqrt{2T(t)/m}$, la función de distribución de velocidades en la etapa hidrodinámica depende del tiempo exclusivamente a través de la velocidad reducida $\mathbf{C}(t) = \mathbf{V}/v_0(t)$ y del gradiente de velocidad reducido $a^*(t) \propto a/\sqrt{T(t)}$. En particular, para un valor dado de α , la viscosidad tangencial no lineal (reducida) $\eta^*(a^*)$ se mueve sobre una cierta curva reológica, en la cual el valor correspondiente al estado estacionario $\eta_s^* = \eta^*(a_s^*)$ representa un único punto. Este punto divide la cur-

va $\eta^*(a^*)$ en dos ramas. La rama $a^* \leq a_s^*$ es accesible desde estados iniciales tales que el enfriamiento disipativo domina sobre el calentamiento viscoso, con lo cual, $T(t)$ disminuye y $a^*(t)$ aumenta durante la evolución. Alternativamente, la rama $a^* \geq a_s^*$ corresponde a estados iniciales donde el calentamiento viscoso prevalece, de modo que $T(t)$ aumenta y $a^*(t)$ disminuye, hasta llegar al estado estacionario.

7.3. Mezclas de Maxwell inelásticas (capítulo 6)

El objetivo principal de esta parte del trabajo ha sido obtener las ecuaciones hidrodinámicas de una mezcla binaria granular a partir de la teoría cinética de Boltzmann para modelos de Maxwell *inelásticos* (IMM). En la ecuación de Boltzmann para IMM, se reemplaza la frecuencia de colisión de IHS por una frecuencia de colisión efectiva independiente de la velocidad relativa de las dos partículas que van a colisionar. Al igual que en el caso elástico (Garzó and Santos, 2003), esta propiedad nos permite calcular de forma exacta los momentos de las integrales de colisión de Boltzmann sin el conocimiento explícito de la función de distribución de velocidades. Hemos aplicado el método de Chapman–Enskog para obtener una solución *normal* de la ecuación de Boltzmann para estados próximos al de enfriamiento homogéneo local. La obtención de las ecuaciones hidrodinámicas de Navier–Stokes consta de dos pasos. En primer lugar, se ha analizado el estado de enfriamiento homogéneo para una mezcla de gases de Maxwell inelásticos (estado de referencia) para proveer las bases adecuadas para la descripción del transporte asociado a las inhomogeneidades espaciales. Como sucede en el caso de IHS (Garzó and Dufty, 1999b), nuestra solución para el estado homogéneo evidencia que las temperaturas cinéticas para cada especie son manifiestamente diferentes, de modo que la energía total no se distribuye por igual entre ambas especies (ruptura de la equipartición de la energía). Además, hemos calculado también el cuarto cumulante de la función de distribución de velocidades de cada especie, el cual es una medida de la desviación respecto a la forma maxwelliana. Una vez que el estado de referencia se ha caracterizado bien, en segundo lugar hemos hallado las expresiones exactas para el flujo de masa, el tensor de presiones y el flujo de calor al primer orden en los gradientes hidrodinámicos (orden de Navier–Stokes). A partir de estas expresiones identificamos los siete coeficientes de transporte relevantes del problema, a saber, el coeficiente de autodifusión D , ecuación (6.59), el coeficiente de presión difusión D_p , ecuación (6.60), el coeficiente de difusión térmica D' , ecuación (6.61), la viscosidad tangencial η , ecuaciones (6.67) y (6.68), el coeficiente de Dufour D'' , el coeficiente de energía–presión L y la conductividad térmica λ dados por las ecuaciones (6.70)–(6.81), respectivamente. Estas expresiones son *exactas* (en el contexto de IMM) y conforman el objetivo principal de esta parte del trabajo. Esto contrasta con los resultados previos obtenidos para IHS (Garzó and Dufty, 2002; Garzó, Montanero and Dufty, 2006; Garzó and Montanero, 2007b), donde los coeficientes de transporte se obtuvieron de forma aproximada con-

siderando los primeros términos del desarrollo en serie de polinomios de Sonine de la función de distribución de velocidades.

La intención de este trabajo ha sido doble. Primero, la evaluación de los coeficientes de transporte para mezclas de IMM merece la pena por sí misma como una forma de resolver un modelo sencillo que puede arrojar bastante luz acerca de la influencia de la disipación colisional en las propiedades de transporte del sistema. En segundo lugar, la comparación entre los resultados exactos para IMM con los obtenidos para IHS utilizando métodos analíticos aproximados nos permite evaluar el grado de confianza del modelo IMM a la hora de reproducir el comportamiento relevante del IHS en el marco de las mezclas granulares. Resultados recientes (Garzó, 2003) obtenidos para sistemas multicomponentes en el flujo tangencial uniforme muestran un buen acuerdo entre ambos modelos de interacción para un amplio espectro de valores del espacio de parámetros.

Para comparar con los resultados obtenidos para IHS (Garzó and Dufty, 2002) necesitamos fijar las frecuencias de colisión ω_{ij} . Estas magnitudes podemos verlas como parámetros libres del modelo que deben ser ajustadas para optimizar el acuerdo con IHS. Al igual que en el estudio hecho en (Garzó, 2003), aquí hemos fijado ω_{ij} para que reproduzcan las tasas de enfriamiento ζ_{ij} del modelo IHS en la aproximación de equilibrio local, ecuación (6.15). Un análisis de la dependencia de los siete coeficientes de transporte con el espacio de parámetros completo (cociente de masas, diámetros, concentraciones, coeficientes de restitución) es posible pero quizás fuera del alcance de este estudio. Aquí, nos hemos centrado básicamente en la dependencia de los coeficientes D , D_p , D' y η del coeficiente de restitución común α para diferentes valores de la composición, tamaños y masas. En las figuras 6.3–6.8 hemos presentado la comparación con resultados conocidos de IHS (Garzó and Dufty, 2002; Montanero and Garzó, 2003b; Garzó and Montanero, 2004). Además, se han incluido también en algunas gráficas simulaciones de Monte Carlo. La comparación muestra que, en general, las predicciones del modelo IMM son razonablemente buenas en condiciones de disipación no demasiado intensa (por ejemplo, $\alpha \geq 0.8$), especialmente para los coeficientes de transporte asociados al flujo de masa (momento de la velocidad de primer grado). Las discrepancias entre ambos modelos de interacción aumentan en el caso de la viscosidad tangencial, que está relacionada con un momento de segundo grado (el tensor de presiones).

Finalmente es interesante indicar que los resultados obtenidos en este trabajo han sido utilizados (Garzó and Montanero, 2007a) para determinar las relaciones de dispersión de las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas en torno al estado de enfriamiento homogéneo (HCS) así como para evaluar la influencia de la disipación en la violación de las relaciones de reciprocidad de Onsager. Los resultados muestran un buen acuerdo con los obtenidos a partir del modelo IHS (Garzó, Montanero and Dufty, 2006).

Apéndice A

Momentos colisionales en el modelo de Maxwell inelástico

En este apéndice calculamos las integrales de colisión de $m_i \mathbf{V}$, $m_i \mathbf{V}\mathbf{V}$ y $m_i V^2 \mathbf{V}$ que aparecen en la determinación de los coeficientes de transporte de Navier–Stokes para IMM. Las dos primeras integrales fueron calculadas en un trabajo anterior (Garzó, 2003). Ahora, por consistencia, presentamos sus expresiones explícitas:

$$\int d\mathbf{v} m_i \mathbf{V} J_{ij}[f_i, f_j] = -\frac{w_{ij}}{\rho_j d} \mu_{ji} (1 + \alpha_{ij}) (\rho_j \mathbf{j}_i - \rho_i \mathbf{j}_j), \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{v} m_i \mathbf{V}\mathbf{V} J_{ij}[f_i, f_j] &= -\frac{w_{ij}}{\rho_j d} \mu_{ji} (1 + \alpha_{ij}) \{2\rho_j \mathbf{P}_i - (\mathbf{j}_i \mathbf{j}_j + \mathbf{j}_j \mathbf{j}_i) \\ &\quad - \frac{2}{d+2} \mu_{ji} (1 + \alpha_{ij}) [\rho_j \mathbf{P}_i + \rho_i \mathbf{P}_j - (\mathbf{j}_i \mathbf{j}_j + \mathbf{j}_j \mathbf{j}_i) \\ &\quad + \left[\frac{d}{2} (\rho_i p_j + \rho_j p_i) - \mathbf{j}_i \cdot \mathbf{j}_j \right] \mathbf{l} \} \}, \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

donde \mathbf{l} es la matriz unidad $d \times d$. Evaluemos ahora la integral de colisión \mathbf{Q}_{ij} correspondiente al flujo de calor:

$$\mathbf{Q}_{ij} \equiv \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} m_i V^2 \mathbf{V} J_{ij}[\mathbf{v}|f_i, f_j]. \quad (\text{A.3})$$

Para simplificar su cálculo utilizaremos la relación (3.15) para una función arbitraria $h(\mathbf{v})$, es decir,

$$\int d\mathbf{v}_1 h(\mathbf{v}_1) J_{ij}[\mathbf{v}_1 | f_i, f_j] = \frac{w_{ij}}{n_j \Omega_d} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 f_i(\mathbf{v}_1) f_j(\mathbf{v}_2) \times \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} [h(\mathbf{v}'_1) - h(\mathbf{v}_1)], \quad (\text{A.4})$$

con

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 - \mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})(\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (\text{A.5})$$

y $\mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$. Particularizamos ahora para $h(\mathbf{V}) = \frac{1}{2}m_i \mathbf{V}\mathbf{V}^2$. En este caso, usando (A.4) se tiene

$$\mathbf{Q}_{ij} = \frac{w_{ij}}{n_j \Omega_d} \frac{m_i}{2} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 f_i(\mathbf{v}_1) f_j(\mathbf{v}_2) \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \left(V_1'^2 \mathbf{V}'_1 - V_1^2 \mathbf{V}_1 \right). \quad (\text{A.6})$$

A partir de la regla de colisión (A.5) obtenemos que

$$\begin{aligned} V_1'^2 \mathbf{V}'_1 - V_1^2 \mathbf{V}_1 &= -\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g}) \\ &\times \left\{ [V_1^2 - 2\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{V}_1) \right. \\ &+ \mu_{ji}^2(1 + \alpha_{ij})^2(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g})^2] \hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ &\left. + [2(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{V}_1) - \mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g})] \mathbf{V}_1 \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Para efectuar la integración angular haremos uso de los resultados

$$\int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g})^k \hat{\boldsymbol{\sigma}} = B_{k+1} g^{k-1} \mathbf{g}, \quad (\text{A.8})$$

$$\int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g})^k \hat{\boldsymbol{\sigma}} \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{B_k}{k+d} g^{k-2} (k\mathbf{g}\mathbf{g} + g^2 \mathbf{l}), \quad (\text{A.9})$$

donde (Ernst and Brito, 2002b)

$$B_k = \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{g}})^k = \Omega_d \pi^{-1/2} \frac{\Gamma(\frac{d}{2}) \Gamma(\frac{k+1}{2})}{\Gamma(\frac{k+d}{2})}. \quad (\text{A.10})$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones (A.7)–(A.10), la integración para $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ en la ecuación (A.6) conduce a

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}_{ij} &= -\frac{w_{ij}}{n_j d(d+2)} \frac{m_i}{2} \mu_{ji} (1 + \alpha_{ij}) \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 f_i(\mathbf{v}_1) f_j(\mathbf{v}_2) \\
&\times [(d+2)V_1^2 \mathbf{g} - 4\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) (\mathbf{g} \cdot \mathbf{V}_1) \mathbf{g} \\
&- (d+4)\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) g^2 \mathbf{V}_1 \\
&+ 3\mu_{ji}^2 (1 + \alpha_{ij})^2 g^2 \mathbf{g} + 2(d+2) (\mathbf{g} \cdot \mathbf{V}_1) \mathbf{V}_1]. \quad (\text{A.11})
\end{aligned}$$

Las integraciones correspondientes para la velocidad originan las relaciones

$$\int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \frac{m_i}{2} V_1^2 \mathbf{g} f_i(\mathbf{v}_1) f_j(\mathbf{v}_2) = n_j \mathbf{q}_i - \frac{d}{2m_j} p_i \mathbf{j}_j, \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned}
\int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \frac{m_i}{2} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{V}_1) \mathbf{g} f_i(\mathbf{v}_1) f_j(\mathbf{v}_2) &= n_j \mathbf{q}_i - \frac{1}{2m_j} (dp_i \mathbf{j}_j \\
&+ \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{j}_j - \mathbf{P}_j \cdot \mathbf{j}_i), \quad (\text{A.13})
\end{aligned}$$

$$\int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \frac{m_i}{2} g^2 \mathbf{V}_1 f_i(\mathbf{v}_1) f_j(\mathbf{v}_2) = n_j \mathbf{q}_i + \frac{1}{2m_j} (dp_j \mathbf{j}_i - 2\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{j}_j), \quad (\text{A.14})$$

$$\int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \frac{m_i}{2} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{V}_1) \mathbf{V}_1 f_i(\mathbf{v}_1) f_j(\mathbf{v}_2) = n_j \mathbf{q}_i - \frac{1}{2m_j} \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{j}_j, \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned}
\int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \frac{m_i}{2} g^2 \mathbf{g} f_i(\mathbf{v}_1) f_j(\mathbf{v}_2) &= n_j \mathbf{q}_i - \frac{m_i}{m_j} n_i \mathbf{q}_i \\
&- \frac{1}{2m_j} (dp_i \mathbf{j}_j - dp_j \mathbf{j}_i \\
&+ 2\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{j}_j - 2\mathbf{P}_j \cdot \mathbf{j}_i). \quad (\text{A.16})
\end{aligned}$$

A partir de las ecuaciones (A.12)–(A.15) obtenemos finalmente la expresión de \mathbf{Q}_{ij} :

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}_{ij} = & \frac{\omega_{ij}}{\rho_j} \frac{\mu_{ji}}{d(d+2)} (1 + \alpha_{ji}) \{ [\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) \\
& \times (d + 8 - 3\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})) - 3(d + 2)] \rho_j \mathbf{q}_i \\
& + 3\mu_{ji}^2 (1 + \alpha_{ji})^2 \rho_i \mathbf{q}_j + \frac{d}{2} [\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) \\
& \times (3\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) - 4) + d + 2] p_i \mathbf{j}_j \\
& + \frac{d}{2} \mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) [d + 4 - 3\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})] p_j \mathbf{j}_i \\
& + [\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) (3\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) - (d + 6)) + d + 2] P_i \cdot \mathbf{j}_j \\
& + \mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) [2 - 3\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})] P_j \cdot \mathbf{j}_i \}, \tag{A.17}
\end{aligned}$$

donde $p_i = n_i T_i$. En ausencia de difusión y para partículas mecánicamente equivalentes, el momento colisional \mathbf{Q}_{ij} se reduce a

$$\mathbf{Q}_{ij} \equiv \mathbf{Q} = -\omega \frac{(d-1)}{d(d+2)} (1 + \alpha) \left[1 + \frac{d+8}{d-1} \frac{1-\alpha}{4} \right] \mathbf{q}. \tag{A.18}$$

Esta expresión coincide con la obtenida previamente en el caso monocomponente (Santos, 2003).

Finalmente, evaluemos la integral de colisión (6.31) de v^4 en el estado de enfriamiento homogéneo (HCS):

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ij} & \equiv \int d\mathbf{v}^* v^{*4} J_{ij}^* [f_i^*, f_j^*] \\
& = \frac{\omega_{ij}^*}{\Omega_d} \int d\mathbf{v}_2^* \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} f_i^*(v_1^*) f_j^*(v_2^*) (v_1'^{*4} - v_1^{*4}), \tag{A.19}
\end{aligned}$$

donde hemos utilizado la propiedad (A.4). De aquí en adelante, usaremos magnitudes adimensionales, y por simplicidad, eliminaremos los asteriscos. La regla de colisión (A.5) da el resultado

$$\begin{aligned}
v_1'^4 - v_1^4 = & 2\mu_{ji}^2 (1 + \alpha_{ij})^2 (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g})^2 \\
& \times \left[2(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_1)^2 + v_1^2 + \frac{\mu_{ji}^2}{2} (1 + \alpha_{ij})^2 (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g})^2 \right] \\
& - 4\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_1) \\
& \times [v_1^2 + \mu_{ji}^2 (1 + \alpha_{ij})^2 (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{g})^2]. \tag{A.20}
\end{aligned}$$

Las ecuaciones (A.8)–(A.10) permiten resolver la integral angular, con el resultado

$$\begin{aligned}
\int d\widehat{\boldsymbol{\sigma}} (v_1^4 - v_1^4) &= \frac{4B_2}{d+2} \mu_{ji}^2 (1 + \alpha_{ij})^2 \\
&\times \left[2(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{g})^2 + \frac{d+4}{2} g^2 v_1^2 + \frac{3}{4} \mu_{ji}^2 (1 + \alpha_{ij})^2 g^4 \right] \\
&- \frac{4B_2}{d+2} \mu_{ji} (1 + \alpha_{ij}) (\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{g}) \\
&\times \left[(d+2)v_1^2 + 3 \mu_{ji}^2 (1 + \alpha_{ij})^2 g^2 \right]. \tag{A.21}
\end{aligned}$$

Por tanto, la integral de colisión Λ_{ij} se puede escribir como

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ij} &= \frac{\omega_{ij}}{\Omega_d} B_2 \mu_{ji}^2 (1 + \alpha_{ij})^2 \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 f_i^*(v_1) f_j^*(v_2) \\
&\times \left\{ \frac{1}{d+2} [2(d+8) - 12\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) \right. \\
&\quad \left. + 3\mu_{ji}^2(1 + \alpha_{ij})^2 - \frac{4(d+2)}{\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})}] v_1^4 \right. \\
&\quad \left. + 3 \frac{\mu_{ji}^2(1 + \alpha_{ij})^2}{d+2} v_2^4 + \frac{2}{d} [d+2 \right. \\
&\quad \left. - 6\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) + 3\mu_{ji}^2(1 + \alpha_{ij})^2] v_1^2 v_2^2 \right\}. \tag{A.22}
\end{aligned}$$

Por último, teniendo en cuenta que

$$\int d\mathbf{v} v^2 f_i^*(v) = \frac{d}{2} \theta_i^{-1}, \tag{A.23}$$

obtenemos

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ij} &= \frac{\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij})}{d(d+2)} \omega_{ij}^* \{ 3\mu_{ji}^3(1 + \alpha_{ij})^3 \langle v^{*4} \rangle_j \\
&\quad + [2d + 3\mu_{ji}^2(1 + \alpha_{ij})^2 - 6\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) + 4] \\
&\quad \times [\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) - 2] \langle v^{*4} \rangle_i \\
&\quad + \frac{d(d+2)}{4} \mu_{ji} \theta_i^{-1} \theta_j^1 (1 + \alpha_{ij}) [2d + 4 + 6\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) \\
&\quad \times (\mu_{ji}(1 + \alpha_{ij}) - 2)] \}. \tag{A.24}
\end{aligned}$$

En el caso unidimensional ($d = 1$), la ecuación (A.24) concuerda con los resultados obtenidos en la referencia (Marconi and Puglisi, 2002a) para el modelo de Maxwell escalar (es decir, con $\omega_{ij}^* \propto x_j$). Además, para partículas mecánicamente equivalentes, se recuperan los resultados del gas monocomponente, es decir, (Santos, 2003),

$$\begin{aligned} \Lambda_{ij} \equiv \Lambda &= \frac{\omega^*}{32d(d+2)}(1+\alpha) \left\{ [12\alpha^2(\alpha-1) + 4\alpha(4d+17) - 12(3+4d)] \langle v^4 \rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{d(d+2)}{4}(1+\alpha)(4d-1-6\alpha+3\alpha^2) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Apéndice B

Obtención de los coeficientes de transporte de Navier–Stokes en el modelo de Maxwell inelástico

En este apéndice presentamos algunos detalles del cálculo de los coeficientes de transporte de Navier–Stokes que aparecen en las expresiones (6.34)–(6.36) de los flujos irreversibles. Consideremos cada flujo separadamente.

B.1. Flujo de masa

A primer orden, se define el flujo de masa $\mathbf{j}_1^{(1)}$ como

$$\mathbf{j}_1^{(1)} = m_1 \int d\mathbf{v} \mathbf{V} f_1^{(1)}(\mathbf{v}). \quad (\text{B.1})$$

Para obtener este flujo a partir de la ecuación (6.54), necesitamos la integral de colisión de $m_1 \mathbf{V}$ que se ha evaluado en el apéndice A. A partir de la linealización de la ecuación (A.1), tenemos el resultado

$$\int d\mathbf{v} m_1 \mathbf{V} \left(\mathcal{L}_1 f_1^{(1)} + \mathcal{M}_1 f_2^{(1)} \right) = \nu \mathbf{j}_1^{(1)}, \quad (\text{B.2})$$

donde ν es la frecuencia de colisión dada por la ecuación (6.62), en la que hemos empleado (6.16) en la segunda igualdad. A continuación, multiplicamos ambos miembros de la ecuación (6.54) por $m_1 \mathbf{V}$ e integramos para \mathbf{V} . El resultado es

$$\left(\partial_t^{(0)} + \nu\right) \mathbf{j}_1^{(1)} = -p \left(\frac{\partial}{\partial x_1} x_1 \gamma_1 \right)_{p,T} \nabla x_1 - \frac{n_1 T_1}{p} \left(1 - \frac{m_1 p}{\rho T_1} \right) \nabla p. \quad (\text{B.3})$$

Observemos que el cociente de temperaturas γ_1 depende del estado hidrodinámico a través de la concentración x_1 . La dependencia funcional de γ_1 de x_1 se puede obtener a partir de la condición del estado de enfriamiento homogéneo (6.23) haciendo uso de las expresiones (6.21) para las tasas de enfriamiento parciales $\zeta_i^{(0)}$.

El flujo de masa tiene la estructura dada por la ecuación (6.34). Consideraciones de análisis dimensional llevan a que $D \propto T^{1/2}$, $D_p \propto T^{1/2}/p$ y $D' \propto T^{1/2}$. Consecuentemente,

$$\begin{aligned} \partial_t^{(0)} \mathbf{j}_1^{(1)} &= -\zeta^{(0)} (T \partial_T + p \partial_p) \mathbf{j}_1^{(1)} \\ &= \left[\frac{m_1 m_2 n}{2\rho} \zeta^{(0)} D + \rho (D_p + D') \left(\frac{\partial \zeta^{(0)}}{\partial x_1} \right)_{p,T} \right] \nabla x_1 \\ &\quad + \frac{\rho \zeta^{(0)}}{p} \left(\frac{3}{2} D_p + D' \right) \nabla p - \frac{\rho \zeta^{(0)}}{2T} D_p \nabla T. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Para obtener esta expresión hemos empleado las identidades

$$\begin{aligned} \partial_t^{(0)} \nabla T &= -\nabla (T \zeta^{(0)}) = -\zeta^{(0)} \nabla T - T \nabla \zeta^{(0)} \\ &= -\frac{\zeta^{(0)}}{2} \nabla T - T \left[\left(\frac{\partial \zeta^{(0)}}{\partial x_1} \right)_{p,T} \nabla x_1 + \frac{\zeta^{(0)}}{p} \nabla p \right], \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} \partial_t^{(0)} \nabla p &= -\nabla (p \zeta^{(0)}) = -\zeta^{(0)} \nabla p - p \nabla \zeta^{(0)} \\ &= -2\zeta^{(0)} \nabla p - p \left[\left(\frac{\partial \zeta^{(0)}}{\partial x_1} \right)_{p,T} \nabla x_1 - \frac{\zeta^{(0)}}{2T} \nabla T \right], \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

donde hemos tenido en cuenta que

$$\begin{aligned}
\nabla\zeta^{(0)} &= \left(\frac{\partial\zeta^{(0)}}{\partial x_1}\right)_{p,T} \nabla x_1 + \left(\frac{\partial\zeta^{(0)}}{\partial p}\right)_{x_1,T} \nabla p + \left(\frac{\partial\zeta^{(0)}}{\partial T}\right)_{x_1,p} \nabla T \\
&= \left(\frac{\partial\zeta^{(0)}}{\partial x_1}\right)_{p,T} \nabla x_1 + \frac{\zeta^{(0)}}{p} \nabla p - \frac{\zeta^{(0)}}{2T} \nabla T,
\end{aligned} \tag{B.7}$$

proviendo los dos últimos términos de que $\zeta^{(0)} \propto nT^{1/2} = pT^{-1/2}$. Insertando la ecuación (B.4) en la (B.3), obtenemos las expresiones (6.59), (6.60) y (6.61) para los coeficientes D , D_p y D' , respectivamente.

B.2. Tensor de presiones

El tensor de presiones $\mathbf{P}^{(1)}$ se puede escribir como

$$\mathbf{P}^{(1)} = \mathbf{P}_1^{(1)} + \mathbf{P}_2^{(1)}, \tag{B.8}$$

donde la contribución parcial $\mathbf{P}_i^{(1)}$ al tensor de presiones es

$$\mathbf{P}_i^{(1)} = m_i \int d\mathbf{v} \mathbf{V} \mathbf{V} f_i^{(1)}(\mathbf{v}). \tag{B.9}$$

La linealización de la ecuación (A.2) conduce a la siguiente expresión para la integral de colisión de $m_1 \mathbf{V} \mathbf{V}$:

$$\int d\mathbf{v} m_1 \mathbf{V} \mathbf{V} \left(\mathcal{L}_1 f_1^{(1)} + \mathcal{M}_1 f_2^{(1)} \right) = \tau_{11} \mathbf{P}_1^{(1)} + \tau_{12} \mathbf{P}_2^{(1)}, \tag{B.10}$$

donde

$$\begin{aligned}
\tau_{11} &= \frac{\omega_{11}}{d(d+2)} (1 + \alpha_{11})(d + 1 - \alpha_{11}) \\
&\quad + 2 \frac{\omega_{12}}{d} \mu_{21} (1 + \alpha_{12}) \left[1 - \frac{\mu_{21}(1 + \alpha_{12})}{d+2} \right],
\end{aligned} \tag{B.11}$$

$$\tau_{12} = -2 \frac{\omega_{12}}{d(d+2)} \frac{\rho_1}{\rho_2} \mu_{21}^2 (1 + \alpha_{12})^2. \tag{B.12}$$

Ahora, multiplicamos ambos miembros de la ecuación (6.54) (con $i = 1$) por $m_1 \mathbf{V} \mathbf{V}$ e integramos respecto a \mathbf{V} para obtener

$$\left(\partial_t^{(0)} + \tau_{11}\right) P_{1,\alpha\beta}^{(1)} + \tau_{12} P_{2,\alpha\beta}^{(1)} = -p_1 \Delta_{\alpha\beta k\ell} \nabla_k u_\ell, \quad (\text{B.13})$$

donde $p_1 = n_1 T_1$ y

$$\Delta_{\alpha\beta k\ell} \equiv \delta_{\alpha k} \delta_{\beta \ell} + \delta_{\alpha \ell} \delta_{\beta k} - \frac{2}{d} \delta_{\alpha\beta} \delta_{k\ell}. \quad (\text{B.14})$$

Se puede obtener una ecuación similar para $P_2^{(1)}$ a partir de (B.13) haciendo el cambio $1 \leftrightarrow 2$. La solución de la ecuación (B.13) (y su homóloga correspondiente) tiene la forma

$$P_{i,\alpha\beta}^{(1)} = -\eta_i \Delta_{\alpha\beta k\ell} \nabla_k u_\ell. \quad (\text{B.15})$$

De acuerdo con la ecuación (6.36), la viscosidad tangencial η se da en términos de los coeficientes η_i mediante la ecuación (6.67). Consideraciones de análisis dimensional exigen que $\eta_i \propto T^{1/2}$, y por tanto,

$$\partial_t^{(0)} P_i^{(1)} = -\frac{\zeta^{(0)}}{2} P_i^{(1)}. \quad (\text{B.16})$$

La inserción de esta relación en la ecuación (B.13) da lugar al siguiente sistema de ecuaciones acopladas para los dos coeficientes η_i :

$$\begin{pmatrix} \tau_{11} - \frac{1}{2}\zeta^{(0)} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} - \frac{1}{2}\zeta^{(0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.17})$$

Su solución está dada por la ecuación (6.68).

B.3. Flujo de calor

El flujo de calor $\mathbf{q}^{(1)}$ se puede escribir como

$$\mathbf{q}^{(1)} = \mathbf{q}_1^{(1)} + \mathbf{q}_2^{(1)}, \quad (\text{B.18})$$

donde la contribución parcial $\mathbf{q}_i^{(1)}$ está dada por

$$\mathbf{q}_i^{(1)} = \frac{m_i}{2} \int d\mathbf{v} V^2 \mathbf{V} f_i^{(1)}(\mathbf{v}). \quad (\text{B.19})$$

Para obtener las expresiones explícitas de los flujos $\mathbf{q}_i^{(1)}$ procedemos de forma similar a como hicimos en el caso del tensor de presiones. En primer lugar, la linealización de la ecuación (A.17) nos lleva a

$$\int d\mathbf{v} \frac{m_1}{2} V^2 \mathbf{V} \left(\mathcal{L}_1 f_1^{(1)} + \mathcal{M}_1 f_2^{(1)} \right) = \beta_{11} \mathbf{q}_1^{(1)} + \beta_{12} \mathbf{q}_2^{(1)} + A_{12} \mathbf{j}_1^{(1)}, \quad (\text{B.20})$$

donde

$$\begin{aligned} \beta_{11} = & -\frac{\omega_{11}}{4} \frac{(1 + \alpha_{11})}{d(d+2)} [\alpha_{11}(d+8) - 5d - 4] - \omega_{12} \mu_{21} \frac{(1 + \alpha_{12})}{d(d+2)} \\ & \times \{ \mu_{21}(1 + \alpha_{12}) [d + 8 - 3\mu_{21}(1 + \alpha_{12})] - 3(d+2) \}, \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

$$\beta_{12} = -3\omega_{12} \mu_{21}^3 \frac{(1 + \alpha_{12})^3}{d(d+2)} \frac{\rho_1}{\rho_2}, \quad (\text{B.22})$$

$$\begin{aligned} A_{12} = & -\frac{\omega_{11}}{8} \frac{(1 + \alpha_{11})}{d(d+2)} [\alpha_{11}(d^2 - 2d - 8) + 3d(d+2)] \frac{T_1}{m_1} \\ & - \frac{\omega_{12}}{2} \mu_{21} \frac{(1 + \alpha_{12})}{d} \\ & \times \left\{ \mu_{21}(1 + \alpha_{12}) [d - 3\mu_{21}(1 + \alpha_{12}) + 2] \frac{T_2}{m_2} \right. \\ & \left. - \frac{x_1}{x_2} [d + 3\mu_{21}^2(1 + \alpha_{12})^2 - 6\mu_{21}(1 + \alpha_{12}) + 2] \frac{T_1}{m_2} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Para obtener la ecuación (B.20) hemos hecho uso de la relación $\mathbf{j}_1^{(1)} = -\mathbf{j}_2^{(1)}$. Las expresiones correspondientes para β_{22} , β_{21} y A_{21} se pueden obtener a partir de las ecuaciones (B.21)–(B.23) teniendo en cuenta el intercambio $1 \leftrightarrow 2$. A partir de la ecuación (6.54), obtenemos

$$\begin{aligned} \left(\partial_t^{(0)} + \beta_{11} \right) \mathbf{q}_1^{(1)} + \beta_{12} \mathbf{q}_2^{(1)} = & -A_{12} \mathbf{j}_1^{(1)} \\ & - \frac{d+2}{2} \frac{nT^2}{m_1} \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\left(1 + \frac{c_1}{2} \right) x_1 \gamma_1^2 \right] \nabla x_1 \\ & - \frac{d+2}{2} \frac{n_1 T_1^2}{m_1 p} \left(1 - \frac{m_1 p}{\rho T_1} + \frac{c_1}{2} \right) \nabla p \\ & - \frac{d+2}{2} \frac{n_1 T_1^2}{m_1 T} \left(1 + \frac{c_1}{2} \right) \nabla T, \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

donde los cumulantes c_i , definidos por la ecuación (6.28), se han obtenido en la sección 6.3.

La solución de la ecuación (B.24) se puede escribir como

$$\mathbf{q}_i^{(1)} = -T^2 D_i'' \nabla x_1 - L_i \nabla p - \lambda_i \nabla T. \quad (\text{B.25})$$

El flujo de calor total define los coeficientes de transporte D'' , L y λ a través de la ecuación (6.35). De acuerdo con las ecuaciones (B.18) y (B.25), estos coeficientes de transporte están dados en términos de sus contribuciones parciales D_i'' , L_i y λ_i por la ecuación (6.70).

A partir de consideraciones de análisis dimensional, $D_i'' \propto T^{-1/2}$, $L_i \propto T^{3/2}/p$ y $\lambda_i \propto T^{1/2}$. Consecuentemente,

$$\begin{aligned} \partial_t^{(0)} \mathbf{q}_i^{(1)} = & \left[\frac{3}{2} \zeta^{(0)} T^2 D_i'' + \left(\frac{\partial \zeta^{(0)}}{\partial x_1} \right)_{p,T} (pL_i + T\lambda_i) \right] \nabla x_1 \\ & + \zeta^{(0)} \left(\frac{5}{2} L_i + \frac{T\lambda_i}{p} \right) \nabla p + \zeta^{(0)} \left(\lambda_i - \frac{pL_i}{2T} \right) \nabla T. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Sustituyendo la ecuación (B.26) en la (B.24) y teniendo en cuenta la expresión (6.34) para el flujo de masa, llegamos al sistema de ecuaciones acopladas (6.72) para las contribuciones parciales D_i'' , L_i y λ_i .

Publicaciones

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

- Astillero, A. and A. Santos. 2004. “A granular fluid modeled as a driven system of elastic hard spheres.” *The Physics of Complex Systems. New Advances and Perspectives* pp. 475–480. edited by F. Mallamace and H. E. Stanley (IOS Press, Amsterdam, 2004).
- Garzó, V. and A. Astillero. 2005. “Transport coefficients for inelastic Maxwell mixtures.” *J. Stat. Phys.* 118:935–971.
- Santos, A. and A. Astillero. 2005. “System of elastic hard spheres which mimics the transport properties of a granular gas.” *Phys. Rev. E* 72:031308–1–19.
- Astillero, A. and A. Santos. 2005. “Uniform shear flow in dissipative gases: computer simulations of inelastic hard spheres and frictional elastic hard spheres.” *Phys. Rev. E* 72:031309–1–20.
- Astillero, A. and A. Santos. 2007. “Aging to non-Newtonian hydrodynamics in a granular gas.” *Europhys. Lett.* (aceptado). cond-mat/0612394.
- Astillero, A. and A. Santos. 2007. “Unsteady hydrodynamic behaviour of a sheared granular gas.” (en preparación).

Bibliografía

- Alam, M. and S. Luding. 2003a. “First normal stress difference and crystallization in a dense sheared granular fluid.” *Phys. Fluids* 15:2298–2312.
- Alam, M. and S. Luding. 2003b. “Rheology of bidisperse granular mixtures via event-driven simulations.” *J. Fluid Mech.* 476:69–103.
- Alexander, F. J. and A. L. Garcia. 1997. “The direct simulation Monte Carlo method.” *Computers in Physics* 11(6):588–595.
- Andries, P., K. Aoki and B. Perthame. 2002. “A consistent BGK-type model for gas mixtures.” *J. Stat. Phys.* 106:993–1018.
- Astillero, A. and A. Santos. 2004. “A granular fluid modeled as a driven system of elastic hard spheres.” *The Physics of Complex Systems. New Advances and Perspectives* pp. 475–480. edited by F. Mallamace and H. E. Stanley, IOS Press, Amsterdam.
- Astillero, A. and A. Santos. 2005. “Uniform shear flow in dissipative gases: Computer simulations of inelastic hard spheres and frictional elastic hard spheres.” *Phys. Rev. E* 72:031309–1–20.
- Astillero, A. and A. Santos. 2007a. “Aging to non-Newtonian hydrodynamics in a granular gas.” a publicar en *Europhys. Lett.*, arXiv:cond-mat/0612394.
- Astillero, A. and A. Santos. 2007b. “Unsteady hydrodynamic behavior of a sheared granular gas.” En preparación.
- Baldassarri, A., U. Marini Bettolo Marconi and A. Puglisi. 2002. “Influence of correlations on the velocity statistics of scalar granular gases.” *Europhys. Lett.* 58:14–20.
- Barrat, A. and E. Trizac. 2002. “Lack of energy equipartition in homogeneous heated binary granular mixtures.” *Granular Matter* 4:57–63.
- Barrat, A., E. Trizac and M. H. Ernst. 2005. “Granular gases: dynamics and collective effects.” *J. Phys.: Condens. Matter* 17:S2429–S2437.

- Ben-Naim, E. and P. L. Krapivsky. 2000. “Multiscaling in inelastic collisions.” *Phys. Rev. E* 61:R5–R8.
- Ben-Naim, E. and P. L. Krapivsky. 2002. “Impurity in a granular fluid.” *Eur. Phys. J. E* 8:507–515.
- Bhatnagar, P. L., E. P. Gross and M. Krook. 1954. “A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems.” *Phys. Rev.* 94:511–525.
- Bird, G. A. 1994. *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Oxford Science Publications, Oxford.
- Bobylev, A. V. and C. Cercignani. 2002. “Moment equations for a granular material in a thermal bath.” *J. Stat. Phys.* 106:547–567.
- Bobylev, A. V. and C. Cercignani. 2003. “Self-similar asymptotics for the Boltzmann equation with inelastic and elastic interactions.” *J. Stat. Phys.* 110:333–375.
- Bobylev, A. V., C. Cercignani and G. Toscani. 2003. “Proof of an asymptotic property of self-similar solutions of the Boltzmann equation for granular materials.” *J. Stat. Phys.* 111:403–416.
- Bobylev, A. V. and I. M. Gamba. 2006. “Boltzmann equations for mixtures of Maxwell gases: exact solutions and power like tails.” *J. Stat. Phys.* 124:497–516.
- Bobylev, A. V., I. M. Gamba and V. A. Panferov. 2004. “Moment inequalities and high-energy tails for Boltzmann equations with inelastic interactions.” *J. Stat. Phys.* 116:1651–1682.
- Bobylev, A. V., J. A. Carrillo and I. M. Gamba. 2000. “On some properties of kinetic and hydrodynamic equations for inelastic interactions.” *J. Stat. Phys.* 98:743–773.
- Bobylev, A. V., M. Groppi and G. Spiga. 2002. “Approximate solutions to the problem of stationary shear flow of smooth granular materials.” *Eur. J. Mech. B/Fluids* 21:91–103.
- Brey, J. J. 2003. “Teoría cinética de los medios granulares.” *Revista Española de Física* 17(5):58–18.
- Brey, J. J. and D. Cubero. 2001. “Hydrodynamic transport coefficients of granular gases.” in *Granular Gases*, edited by T. Poschel and S. Luding, *Lecture Notes in Physics* 564:59–78. Springer-Verlag, Berlín.
- Brey, J. J., F. Moreno and J. W. Dufty. 1996. “Model kinetic equation for low-density granular flow.” *Phys. Rev. E* 54:445–456.

- Brey, J. J. and J. W. Dufty. 2005. “Hydrodynamic modes for a granular gas from kinetic theory.” *Phys. Rev. E* 72:011303–1–16.
- Brey, J. J., J. W. Dufty and A. Santos. 1997. “Dissipative dynamics for hard spheres.” *J. Stat. Phys.* 87:1051–1166.
- Brey, J. J., J. W. Dufty and A. Santos. 1999. “Kinetic models for granular flow.” *J. Stat. Phys.* 97:281–322.
- Brey, J. J., J. W. Dufty, C. S. Kim and A. Santos. 1998. “Hydrodynamics for granular flow at low density.” *Phys. Rev. E* 58:4638–4653.
- Brey, J. J. and M. J. Ruiz-Montero. 2004. “Simulation study of the Green–Kubo relations for dilute granular gases.” *Phys. Rev. E* 70:051301–1–10.
- Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero and D. Cubero. 1996. “Homogeneous cooling state of a low–density granular flow.” *Phys. Rev. E* 54:3664–3671.
- Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero and D. Cubero. 1999. “Origin of density clustering in a freely evolving granular gas.” *Phys. Rev. E* 60:3150–3157.
- Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero, D. Cubero and R. García-Rojo. 2000. “Self-diffusion in freely evolving granular gases.” *Phys. Fluids* 12:876–883.
- Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero and F. Moreno. 1997. “Steady uniform shear flow in a low density granular gas.” *Phys. Rev. E* 55:2846–2856.
- Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero and F. Moreno. 2001. “Hydrodynamics of an open vibrated granular system.” *Phys. Rev. E* 63:061305–1–10.
- Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero and F. Moreno. 2005. “Energy partition and segregation for an intruder in a vibrated granular system under gravity.” *Phys. Rev. Lett.* 95:098001–1–4.
- Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero, M. J. Moreno and R. García-Rojo. 2002. “Transversal inhomogeneities in dilute vibrofluidized granular fluids.” *Phys. Rev. E* 65:061302–1–10.
- Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero, P. Maynar and M. I. García de Soria. 2005. “Hydrodynamic modes, Green–Kubo relations, and velocity correlations in dilute granular gases.” *J. Phys.: Condens. Matter* 17:S2489–S2502.
- Brilliantov, N. V. and T. Poschel. 2004. *Kinetic theory of granular gases*. Oxford University Press, Oxford.
- Brilliantov, N. V. and T. Poschel. 2006. “Breakdown of the Sonine expansion for the velocity distribution of granular gases.” *Europhys. Lett.* 74:424–430.
- Brito, R. and M. H. Ernst. 2003. *Advances in Condensed Matter and Statistical Physics*. Nova Science Publishers, Nueva York chapter Anomalous velocity distributions in inelastic Maxwell gases. E. Korutcheva and R. Cuerno (eds.).

- Campbell, C. S. 1989. "The stress tensor for simple shear flows of a granular material." *J. Fluid Mech.* 203:449–473.
- Campbell, C. S. 1990. "Rapid granular flows." *Annu. Rev. Fluid Mech.* 22:57–92.
- Campbell, C. S. and A. Gong. 1986. "The stress tensor in a two-dimensional granular shear flow." *J. Fluid Mech.* 164:107–125.
- Carrillo, J. A., C. Cercignani and I. M. Gamba. 2000. "Steady states of a Boltzmann equation for driven granular media." *Phys. Rev. E* 62:7700–7707.
- Cercignani, C. 1988. *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Springer-Verlag, New York.
- Cercignani, C. 2001. "Shear flow of a granular fluid." *J. Stat. Phys.* 102:1407–1415.
- Chapman, S. and T. G. Cowling. 1970. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Coppex, F., M. Droz, J. Piasecki and E. Trizac. 2003. "On the first Sonine correction for granular gases." *Physica A* 329:114–126.
- Dahl, S., C. Hrenya, V. Garzó and J. W. Dufty. 2002. "Kinetic temperatures for a granular mixture." *Phys. Rev. E* 66:041301–1–10.
- de Groot, S. R. and P. Mazur. 1984. *Nonequilibrium Thermodynamics*. Dover, New York.
- Dorfman, J. R. and H. van Beijeren. 1977. *Statistical Mechanics part B: time-dependent processes*. Plenum Press, New York chapter The kinetic theory of gases, pp. 65–179. B. J. Berne (ed.).
- Dufty, J. W., A. Baskaran and L. Zogaib. 2004. "Gaussian kinetic model for granular gases." *Phys. Rev. E* 69:051301–051322.
- Dufty, J. W., A. Santos and J. J. Brey. 1996. "Practical kinetic model for hard sphere dynamics." *Phys. Rev. Lett.* 77:1270–1273.
- Dufty, J. W., A. Santos, J. J. Brey and R. F. Rodríguez. 1986. "Model for nonequilibrium computer simulation methods." *Phys. Rev. A* 33:459–466.
- Dufty, J. W. and J. J. Brey. 1999. "Comment on "Rapid granular flows as mesoscopic systems"." *Phys. Rev. Lett.* 82:4566–4566.
- Dufty, J. W., J. J. Brey and A. Santos. 1997. "Kinetic models for hard sphere dynamics." *Physica A* 240:212–220.
- Dufty, J. W. and V. Garzó. 2001. "Mobility and diffusion in granular fluids." *J. Stat. Phys.* 105:723–744.

- Ernst, M. H., E. Trizac and A. Barrat. 2006a. “The Boltzmann equation for driven systems of inelastic soft spheres.” *J. Stat. Phys.* 124:549–586.
- Ernst, M. H., E. Trizac and A. Barrat. 2006b. “The rich behavior of the Boltzmann equation for dissipative gases.” *Europhys. Lett.* 76:56–62.
- Ernst, M. H. and R. Brito. 2002a. “Driven inelastic Maxwell models with high energy tails.” *Phys. Rev. E* 65:040301–1–4.
- Ernst, M. H. and R. Brito. 2002b. “Scaling solutions of inelastic Boltzmann equations with over-populated high energy tails.” *J. Stat. Phys.* 109:407–432.
- Feitosa, K. and N. Menon. 2002. “Breakdown of energy equipartition in a 2D binary vibrated granular gas.” *Phys. Rev. Lett.* 88:198301–1–4.
- Ferguson, A. and B. Chakraborty. 2006. “Stress and large-scale spatial structures in dense, driven granular flows.” *Phys. Rev. E* 73:011303–1–7.
- Frezzotti, A. 1997. “A particle scheme for the numerical solution of the Enskog equation.” *Phys. Fluids* 9(5):1329–1335.
- Frezzotti, A. 2000. “Monte Carlo simulation of the uniform shear flow in a dense rough sphere fluid.” *Physica A* 278:161–180.
- Garzó, V. 1997. “Kinetic model for uniform shear flow.” *Physica A* 243:113–128.
- Garzó, V. 2002. “Tracer diffusion in granular shear flows.” *Phys. Rev. E* 66:21308–21319.
- Garzó, V. 2003. “Nonlinear transport in inelastic Maxwell mixtures under simple shear flow.” *J. Stat. Phys.* 112:657–683.
- Garzó, V. 2006. “Transport coefficients for an inelastic gas around uniform shear flow: linear stability analysis.” *Phys. Rev. E* 73:021304–1–19.
- Garzó, V. and A. Astillero. 2005. “Transport coefficients for inelastic Maxwell mixtures.” *J. Stat. Phys.* 118:935–971.
- Garzó, V. and A. Santos. 2003. *Kinetic Theory of Gases in Shear Flows. Non-linear Transport*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- Garzó, V., A. Santos and J. J. Brey. 1989. “A kinetic model for a multicomponent gas.” *Phys. Fluids A* 1:380–383.
- Garzó, V., A. Santos and J. J. Brey. 1990. “Influence of nonconservative external forces on self-diffusion in dilute gases.” *Physica A* 163:651–671.
- Garzó, V., A. Santos and J. M. Montanero. 2007. “Modified Sonine approximation for the Navier–Stokes transport coefficients of a granular gas.” *Physica A* 376:94–107.

- Garzó, V. and J. M. Montanero. 2002. “Transport coefficients of a heated granular gas.” *Physica A* 313:336–356.
- Garzó, V. and J. M. Montanero. 2003. “Effect of energy nonequipartition on the transport properties in a granular mixture.” *Gran. Matt.* 5:165–168.
- Garzó, V. and J. M. Montanero. 2004. “Diffusion of impurities in a granular gas.” *Phys. Rev. E* 69:021301.
- Garzó, V. and J. M. Montanero. 2007*a*. “Hydrodynamics for inelastic Maxwell mixtures: some applications.” a publicar en el *Bulletin of the Institute of Mathematics*, Academia Sinica, arXiv:cond-mat/0411221.
- Garzó, V. and J. M. Montanero. 2007*b*. “Navier–Stokes transport coefficients of d -dimensional granular binary mixtures at low density.” a publicar en el *J. Stat. Phys.*, arXiv:cond-mat/0604552.
- Garzó, V., J. M. Montanero and J. W. Dufty. 2006. “Mass and heat fluxes for a binary granular mixture at low density.” *Phys. Fluids* 18:083305–1–14.
- Garzó, V. and J. W. Dufty. 1999*a*. “Dense fluid transport for inelastic hard spheres.” *Phys. Rev. E* 59:5895–5911.
- Garzó, V. and J. W. Dufty. 1999*b*. “Homogeneous cooling state for a granular mixture.” *Phys. Rev. E* 60:5706–5713.
- Garzó, V. and J. W. Dufty. 2002. “Hydrodynamics for a granular binary mixture at low-density.” *Phys. Fluids* 14:1476–1490.
- Garzó, V. and M. López de Haro. 1997. “Nonlinear transport for a dilute gas in steady Couette flow.” *Phys. Fluids* 9:776–787.
- Goldhirsch, I. 2003. “Rapid granular flows.” *Annu. Rev. Fluid Mech.* 35:267–293.
- Goldhirsch, I. and M. L. Tan. 1996. “The single-particle distribution function for rapid granular shear flows of smooth inelastic disks.” *Phys. Fluids* 8:1752–1763.
- Goldshtein, A. and M. Shapiro. 1995. “Mechanics of collisional motion of granular materials. Part 1. General hydrodynamic equations.” *J. Fluid Mech.* 282:75–114.
- Gross, E. P. and M. Krook. 1956. “Model for collision processes in gases: small-amplitude oscillations of charged two-component systems.” *Phys. Rev.* 102:593–604.
- Haff, P. K. 1983. “Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon.” *J. Fluid Mech.* 134:401–430.
- Holway, L. H. 1966. “New statistical models for kinetic theory: Methods of construction.” *Phys. Fluids* 9:1658–1673.

- Hopkins, M. A. and H. H. Shen. 1992. “A Monte Carlo solution for rapidly shearing granular flows based on the kinetic theory of dense gases.” *J. Fluid Mech.* 244:477–491.
- Huan, C., X. Yang, D. Candela, R. W. Mair and R. L. Walsworth. 2004. “NMR experiments on a three-dimensional vibrofluidized granular medium.” *Phys. Rev. E* 69:041302–1–13.
- Huthmann, M., J. A. G. Orza and Ricardo Brito. 2000. “Dynamics of deviations from the Gaussian state in a freely cooling homogeneous system of smooth inelastic particles.” *Granular Matter* 2:189–199.
- Jaeger, H. M., S. R. Nagel and R. P. Behringer. 1996. “The physics of granular materials.” *Physics Today* 49:32–38.
- Jenkins, J. T. and M. W. Richman. 1988. “Plane simple shear of smooth inelastic circular disks: the anisotropy of the second moment in the dilute and dense limits.” *J. Fluid Mech.* 192:313–328.
- Kadanoff, L. 1999. “Built upon sand: theoretical ideas inspired by granular flows.” *Rev. Mod. Phys.* 71:435–444.
- Karlin, I. V., G. Dušek and T. F. Nonnenmacher. 1997. “Invariance principle for extension of hydrodynamics: nonlinear viscosity.” *Phys. Rev. E* 55:1573–1576.
- Karlin, I. V., G. Dušek and T. F. Nonnenmacher. 1998. “Reply to Comment on Invariance principle for extension of hydrodynamics: nonlinear viscosity.” *Phys. Rev. E* 57:3674–3675.
- Kohlstedt, K., A. Snezhko, M. V. Sapozhnikov, I. S. Aranson, J. S. Olafsen and E. Ben-Naim. 2005. “Velocity distributions of granular gases with drag and with long-range interactions.” *Phys. Rev. Lett.* 95:068001–1–4.
- Krapivsky, P. L. and E. Ben-Naim. 2002. “Scaling, multiscaling and nontrivial exponents in inelastic collision processes.” *Phys. Rev. E* 66:011309–1–10.
- Krouskop, P. E. and J. Talbot. 2003. “Mass and size effects in three-dimensional vibrofluidized granular mixtures.” *Phys. Rev. E* 68:021304–1–12.
- Kumaran, V. 2000a. “Anomalous behaviour of hydrodynamic modes in the two dimensional shear flow of a granular material.” *Physica A* 284:246–264.
- Kumaran, V. 2000b. “Asymptotic solution of the Boltzmann equation for the shear flow of smooth inelastic disks.” *Physica A* 275:483–504.
- Kumaran, V. 2001. “Hydrodynamic modes of a three-dimensional sheared granular material.” *Physica A* 293:385–404.
- Lees, A. W. and S. F. Edwards. 1972. “The computer study of transport processes under extreme conditions.” *J. Phys. C* 5:1921–1928.

- Lun, C. K. K. and A. A. Bent. 1994. "Numerical simulation of inelastic frictional spheres in simple shear flow." *J. Fluid Mech.* 258:335–353.
- Lun, C. K. K., S. B. Savage, D. J. Jeffrey and N. Chepurdiy. 1984. "Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flow field." *J. Fluid Mech.* 140:223–256.
- Marconi, U. M. B. and A. Puglisi. 2002*a*. "Mean-field model of free-cooling inelastic mixtures." *Phys. Rev. E* 65:051305–1–11.
- Marconi, U. M. B. and A. Puglisi. 2002*b*. "Steady state properties of a mean field model of driven inelastic mixtures." *Phys. Rev. E* 66:011301–1–10.
- Martin, P. A. and J. Piasecki. 1999. "Thermalization of a particle by dissipative collisions." *Europhys. Lett.* 46:613–616.
- Montanero, J. M. and A. Santos. 1996. "Monte Carlo simulation method for the Enskog equation." *Phys. Rev. E* 54:438–444.
- Montanero, J. M. and A. Santos. 1997. "Simulation of the Enskog equation *à la* Bird." *Phys. Fluids* 9:2057–2060.
- Montanero, J. M. and A. Santos. 2000. "Computer simulation of uniformly heated granular fluids." *Gran. Matt.* 2:53–64.
- Montanero, J. M., A. Santos and V. Garzó. 2007. "First-order Chapman–Enskog velocity distribution function in a granular gas." *Physica A* 376:75–93.
- Montanero, J. M. and V. Garzó. 1998. "Nonlinear Couette flow in a dilute gas: Comparison between theory and molecular-dynamics simulation." *Phys. Rev. E* 58:1836–1842.
- Montanero, J. M. and V. Garzó. 2002*a*. "Monte Carlo simulation of the homogeneous cooling state for a granular mixture." *Granular Matter* 4:17–24.
- Montanero, J. M. and V. Garzó. 2002*b*. "Rheological properties in a low-density granular mixture." *Physica A* 310:17–38.
- Montanero, J. M. and V. Garzó. 2003*a*. "Energy nonequipartition in a sheared granular mixture." *Mol. Sim.* 29:357–362.
- Montanero, J. M. and V. Garzó. 2003*b*. "Shear viscosity for a heated granular binary mixture at low-density." *Phys. Rev. E* 67:021308–1–12.
- Montanero, J. M., V. Garzó, A. Santos and J. J. Brey. 1999. "Kinetic theory of simple granular shear flows of smooth hard spheres." *J. Fluid Mech.* 389:391–411.
- Montanero, J. M., V. Garzó, M. Alam and S. Luding. 2006. "Rheology of two- and three-dimensional granular mixtures under uniform shear flow: Enskog kinetic theory versus molecular dynamics simulations." *Granular Matter* 8:103–115.

- q. Wang, H., G. j. Jin and Y. q. Ma. 2003. "Simulation study on kinetic temperatures of vibrated binary granular mixtures." *Phys. Rev. E* 68:031301–1–6.
- Rericha, E. C., C. Bizon, M. D. Shattuck and H. L. Swinney. 2002. "Shocks in supersonic sand." *Phys. Rev. Lett.* 88:014302–1–4.
- Santos, A. 2003. "Transport coefficients of d -dimensional inelastic Maxwell models." *Physica A* 321:442–466.
- Santos, A. and A. Astillero. 2005. "System of elastic hard spheres which mimics the transport properties of a granular gas." *Phys. Rev. E* 72:031308–1–19.
- Santos, A., J. M. Montanero, J. W. Dufty and J. J. Brey. 1998. "Kinetic model for the hard-sphere fluid and solid." *Phys. Rev. E* 57:1644–1660.
- Santos, A. and J. W. Dufty. 2006. "Dynamics of a hard sphere granular impurity." *Phys. Rev. Lett.* 97:058001–1–4.
- Santos, A. and M. H. Ernst. 2003. "Exact steady-state solution of the Boltzmann equation: a driven one-dimensional inelastic Maxwell gas." *Phys. Rev. E* 68:011305–1–11.
- Santos, A., V. Garzó and J. W. Dufty. 2004. "Inherent rheology of a granular fluid in uniform shear flow." *Phys. Rev. E* 69:061303–1–10.
- Savage, S. B. 1992. "Instability of unbounded uniform granular shear flow." *J. Fluid Mech.* 241:109–123.
- Schmid, P. J. and H. K. Kytomaa. 1994. "Transient and asymptotic stability of granular shear flow." *J. Fluid Mech.* 264:255–275.
- Schroter, M., S. Ulrich, J. Kreft, J. B. Swift and H. L. Swinney. 2006. "Mechanisms in the size segregation of a binary granular mixture." *Phys. Rev. E* 74:011307–1–14.
- Sela, N., I. Goldhirsch and S. H. Noskowicz. 1996. "Kinetic theoretical study of a simply sheared two-dimensional granular gas to Burnett order." *Phys. Fluids* 8:2337–2353.
- Soto, R., J. Piasecki and M. Mareschal. 2001. "Precollisional velocity correlations in a hard-disk fluid with dissipative collisions." *Phys. Rev. E* 64:031306–1–10.
- Tan, M. L. and I. Goldhirsch. 1998. "Rapid granular flows as mesoscopic systems." *Phys. Rev. Lett.* 81:3022–3025.
- Tan, M. L. and I. Goldhirsch. 1999. "Tan and Goldhirsch reply:." *Phys. Rev. Lett.* 82:4567–4567.
- Tij, M., E. Tahiri, J. M. Montanero, V. Garzó, A. Santos and J. W. Dufty. 2001. "Nonlinear Couette flow in a low density granular gas." *J. Stat. Phys.* 103:1035–1068.

- van Noije, T. P. C. and M. H. Ernst. 1998. "Velocity distributions in homogeneous granular fluids: the free and the heated case." *Gran. Matt.* 1:57–64.
- van Noije, T. P. C. and M. H. Ernst. 2001. *Granular Gases*. Springer–Verlag, Berlin chapter Kinetic theory of granular gases, pp. 3–30. T. Poschel and S. Luding (eds.).
- Vega, F., V. Garzó and A. Santos. 2007. "A model of frictional elastic hard spheres for granular mixtures." arXiv: cond–mat/0701558.
- Walton, O. R. and R. L. Braun. 1986*a*. "Stress calculations for assemblies of inelastic speres in uniform shear." *Acta Mech.* 63:73–86.
- Walton, O. R. and R. L. Braun. 1986*b*. "Viscosity, granular–temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks." *J. Rheol.* 30:949–980.
- Welander, P. 1954. "On the temperature jump in a rarefied gas." *Arkiv Fysik* 7:507–553.
- Wildman, R. D. and D. J. Parker. 2002. "Coexistence of two granular temperatures in binary vibrofluidized beds." *Phys. Rev. Lett.* 88:064301–1–4.
- Yang, X., C. Huan, D. Candela, R. W. Mair and R. L. Walsworth. 2002. "Measurements of grain motion in a dense, three–dimensional granular fluid." *Phys. Rev. Lett.* 88:044301–1–4.