



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

ESTUDIO DE ECUACIONES TIPO HIDRODINÁMICA PARA SISTEMAS GRANULARES DENSOS

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGÍSTER
EN CIENCIAS, MENCIÓN FÍSICA

JAVIER ALEJANDRO BAEZA ORMEÑO

PROFESOR GUÍA
PATRICIO CORDERO SIMUNOVIC

MIEMBROS DE LA COMISIÓN
NICOLÁS MUJICA FERNÁNDEZ
RODRIGO SOTO BELTRÁN
VÍCTOR MUÑOZ GÁLVEZ
DINO RISSO ROCCO

SANTIAGO DE CHILE
2015

Resumen

En el proceso para entender el flujo granular en diferentes sistemas ha habido diferentes acercamientos desde la hidrodinámica clásica, la teoría cinética y la teoría de fluctuaciones hidrodinámicas, de modo de obtener ecuaciones tipo hidrodinámica que describan de modo preciso el movimiento de la materia granular en diferentes regímenes. En este trabajo, como punto de partida, se utiliza un enfoque de “grano grueso” (coarse graining) desarrollado inicialmente por Goldhirsch, Zhang y Berringer, para luego ser extendido y utilizado para analizar sistemas bidimensionales y tridimensionales con granos con densidad de masa uniforme, sin dispersión en tamaño, sin grados de libertad rotacional y choques instantáneos.

Al margen de estas consideraciones, ninguna otra aproximación relacionada con el estado del sistema (densidad de número, energía, mecanismos de inyección) ha sido utilizada para definir diversas cantidades y derivar un conjunto de ecuaciones de balance para las densidades de masa, momentum y energía. A partir de ellas, e imitando a las ecuaciones de Navier-Stokes, se extraen a su vez otras definiciones de cantidades relevantes. Todas ellas, cantidades definidas, cantidades derivadas y ecuaciones, se han medido en sucesivas simulaciones numéricas de dinámica molecular en 2 y 3 dimensiones.

Se ha observado que la metodología utilizada tiene ventajas sobre otros métodos, como por ejemplo la suavidad de la descripción continua de un grano abandonando una celda y la medición precisa de los campos hidrodinámicos locales. Las ecuaciones obtenidas se mantienen consistentes independientemente del tamaño de la celda de medición local, intervalos de tiempo de medición, alta densidad y energía local. Este método es consistente incluso con un número muy reducido de granos en el sistema, tanto en 2 como 3 dimensiones.

Esta formulación permite obtener una definición para el tensor de presión que proviene de las ecuaciones de balance de momentum sin otras consideraciones geométricas y, a través de la aproximación de Green-Kubo, obtener un coeficiente de viscosidad de cizalle local. La presión medida en simulaciones numéricas, sin embargo, evidencia diferencias significativas con resultados conocidos en la literatura y esto afecta directamente el cálculo de la viscosidad de cizalle. Estas diferencias se han asociado a problemas intrínsecos con la definición de presión obtenida. Se discuten algunas soluciones a este problema y consideraciones adicionales a las ecuaciones de balance.

Agradecimientos

A Paula, sin ella esto no sería más que un sueño extraño sin final.

Mis más sinceros agradecimientos a los miembros de la comisión, por su dedicación y oportunos comentarios. Ayudaron a transformar este trabajo de una manera que nunca esperé.

Para Héctor y Manuel, este triunfo es de ustedes.

Tabla de contenido

| | |
|---|-----------|
| 1. Introducción | 1 |
| 1.1. Medios granulares | 1 |
| 1.2. Teoría previa | 1 |
| 1.3. Visión general de este trabajo | 4 |
| 1.4. Objetivos de la tesis | 6 |
| 1.5. Estructura del trabajo | 7 |
| 1.6. Resumen de símbolos | 8 |
| 1.6.1. Símbolos para el sistema 2D | 8 |
| 1.6.2. Símbolos para el sistema 3D | 9 |
| 2. Campos hidrodinámicos en un sistema bidimensional | 10 |
| 2.1. Sumario | 10 |
| 2.2. Introducción | 10 |
| 2.3. Definiciones en 2D | 10 |
| 2.3.1. Campos microscópicos con masas puntuales | 10 |
| 2.3.2. Campos microscópicos con partículas con volumen | 11 |
| 2.4. Integración en una celda | 12 |
| 2.4.1. Ejemplos de medición de densidad en una celda (en el tiempo) | 14 |
| 2.5. Ecuación de balance de masa | 17 |
| 2.5.1. Integración en celda | 17 |
| 2.6. Ecuación de balance de momentum | 19 |
| 2.6.1. Integración en celda | 20 |
| 2.7. Ecuación de balance de energía | 21 |
| 2.7.1. Integración en celda | 23 |
| 2.8. Recapitulando las ecuaciones | 23 |
| 2.9. Ejemplos sencillos de aplicación | 24 |
| 2.9.1. Ejemplo de cambio en celda sin choque | 24 |
| 2.9.2. Ejemplo de cambio en celda con choque: momentum | 26 |
| 2.9.3. Ejemplo de cambio en celda con choque: energía | 28 |
| 2.10. Temperatura granular en 2D | 30 |
| 2.11. Resumen del capítulo | 32 |
| 3. Interpretación de las ecuaciones de balance bidimensional | 33 |
| 3.1. Sumario | 33 |
| 3.2. Introducción | 33 |
| 3.3. Inyección de energía | 34 |
| 3.4. Sobre el tensor de presión colisional | 35 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 3.4.1. | Medición de \mathbb{P}^{col} en las simulaciones | 37 |
| 3.5. | Sobre el tensor de presión cinética | 40 |
| 3.5.1. | Medición de \mathbb{P}^{cin} en las simulaciones | 42 |
| 3.6. | Recapitulando las ecuaciones | 42 |
| 3.7. | Cálculo de viscosidad de cizalle | 43 |
| 3.7.1. | Método directo | 43 |
| 3.7.2. | Método de Green-Kubo | 44 |
| 3.8. | Resumen del capítulo | 45 |
| 4. | Medición en un sistema bidimensional | 46 |
| 4.1. | Sumario | 46 |
| 4.2. | Introducción | 46 |
| 4.3. | El sistema a analizar | 46 |
| 4.3.1. | Fuentes de momentum y energía | 48 |
| 4.3.2. | Sobre los gráficos | 48 |
| 4.4. | Centro de masa | 49 |
| 4.5. | Campos microscópicos | 50 |
| 4.5.1. | Masa | 51 |
| 4.5.2. | Momentum \hat{x} | 53 |
| 4.5.3. | Momentum \hat{y} | 54 |
| 4.5.4. | Campo de velocidad vectorial | 55 |
| 4.5.5. | Energía | 56 |
| 4.5.6. | Comentarios generales acerca de los campos microscópicos | 58 |
| 4.6. | Ecuaciones de balance | 58 |
| 4.6.1. | Cálculo de error | 59 |
| 4.6.2. | Balance de masa | 59 |
| 4.6.3. | Balance de momentum | 60 |
| 4.6.4. | Balance de energía | 64 |
| 4.7. | Temperatura en el sistema | 66 |
| 4.7.1. | Flujo de calor | 69 |
| 4.8. | Tensor de presión | 69 |
| 4.8.1. | Tensores de presión colisional, cinético y total | 70 |
| 4.8.2. | Calculo de la viscosidad de cizalle η | 73 |
| 4.9. | Resumen del capítulo | 76 |
| 5. | Sistema bidimensional con pocas partículas | 78 |
| 5.1. | Sumario | 78 |
| 5.2. | Introducción | 78 |
| 5.3. | El sistema a analizar | 78 |
| 5.3.1. | Sobre los gráficos | 79 |
| 5.4. | Promedio de campos microscópicos | 79 |
| 5.5. | Ecuaciones de balance | 81 |
| 5.6. | Temperatura granular | 81 |
| 5.7. | Tensor de presión | 82 |
| 5.7.1. | Viscosidad de cizalle | 84 |
| 5.8. | Resumen del capítulo | 85 |

| | |
|--|------------|
| 6. Campos microscópicos en un sistema 3D | 86 |
| 6.1. Sumario | 86 |
| 6.2. Introducción | 86 |
| 6.3. Definición de los campos en 3D | 87 |
| 6.4. Integración sobre una celda | 87 |
| 6.4.1. Ejemplo de medición de masa en una celda 3D con una esfera moviéndose entre celdas | 88 |
| 6.4.2. Ejemplo de paso entre múltiples celdas en 3D | 89 |
| 6.5. Ecuación de balance de la masa | 90 |
| 6.6. Ecuación de balance del momentum | 91 |
| 6.7. Ecuación de balance de energía | 93 |
| 6.7.1. Energía cinética | 93 |
| 6.7.2. Energía potencial gravitacional | 94 |
| 6.7.3. Energía total e integración en la celda | 94 |
| 6.8. Temperatura granular en 3D | 96 |
| 6.8.1. Temperatura en el plano | 97 |
| 6.9. Definición del tensor de presión en 3D | 97 |
| 6.10. Recapitulando las ecuaciones de balance en 3D | 99 |
| 6.11. Resumen del capítulo | 99 |
| | |
| 7. Medición en un sistema tridimensional | 100 |
| 7.1. Sumario | 100 |
| 7.2. Introducción | 100 |
| 7.3. El sistema a analizar | 101 |
| 7.3.1. Fuentes de momentum y energía | 103 |
| 7.4. Campos microscópicos | 103 |
| 7.4.1. Masa | 103 |
| 7.4.2. Momentum \hat{x} | 104 |
| 7.4.3. Momentum \hat{y} | 106 |
| 7.4.4. Momentum \hat{z} | 107 |
| 7.4.5. Campo de velocidad vectorial en el plano xy | 108 |
| 7.4.6. Energía cinética | 108 |
| 7.4.7. Energía potencial | 110 |
| 7.4.8. Comentarios generales de los campos hidrodinámicos | 111 |
| 7.5. Temperatura en el sistema | 111 |
| 7.6. Ecuaciones de balance | 113 |
| 7.6.1. Balance de masa | 113 |
| 7.6.2. Balance de momentum | 114 |
| 7.6.3. Balance de energía | 116 |
| 7.7. Tensor de presión | 117 |
| 7.7.1. Tensores de presión colisional, cinética y total | 118 |
| 7.7.2. Calculo de la viscosidad de cizalle η | 119 |
| 7.8. Resumen del capítulo | 121 |

| | |
|---|------------|
| 8. Explorando ideas sobre la presión | 122 |
| 8.1. Introducción | 122 |
| 8.2. El problema de la presión | 122 |
| 8.3. Presión sobre un pistón | 122 |
| 8.4. Posible solución y sus implicancias | 123 |
| 8.5. Resumen del capítulo | 126 |
| 9. Conclusiones | 127 |
| 9.1. Teoría desarrollada | 127 |
| 9.2. Simulaciones numéricas | 127 |
| 9.3. Trabajo futuro | 128 |
| Bibliografía | 130 |
| A. Sobre las simulaciones numéricas | 133 |
| A.1. Cantidades adimensionales | 133 |
| A.2. El simulador ‘Discos’ | 134 |
| A.3. Las mediciones en colisiones | 136 |
| A.4. Las mediciones en intervalos de tiempo regulares | 136 |
| A.5. Procesamiento de datos posterior | 136 |
| B. Sobre los choques inelásticos en el modelo de esferas duras | 138 |
| B.1. Introducción | 138 |
| B.2. Término inelástico para un sistema 2D | 138 |
| B.2.1. Ecuación de balance de momentum | 139 |
| B.2.2. Ecuación de balance de energía | 140 |
| B.2.3. Cálculo de términos inelásticos explícitos. | 140 |
| B.3. Inelasticidad en los sistemas tridimensionales | 142 |
| B.3.1. Presión inelástica | 144 |
| B.3.2. Medición en la simulación 3D | 144 |
| B.4. Resumen | 147 |
| C. Factor de estructura dinámico y estático | 149 |
| C.1. Introducción | 149 |
| C.2. En un sistema bidimensional | 149 |
| C.3. En un sistema tridimensional | 151 |
| C.4. Sobre \vec{k} en el espacio de Fourier | 153 |
| C.5. Resumen | 154 |

Índice de figuras

| | | |
|-------|--|----|
| 1.1. | Deformación de partículas durante el impacto según el modelo de Hertz. Figura extraída de [8]. | 2 |
| 1.2. | Diagrama de una colisión entre esferas duras. Figura extraída de [8]. | 3 |
| 2.1. | Densidad en una celda. Cada disco aporta con una porción de su masa señalada por el área coloreada en la figura. | 13 |
| 2.2. | $\mathbb{I}_{\text{celda}}$ en sus distintos casos: \mathbb{I}_{2c} en verde, \mathbb{I}_{3c} en gris y \mathbb{I}_{4c} en naranja. | 14 |
| 2.3. | Disco pasando entre dos celdas. Línea sólida: condición inicial. Línea segmentada: estado intermedio. | 15 |
| 2.4. | Porción de disco mientras pasa de una celda a otra (dividida solo entre dos celdas). | 15 |
| 2.5. | Disco pasando entre cuatro celdas. Línea sólida: condición inicial. Línea segmentada: estado intermedio y trayectoria del centro. | 16 |
| 2.6. | Porción de disco mientras pasa de una celda a otra (dividida entre cuatro celdas) | 16 |
| 2.7. | La figura muestra la porción de arco involucrada en la integral de la celda superior derecha, con sus ángulos iniciales y finales. | 18 |
| 2.8. | Transición de la esfera entre dos celdas. Se miden los campos hidrodinámicos en todo momento. | 25 |
| 2.9. | Cambio de la densidad por paso de disco entre celdas sin choques. | 26 |
| 2.10. | Efecto en el momentum por el choque de esferas en distintas celdas. | 26 |
| 2.11. | Evolución del momentum por el choque de esferas en distintas celdas. Se han considerado los valores $R = V = \delta = 1$, $\alpha = 0.7$ | 28 |
| 3.1. | Diferentes adiciones a \mathbb{P}^{col} en cada celda | 38 |
| 3.2. | Divisiones de un disco entre celdas para calcular \mathbb{K}_β | 39 |
| 4.1. | Ejemplo de un sistema 2D con 300 discos en una caja semiperiódica. En líneas punteadas, las divisiones para las celdas de medición. Las circunferencias marcan el contorno de los discos y los puntos sus centros. En este caso el sistema se han utilizaron las temperaturas $T_1 = 1$ y $T_2 = 5$ en las paredes y una inelasticidad de $q_n = 0.01$ | 47 |
| 4.2. | Posición del centro de masa en distintos instantes de tiempo comparando los casos de masas puntuales y discos con densidad de masa. (a) Centro de masa para partículas puntuales. Se usa la definición (4.5). (b) Centro de masa considerando partículas con volumen. Se hace uso de la definición (4.6). | 50 |
| 4.3. | Medición de la masa dentro de cada celda en el tiempo. Se incluye el valor M_Δ como referencia. (a) Masa en celda a altura media medida en distintos instantes. con posición $y = \frac{L_y}{2}$. (b) Masa en celda cercana a la pared superior medida en distintos instantes, con posición $y = \frac{5L_y}{6}$ | 51 |

| | | |
|-------|--|----|
| 4.4. | Estadísticos de la medición de masa por celda. (a) Promedio de masa por celda. (b) Desviación estándar por celda. | 52 |
| 4.5. | Momentum \hat{x} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum en la dirección \hat{x} en celda central, con posición $y = \frac{L_y}{2}$. (b) Momentum \hat{x} en celda superior, con posición $y = \frac{5L_y}{6}$ | 53 |
| 4.6. | Estadísticos del momentum en la dirección \hat{x} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{x} local. La línea punteada une a los centros de las barras para los granos con volumen. (b) Desviación estándar del momentum \hat{x} por celda agrupados según su posición \hat{y} | 54 |
| 4.7. | Momentum en la dirección \hat{y} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum \hat{y} en celda central, con posición $y = \frac{L_y}{2}$. (b) Momentum \hat{y} en celda superior, con posición $y = \frac{5L_y}{6}$ | 54 |
| 4.8. | Estadísticos del momentum en la dirección \hat{y} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{y} local. La línea punteada une a los centros de las barras para los granos con volumen. (b) Desviación estándar del momentum \hat{y} por celda. | 55 |
| 4.9. | Estadísticos del momentum en la dirección \hat{x} medido por celda. (a) Campo de momentum promediado por celda. (b) Campo de velocidad promediada por celda. | 56 |
| 4.10. | Energía cinética medida dentro de cada celda en el tiempo. (a) Energía en celda central, con posición $y = \frac{L_y}{2}$. (b) Energía en celda superior, con posición $y = \frac{5L_y}{6}$ | 57 |
| 4.11. | Estadísticos de la energía medida por celda. (a) Promedio de energía por celda. (b) Desviación estándar de la energía por celda. | 57 |
| 4.12. | Errores en la ecuación de balance de masa para distintos instantes de tiempo en una celda a altura $y = \frac{L_y}{2}$ | 60 |
| 4.13. | Balance de masa desglosado por término. | 61 |
| 4.14. | Balance de momentum \hat{x} desglosado por término en una celda a altura $y = \frac{L_y}{2}$ | 62 |
| 4.15. | Balance de momentum \hat{y} desglosado por término en una celda a altura $y = \frac{L_y}{2}$ | 62 |
| 4.16. | Balance de momentum \hat{y} desglosado por término en una celda adyacente a la pared térmica inferior. Se han usado las definiciones (4.13),(4.14),(4.15) y (4.3) respectivamente. | 63 |
| 4.17. | Error en la ecuación de balance de momentum por cada dirección. Se ha promediado cada error de cada celda en todo el espacio para distintos intervalos de discretización dt . (a) Error de la ecuación de balance de momentum \hat{x} . (b) Error de la ecuación de balance de momentum \hat{y} | 64 |
| 4.18. | Términos de la ecuación de balance de energía medidos en una celda a altura media. | 65 |
| 4.19. | Términos de la ecuación de balance de energía medidos en una celda a altura adyacente a la pared inferior. | 65 |
| 4.20. | Balance de masa desglosado por término | 66 |
| 4.21. | Temperatura granular para dos sistemas con choques elásticos, $q = 0$. Las paredes térmicas superior e inferior tienen temperaturas T_1 y T_2 , respectivamente. Se adjunta la curva de la temperatura esperada para este sistema a partir de la literatura T_{teo} . (a) Paredes con temperaturas $T_1 = T_2 = 1$. (b) Paredes con temperaturas $T_1 = 1$ y $T_2 = 5$ | 67 |
| 4.22. | Temperatura por cada celda calculada promediando en el tiempo en el sistema con un tamaño 80×80 diámetros y 4800 partículas. Inelasticidad $q = 0$ | 68 |

| | |
|--|-----|
| 4.23. Temperatura $T^{(2)}$ por cada celda en distintos sistemas de igual tamaño pero con distinta inelasticidad de los choques entre partículas. | 68 |
| 4.24. Medición del flujo de calor a partir de la definición (3.15). (a) Campo de temperatura local, como referencia. (b) Medición de ambas componentes del calor \vec{Q} promediadas por cada celda de medición, mostradas en forma vectorial. | 69 |
| 4.25. Promedio de \mathbb{P}_{xx} por celda, usando la definición (3.13), para distintos tamaños de celda en la misma instancia de simulación. | 70 |
| 4.26. Promedio de medición de \mathbb{P}^{cin} y \mathbb{P}^{col} media dentro de celda. (a) Componente xx . (b) Componente xy . (c) Componente yx . (d) Componente yy | 71 |
| 4.27. Comparación del resultado numérico de la presión con resultados teóricos previos. (a) Presión escalar numérica comparada con $nT^{(2)}$ medido en la simulación. (b) Fracción que compone el lado derecho de la ecuación de estado (4.19) predicha por Henderson y otros, medida numéricamente en la simulación y comparada con la función H , que compone el lado derecho de la ecuación de estado (4.19), y depende de la fracción de volumen local ϕ | 72 |
| 4.28. Medición de η_{D_1} y η_{D_2} utilizando el tensor de presión total \mathbb{P} promediados en el tiempo. | 73 |
| 4.29. Medición de η_{GK} para el estimador sesgado (3.28) con los distintos componentes de \mathbb{P} | 74 |
| 4.30. Medición de η_{GK} usando el estimador insesgado (3.27) y distintos componentes de \mathbb{P} | 75 |
| 4.31. Estimación de η usando como referencia la temperatura local (4.21). | 76 |
| | |
| 5.1. Configuración del sistema con pocas partículas en un tiempo t . El vector representa la velocidad de cada disco. Las líneas punteadas marcan los contornos de las celdas de medición. | 79 |
| 5.2. Campos medidos en cada celda y promediados en el tiempo. (a) Masa. (b) Energía. (c) Momentum \hat{x} . (d) Momentum \hat{y} | 80 |
| 5.3. Campo de velocidad vectorial relacionado con cada celda de medición. | 81 |
| 5.4. Ecuaciones de balance por término calculadas en una celda central a altura media. (a) Balance de masa. (b) Balance de energía. (c) Balance de momentum \hat{x} . (d) Balance de momentum \hat{y} | 82 |
| 5.5. Medición de la temperatura granular por cada celda. | 83 |
| 5.6. Promedio temporal de medición de \mathbb{P}^{col} y \mathbb{P}^{cin} por celda. (a) Componente xx . (b) Componente xy . (c) Componente yx . (d) Componente yy | 83 |
| 5.7. Comparaciones usando la presión escalar calculada por celda en la medición. (a) Comparación de las partes de la ecuación de estado p y nT . (b) Comparación entre la fracción de la presión y temperatura con la función H | 84 |
| 5.8. Medición de η_{GK} usando el estimador insesgado (3.27) y distintos componentes de \mathbb{P} junto a la predicción teórica η_S | 84 |
| | |
| 6.1. Se grafica la porción de esfera en cada celda en el tiempo, con el movimiento de la esfera ya descrito. | 89 |
| 6.2. Paso de una esfera entre dos celdas. Se grafica la porción de esfera en cada celda en distintos tiempos. En $t = 0$ el centro pasa desde la celda 3 a la celda 2. | 89 |
| | |
| 7.1. Ejemplo de caja pseudo-bidimensional baja vibrada verticalmente | 101 |

| | | |
|-------|--|-----|
| 7.2. | Sistema 3D con 400 discos en una caja semi-periódica en el plano xy . Se muestra el contorno de cada esfera junto a la posición de sus centros. En líneas punteadas, las divisiones para las celdas de medición. | 102 |
| 7.3. | Medición de la masa dentro de cada celdas en el tiempo. (a) Masa en celda inferior. (b) Masa en celda altura media. | 104 |
| 7.4. | Estadísticos de la medición de masa por celda. (a) Promedio de masa. Los extremos de la barra de error marcan el promedio máximo y mínimo alcanzado por las celdas en la misma posición \hat{y} y el centro marca el promedio de los promedios de la masa para celdas que comparten coordenada y . Las barras están levemente desplazadas en el eje de la posición \hat{y} para permitir su comparación. La línea punteada marca el promedio global M_{prom} . (b) Desviación estándar por celda. | 105 |
| 7.5. | Momentum en la dirección \hat{x} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum \hat{x} en celda inferior. (b) Momentum \hat{x} en celda central. | 105 |
| 7.6. | Estadísticos del momentum en la dirección \hat{x} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{x} por celda. (b) Desviación estándar del momentum \hat{x} por celda. | 106 |
| 7.7. | Momentum en la dirección \hat{y} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum \hat{y} en celda inferior. (b) Momentum \hat{y} en celda central. | 106 |
| 7.8. | Estadísticos del momentum en la dirección \hat{y} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{y} por celda. (b) Desviación estándar del momentum \hat{y} por celda. | 107 |
| 7.9. | Momentum en la dirección \hat{z} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum \hat{z} en celda inferior. (b) Momentum \hat{z} en celda central. | 107 |
| 7.10. | Estadísticos del momentum en la dirección \hat{z} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{z} por celda. (b) Desviación estándar del momentum \hat{z} por celda. | 108 |
| 7.11. | Campos vectoriales en el plano xy promediados en el tiempo dentro de cada celda para el sistema de caja baja vibrada verticalmente. (a) Campo de momentum en el plano xy . (b) Campo de velocidad en el plano xy | 109 |
| 7.12. | Energía cinética medida dentro de cada celda en el tiempo. (a) K_{3D} en celda inferior. (b) K_{3D} en celda central. | 109 |
| 7.13. | Estadísticos de la energía cinética medida por celda. (a) Promedio de K_{3D} por celda. (b) Desviación estándar de K_{3D} por celda. | 110 |
| 7.14. | Energía potencial medida dentro de cada celda en el tiempo. (a) U_{3D} en celda inferior. (b) U_{3D} en celda central. | 110 |
| 7.15. | Estadísticos de la energía potencial medida por celda. (a) Promedio de U_{3D} por celda. (b) Desviación estándar de U_{3D} por celda. | 111 |
| 7.16. | Temperatura total por cada celda calculada promediando en el tiempo. | 112 |
| 7.17. | Temperatura mostrada en el plano horizontal y la dirección vertical medidas independientemente. | 112 |
| 7.18. | Balance de masa desglosado por término | 113 |
| 7.19. | Balance de momentum en la dirección \hat{x} desglosado por término | 115 |
| 7.20. | Balance de momentum en la dirección \hat{y} desglosado por término | 115 |
| 7.21. | Elementos de la ecuación de balance de momentum \hat{z} . Se presentan en dos gráficos para observar independientemente cada curva, manteniendo el término del lado izquierdo ΔP_z como referencia en ambos casos. (a) Términos de colisiones entre granos $-(\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}})_z$ y de transporte de momentum por el fluido $-\nabla \cdot ((P_z)V)$ comparados con el término de mano izquierda ΔP_z del cambio de momentum \hat{z} . (b) Términos fuente por colisiones con las paredes F_{P_z} y fuerza de gravedad F_g comparados con el cambio de momentum \hat{z} | 116 |

| | | |
|-------|--|-----|
| 7.22. | Términos de la ecuación de balance de energía medidos en una celda en el tiempo.(a) Términos relacionados a la energía cinética y los choque entre granos. (b) Términos dependientes de la energía potencial y los choques con las paredes. | 117 |
| 7.23. | Promedio por altura de medición de la presión colisional \mathbb{P}^{col} y cinética \mathbb{P}^{cin} para las componentes fuera de la diagonal. (a) Componente xy (similar a yx). (b) Componente zx (similar a zy). (c) Componente xz (similar a yz). | 118 |
| 7.24. | Promedio por altura de medición de la presión colisional \mathbb{P}^{col} y cinética \mathbb{P}^{cin} para las componentes en la diagonal. (a) Componente xx (similar a yy). (b) Componente zz | 119 |
| 7.25. | Medición de la presión escalar comparada con los otros componentes de la ecuación de estado usual. | 120 |
| 7.26. | Calculo del coeficiente de viscosidad de cizalle para distintos componentes del tensor de presión total. Se desplazan leve y horizontalmente las componentes primera y tercera de cada gráfico para ayudar a la comparación. (a) Medición de η con estimado insesgado y componentes xy , yx y zx . (b) Medición de η con estimado insesgado y componentes zy , xz e yz | 120 |
| 8.1. | Sistema con un pistón y tres paredes térmicas. | 123 |
| 8.2. | Visualización de un grano virtual al chocar contra el pistón. | 124 |
| 8.3. | Visualización de un grano virtual al chocar contra el pistón. La línea segmentada marca la pared virtual y el vector indica $\vec{r}_j - \vec{r}_i$ | 125 |
| A.1. | Esquema de una simulación llevada por eventos (Event-driven) | 135 |
| A.2. | Línea temporal de una simulación llevada por eventos (Event-driven). Las colisiones se representan por los segmentos verticales. | 136 |
| B.1. | Elementos del desglose del término sumidero de energía promediados en el tiempo | 142 |
| B.2. | Promedio de medición de los componentes de \mathbb{P}^{elas} y \mathbb{P}^{inel} por celda en un sistema con paredes térmicas de temperatura idéntica. (a) Componentes xx . (b) Componentes yy . (c) Componentes xy . (d) Componentes yx | 143 |
| B.3. | Promedio de cada elemento de la igualdad (B.7) para cada componente. (a) Dirección \hat{x} . (b) Dirección \hat{y} . (c) Dirección \hat{z} | 145 |
| B.4. | Elementos del desglose del término sumidero de energía promediados en el tiempo | 146 |
| B.5. | Promedio de medición de los tensores de presión elástica \mathbb{P}^{elas} y presión inelástica \mathbb{P}^{inel} por altura. (a) Componentes xx . (b) Componentes yy . (c) Componentes xy . (d) Componentes yx . (e) Componentes zx . (f) Componentes zy | 147 |
| C.1. | $G_{2D}(kR)$. Escalamiento δ - Θ en 2 dimensiones. | 150 |
| C.2. | Gráfico de $G_{3D}(kR)$ usado en el escalamiento δ - Θ | 152 |

Capítulo 1

Introducción

1.1. Medios granulares

Los medios granulares corresponden a conjuntos de partículas sólidas macroscópicas que presentan mecanismos disipativos de energía (por ejemplo rebotes inelásticos) y han sido de interés en las últimas décadas, aun cuando han estado presentes como un elemento importante dentro del desarrollo de la humanidad por su importancia en el almacenamiento de granos, transporte de minerales, mezcla de compuestos sólidos, erosión y formación geológica, homogeneización de preparados de distintos tipos y un gran número de aplicaciones.

Su complejidad no se debe a sus partículas individuales, cuyas propiedades mecánicas es posible conocer en detalle, sino a su comportamiento colectivo. Sin considerar el caso de interacciones de largo alcance, e incluso restringiendo las interacciones a choques binarios entre partículas o los bordes de confinamiento del sistema, pueden llegar a comportarse como gas, líquido y sólido dentro de un mismo estado global del sistema. Pueden además involucrar formación de patrones al ser vibrados [1], avalanchas [2], convección [3, 4] y, en el caso en que el medio esté compuesto por granos de distinto tamaño, pueden presentar segregación por tamaños [5], entre otros fenómenos.

En la práctica, dado que existe una disipación de energía en las colisiones inelásticas que ocurren naturalmente dentro del sistema, se requiere una inyección constante de la misma para que el sistema permanezca en un estado no trivial, es decir, esta condición lo ubica dentro de los sistemas fuera del equilibrio. Aun en el caso de estados estacionarios con estas características su descripción es compleja y difícil de abordar.

Hay sistemas que tienen más de una fuente de disipación, por ejemplo, los granos están inmersos en un fluido viscoso. Estas características generan problemas distintos y comportamientos diversos. Por ello requieren de tratamientos especiales, que no serán abarcados en este trabajo.

1.2. Teoría previa

Para estudiar estos fenómenos, a fin de comprender más allá de su fenomenología, se ha hecho uso de las herramientas teóricas que han demostrado su eficacia con los medios clásicos. En el caso de los sólidos es usual el tratamiento a través de fuerzas y el estudio de cadenas de transmisión de esfuerzos, por dar algunos ejemplos. Dentro de los estados fluidizados se espera llegar a una des-

cripción hidrodinámica que pueda tener análogos claros con las ecuaciones de Navier-Stokes [6] y se hace uso de la reología en el caso de las suspensiones coloidales [7].

Existen dos grandes modelos para caracterizar las interacciones entre granos cuando no existe un medio viscoso entre ellos y solo interactúan mediante choques. El primero considera que las deformaciones que experimenta el grano durante las colisiones están en el régimen elástico del material del que están compuestas las partículas del medio. Entonces, la fuerza de interacción entre los granos está relacionada directamente con la deformación que experimentan los granos por su mutua proximidad, es decir a la distancia entre los centros geométricos de los granos, que es menor que la suma de sus radios. Esta idea conduce a la llamada la ‘ley de Hertz’. En él (esquema mostrado en la figura 1.1) se ha limitado a que la velocidad de impacto entre esferas sea menor que la velocidad de grupo observada en las ondas elásticas en el material [8]. Estas ideas en principio sencillas se complican al considerar coeficientes de roce no lineal e interacciones de superficie tangencial o fricciones rotacionales.

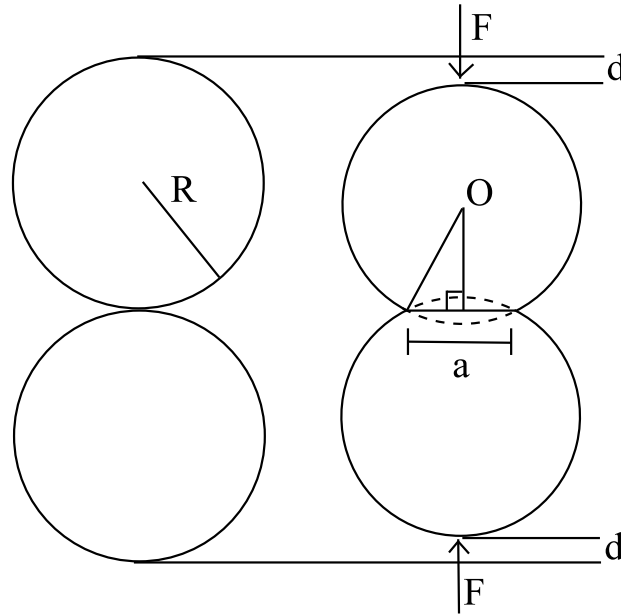


Figura 1.1: Deformación de partículas durante el impacto según el modelo de Hertz. Figura extraída de [8].

El segundo modelo, llamado de esferas duras, considera que los choques binarios entre esferas perfectas (o discos en el caso bidimensional) tienen un tiempo de contacto pequeño entre los granos y que existe un cambio en la energía del sistema que conforman el par de granos involucrados, perdiéndose energía en cada choque, pero manteniendo el momentum del sistema. Se ha caracterizado entonces el cambio de velocidad producto del choque con un coeficiente de restitución α . Por ejemplo, si se consideran dos esferas chocando inelásticamente, como se muestra en la figura 1.2, existe un cambio en la velocidad en la dirección \hat{k} que une los centros de las esferas dado por la ecuación siguiente:

$$(\vec{v}_i^+ - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{k} = -\alpha(\vec{v}_2^0 - \vec{v}_1^0) \cdot \hat{k} , \quad (1.1)$$

donde \vec{v}_i^+ corresponde a la velocidad del cada grano i después del choque y \vec{v}_i^0 es la velocidad de

impacto del grano i . Esto, sumado a la conservación de momentum, permite obtener la velocidad de cada partícula luego del choque a partir de las velocidades de impacto de cada una.

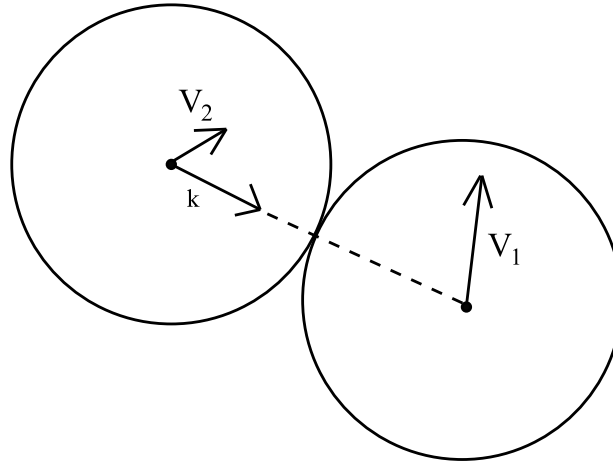


Figura 1.2: Diagrama de una colisión entre esferas duras. Figura extraída de [8].

Este coeficiente de restitución en principio no es constante para cada material y depende tanto del tamaño de los granos como de la velocidad de impacto (en el caso de una velocidad muy pequeña se debería recuperar el caso elástico de la ley de Hertz). Sin embargo, para muchas aplicaciones es suficientemente buena la aproximación de un valor constante para cada material, aproximación que muestra concordancia con los experimentos reales [8].

La gran ventaja que presenta este método es que permite considerar a cada partícula moviéndose independiente de las otras mientras no colisionen (en caso de estar presente la gravedad describen una caída libre). De este hecho sacan provecho las simulaciones numéricas. El gran problema computacional ocurre debido a que se tienen choques inelásticos, la velocidad decreciente de salida de las partículas puede aumentar el número de choques por unidad de tiempo, y por tanto aumenta el tiempo de cálculo. Por ejemplo, una pelota rebotando inelásticamente con el suelo puede llegar a tener un número infinito de choques en un tiempo finito, por lo que el cálculo de cada rebote se vuelve impracticable. Este problema es análogo al colapso inelástico, donde en una región localizada se aumenta drásticamente el número de choques por unidad de tiempo en desmedro del resto del sistema, y la situación genera aumentos locales de densidad, que a su vez generan aumentos de choques por unidad de tiempo.

Los esfuerzos por esta segunda vía no son menores, pues han logrado dar con una formulación continua que permite el estudio del movimiento de polvos [9] o gases [10] usando teoría cinética aplicada a, por ejemplo, un flujo forzado uniformemente [11] y a esferas duras [12, 13]. Esta técnica consiste en partir de la ecuación de Boltzmann y agregar la disipación en las interacciones, pero no logra describir concentraciones de granos mayores a la de los gases, perdiendo validez cuando la densidad local de número aumenta.

Otros esfuerzos han sido exitosos al usar diversas aproximaciones a gases granulares de baja densidad y a estados muy cerca de los homogéneos [14]. La mayoría de estos trabajos no tiene la

capacidad de englobar todos los fenómenos, pues para llegar a ser formulados han de enfocarse en determinados sistemas con aproximaciones a sus situaciones particulares y de esta forma llegar a ecuaciones que den cuenta de la fenomenología en cada caso.

Otros acercamientos al problema de incluir todos los fenómenos observados en los medios granulares en una sola teoría han sido también aceptados. Es destacable, en este contexto, la idea de formular ecuaciones tipo hidrodinámicas a partir de las propiedades individuales de los componentes del sistema, originalmente planteada por Goldhirsch, Zhang y Berringer [15]. En ella se emula el enfoque de la formulación de las ecuaciones de Navier-Stokes buscando una ventana de medición que permita estudiar el estado local de la materia granular y seguir su evolución exitosamente. Esto quiere decir, en la práctica, que con un número muy reducido de elementos es posible deducir ecuaciones de conservación de los campos estudiados. Muy al contrario de lo observado en el caso continuo, donde se requiere que el número de partículas sea suficientemente grande dentro de un volumen infinitesimal para asegurar los promedios hidrodinámicos.

Este enfoque *de lo particular a lo general* no requiere de un gran número de suposiciones, pero su alcance predictivo es de menor poder. El llevar esta formulación a sistemas particulares requiere de un esfuerzo adicional y la interpretación de las ecuaciones resultantes puede ser compleja.

Todo este esfuerzo ha sido apoyado por las simulaciones numéricas de dinámica molecular [16–18] y experimentos físicos. Ha sido sin embargo, el modelo de esferas duras extensamente utilizado por el bajo costo computacional y la formulación de interacciones simplificadas entre partículas. Se nombra como ejemplo las simulaciones llevadas por eventos (Event Driven) [19] que reducen a un instante infinitesimal el tiempo de contacto entre los granos al momento de los choques, permitiendo un tiempo de simulación menor al no necesitar un paso de tiempo fijo entre los choques de partículas dado que solo interactúan en los choques.

1.3. Visión general de este trabajo

En este trabajo se hará uso del modelo de las esferas duras, ya que se espera mantener fluidizado el medio granular con la inyección apropiada de energía, evitando los contactos permanentes entre partículas y la formación de estados sólidos locales. Por este mismo motivo, las simulaciones llevadas por eventos son apropiadas para medir las cantidades microscópicas definidas.

Dentro del campo de las simulaciones numéricas de medios granulares no es extraña la idea de generar ventanas en el sistema, es decir regiones finitas de medición alrededor de un punto en el espacio, donde los granos permanecen, y es muy usual que se divida todo el espacio de simulación en ellas. Esta estrategia facilita, en las simulaciones llevadas por evento, la búsqueda de potenciales granos con los que podría chocar uno de ellos y define sectores donde se miden las cantidades de interés. Tener una lista de vecinos reducida también ayuda, en particular a las simulaciones llevadas por eventos, a tener una lista de eventos futuros más controlable y cuyas actualizaciones, que ocurren cuando un grano cambia su estado de movimiento, son de extensión considerablemente menor.

Al momento de realizar las mediciones numéricas, el marco usual que se ha utilizado hasta ahora se ha basado en que cada partícula está en una celda determinada, donde está su centro geométrico. Esta forma de considerar a las partículas, cuando la celda puede contener un gran número

de ellas, en promedio no reviste mayor error asociado. Cuando el sistema es reducido, o el tamaño de la ventana es menor, no es posible seguir los campos asociados a ellas en todo momento, dado que no sería aislado o extraño el caso donde no existen centros de esfera dentro de la celda y por ende no habría ninguna propiedad (masa, momentum, energía) considerada dentro de la celda en principio, y uno debe conformarse con promediar en tiempos largos sus valores, de modo de considerar instantes donde se encuentre el centro de alguna esfera dentro de la celda junto con las propiedades asociadas.

En esta tesis se ha explorado la posibilidad de distribuir los observables de cada partícula asociándolos a todas las celdas en que ella tiene alguna presencia y tomando en cuenta qué fracción de volumen de ella está en cada celda. Por consiguiente, los lugares del espacio donde no exista ninguna partícula tendrán todos los observables nulos. Un caso sencillo es, por ejemplo, que una partícula está $1/3$ del volumen en la celda A y $2/3$ en la celda B, en cuyo caso se contabiliza $1/3$ y $2/3$ de la masa, el momentum lineal y demás propiedades en cada una de estas dos celdas. Esto nos permitiría considerar como celdas participantes a un gran número de ellas y no tan solo la que contiene al centro del grano como si este fuese una partícula puntual.

Esta mirada sobre la distribución de las propiedades de un grano afecta la concepción de los campos microscópicos generados por el conjunto de partículas en el sistema. En particular, se hace posible generar campos que estén bien definidos en todo el sistema, si bien no tienen todas las propiedades matemáticas deseables, como derivada continua, que permitirían aplicar directamente teoremas importantes como el de Gauss a la divergencia de un campo. Por ejemplo, se genera un campo de densidad de masa que se interpreta independiente de la celda de medición: si se considera un punto dentro de un grano (a una distancia de su centro menor a su radio) la densidad en ese punto coincide con la de la partícula cercana, y en caso contrario sería nula. El caso opuesto, donde los campos no están bien definidos en todo el sistema, ocurre cuando se considera que toda la masa del disco está ubicada en el centro de la partícula como si fuese una partícula puntual, que es la simplificación usada extensamente en la literatura.

Los campos definidos en principio son de densidad de masa, momentum lineal y energía. Los dos últimos hacen uso también de la velocidad de traslación de la partícula para asociar cada propiedad definida a cada segmento del grano. A partir de ellos es posible definir la velocidad local microscópica y la temperatura granular, que se estudia como un promedio temporal a diferencia de los otros campos mencionados.

A partir de estos campos se ha desarrollado un detallado análisis que nos ha permitido conseguir ecuaciones de balance, similares a las ecuaciones hidrodinámicas continuas, para nuestro sistema de partículas discretas (y por ende tamaño finito) y ha logrado que las ecuaciones microscópicas continuas de estos sistemas granulares, incluso el caso de pocas partículas, reflejen la dinámica e interacción de los granos en tamaños de medición similares al de los granos.

Esta forma más cuidadosa de manejar la localización de cada partícula para definir nuestros observables tiene como consecuencia esperable que las ecuaciones continuas microscópicas de sistemas con relativamente pocas partículas, dentro del sistema y dentro las celdas de medición, tengan un comportamiento mucho más suave y menos fluctuante que con esquemas de medición que hasta ahora han estado en boga con partículas puntuales. Se prueba con algunos casos prácticos la validez y alcance de las ecuaciones, tanto en el tamaño del sistema, inhomogeneidades en los

campos y densidades locales.

Se ha extendido, a través de las ecuaciones de balance, la interpretación de los términos para definir un tensor de presión en todo punto del espacio que elimina las ambigüedades presentes en otros trabajos. El tensor de presión tiene las propiedades esperables para la presión y debe ser interpretada en conjunto con una celda de medición rectangular o paralelepípeda para entender la forma que toma cada una de sus componentes en relación a cada superficie que limita a la ventana de medición. Este tensor luego es usado en el contexto general de fluidos para calcular localmente la viscosidad de cizalle.

Esta forma de medir el tensor de presión, sin embargo, presenta diferencias significativas cuando se usa en simulaciones y se compara con resultados teóricos previos. Se darán a conocer estas diferencias tanto en 2 como 3 dimensiones, y en el final de este trabajo se darán algunas pistas de la raíz del problema como potenciales soluciones.

En los anexos se presenta la estructura del simulador utilizado en este trabajo, se discute también la posibilidad de incorporar la regla de colisión de discos duros en las ecuaciones de balance y sus implicancias. Se discute, finalmente, el cambio que se genera en el factor de estructura dinámico, una herramienta altamente utilizada en el estudio de fluidos en general, al considerar las propiedades de partículas con un volumen asociado. En la formulación no se generan diferencias monumentales con las definiciones usuales, pero aparece una función dependiente de la longitud de onda considerada, en el espacio de Fourier espacial, que permanece consistentemente en la definición y puede afectar la interpretación de los resultados.

1.4. Objetivos de la tesis

Estudiar las implicancias de considerar a los granos del medio fluidizado seco como si fuesen partículas puntuales, y las propiedades de cada grano concentradas en el centro, comparadas con considerar las propiedades individuales de cada grano distribuidas en todo el volumen (o área) de la partícula.

Estudiar, en particular, un sistema confinado de granos que presenta como interacciones solo choques instantáneos inelásticos tanto con sus vecinos como con los contornos del sistema. De este modo, describir mediante ecuaciones de balance, un sistema bidimensional con paredes térmicas y un sistema tridimensional de caja vibrada verticalmente.

Utilizar las ecuaciones que se obtengan para, al ser interpretadas, calcular propiedades locales del sistema en función de las características de las partículas que componen el medio. Medir estas cantidades microscópicas en simulaciones numéricas con granos de tamaño uniforme de modo de comprobar la efectividad de las ecuaciones de balance y sus alcances para describir propiedades de transporte de estos sistemas.

Extender esta formulación para explicitar el efecto que la consideración del volumen de los granos dentro del sistema al estudiar el factor de estructura, herramienta importante para la descripción de estados en y fuera del equilibrio de los fluidos [19].

1.5. Estructura del trabajo

En el capítulo 2 se presenta la formulación bidimensional del método de Goldhirsch junto a las ecuaciones de balance que se obtienen a partir de las definiciones básicas, junto a las definiciones de temperatura granular. Se dan algunos ejemplos sencillos donde las distintas cantidades son aplicables.

En el capítulo 3 se desarrollan las ecuaciones interpretando cada término, se derivan las expresiones para la presión colisional, la presión cinética y el flujo de calor, se agrega el efecto de las condiciones de borde.

En el capítulo 4 se describe un sistema simulado donde se mide cada uno de los términos deducidos. Se presentan las condiciones de borde para paredes térmicas, se discute el efecto de considerar partículas puntuales al calcular el centro de masa del sistema, se presentan mediciones de las diversas cantidades definidas en los capítulos anteriores.

En el capítulo 5 se estudia un sistema con muy pocas partículas donde se prueba la validez del método. El sistema también considera paredes térmicas como mecanismo de inyección de energía pero con solo 12 discos y 9 celdas de medición. Se presentan solo las mediciones de cantidades importantes y de las ecuaciones de balance.

En el capítulo 6 se desarrolla teóricamente el formalismo para el caso tridimensional, aplicando las definiciones y observaciones de los capítulos 2 y 3. A pesar de las similitudes, se hace hincapié en las sutiles diferencias y se presenta un camino distinto para derivar la ecuación de balance de momentum. Se incluye la energía potencial (gravitacional) como parte de la ecuación de balance de energía.

Se aplica este formalismo en el capítulo 7 a un sistema tridimensional numérico de caja baja vibrada verticalmente en presencia de gravedad, con condiciones de borde periódicas en el plano horizontal. Se presentan diversos resultados, incluyendo la medición de presión y el coeficiente de roce viscoso.

En el capítulo 8 se discute el problema de la medición de la presión con un ejemplo práctico donde la definición propuesta en este trabajo no captura la cantidad esperada. Se proponen modificaciones a esta definición para dar cuenta de esta situación y se detallan algunas de las dificultades que podrían persistir en las modificaciones.

Finalmente en el capítulo 9 se presentan las conclusiones de este trabajo y su alcance futuro.

En el anexo A se dan algunos detalles sobre el simulador de dinámica molecular utilizado. En el anexo B se hace uso de la regla de choque en el modelo de esferas duras para modificar las ecuaciones de balance. En el anexo C se presentan los efectos que tiene incluir en el estudio del factor de estructura (dinámico y estático) a granos con volumen por sobre partículas puntuales.

1.6. Resumen de símbolos

| | |
|---|--|
| • Las partículas tienen subíndice | i o j |
| • Radio de la i -ésima partícula | R_i |
| • Masa de la i -ésima partícula | m_i |
| • Posición partícula i -ésima | \vec{r}_i |
| • Velocidad partícula i -ésima | \vec{v}'_i |
| • Sumatoria sobre partículas | $\sum_{i=1}^N$ o $\sum_{j=1}^N$ |
| • Sumatoria sobre direcciones | \sum_{α} o \sum_{β} |
| • Gradiente | $\vec{\nabla} = \sum_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}$ |
| • Función delta de Dirac | $\delta(\vec{r})$ |
| • Función de Heaviside | $\Theta[x] = \begin{cases} 1 & : x > 0 \\ 0 & : x < 0 \end{cases}$ |
| • Velocidad peculiar de la i -ésima partícula | \vec{v}'_i |
| • Velocidad fluctuante de la i -ésima partícula | \vec{C}_i |
| • Función grado de libertad o “gauge” | \vec{u} |
| • Viscosidad de cizalle (shear viscosity) | η |
| • Viscosidad de cuerpo (bulk viscosity) | ζ |

1.6.1. Símbolos para el sistema 2D

| | |
|--|----------------------------|
| • Densidad de masa de cada grano | δ_i |
| • Campo de densidad de masa | ρ_{2D} |
| • Campo de densidad de momentum | \vec{P}_{2D} |
| • Campo de densidad de energía total (solo cinética) | E_{2D} |
| • Temperatura granular | T_{2D} |
| • Tensor de presión | $\mathbb{P}_{\alpha\beta}$ |

- Integral sobre una celda
- Transformada de Fourier
- Anti-transformada de Fourier

$$\iint_{\text{celda}} \equiv \int_{x_o}^{x_f} dx \int_{y_o}^{y_f} dy$$

$$\tilde{f}(\vec{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)} \iint f(\vec{r}, t) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} dx^2$$

$$f(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)} \iint \tilde{f}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} dk^2$$

1.6.2. Símbolos para el sistema 3D

- Densidad de masa de cada grano
- Campo de densidad de masa
- Campo de densidad de momentum
- Campo de densidad de energía cinética
- Campo de densidad de energía potencial
- Campo de densidad de energía total
- Temperatura granular
- Tensor de presión

ρ_i

ρ_{3D}

\vec{P}_{3D}

K_{3D}

U_{3D}

E_{3D}

T_{3D}

$\mathbb{P}_{\alpha\beta}$

- Integral sobre una celda
- Transformada de Fourier
- Anti-transformada de Fourier

$$\iiint_{\text{celda}} \equiv \int_{x_o}^{x_f} dx \int_{y_o}^{y_f} dy \int_{z_o}^{z_f} dz$$

$$\tilde{f}(\vec{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint f(\vec{r}, t) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} dx^3$$

$$f(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint \tilde{f}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} dk^3$$

Capítulo 2

Campos hidrodinámicos en un sistema bidimensional

2.1. Sumario

En este capítulo se definirán los campos hidrodinámicos densidad, momentum y energía cinética que luego se utilizarán para encontrar ecuaciones de balance para estos campos. Se discutirá cómo las definiciones y ecuaciones pueden ser tratadas en forma práctica dentro de las simulaciones numéricas, pero se darán ejemplos sencillos donde los campos son calculados analíticamente y situaciones donde las ecuaciones pueden ser puestas a prueba.

2.2. Introducción

En los primeros capítulos de este trabajo se considerará un sistema bidimensional en que las partículas son discos de radio R_i con masa m_i distribuida uniformemente en el área dentro del disco, es decir tienen densidad δ_i . Cada una es descrita y seguida por la posición de su centro $\vec{r}_i(t)$ y tiene como propiedad asociada su velocidad instantánea $\vec{v}_i(t)$. No se incluye la rotación de los discos en este modelo, aunque es posible extenderlo.

Esto describe al sistema completo en el tiempo t , y si se deja evolucionar se producirán colisiones entre discos o, si las hay, también con las paredes de la caja donde están contenidos.

2.3. Definiciones en 2D

La distancia entre un punto $\vec{r} = (x, y, z)$ del espacio al centro de la partícula i -ésima $\vec{r}_i(t)$ quedará definida por:

$$|\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D} = \sqrt{(x - x_i(t))^2 + (y - y_i(t))^2} .$$

2.3.1. Campos microscópicos con masas puntuales

En la literatura [8, 15, 19, 20] se utilizan a menudo varios campos microscópicos que consideran a los granos como partículas puntuales. Para describir el estado del sistema en el tiempo t se hace

uso de los campos creados a partir de las propiedades individuales de los discos (masa, posición y velocidad). De esta forma se tienen los siguientes campos:

- Densidad de masa en el espacio:

$$\rho_\delta(\vec{r}, t) = \sum_i m_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.1)$$

- Densidad de momentum:

$$\vec{P}_\delta(\vec{r}, t) = \sum_i m_i \vec{v}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.2)$$

- Densidad de energía:

$$E_\delta(\vec{r}, t) = \sum_i m_i \frac{v_i^2}{2} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.3)$$

En estas ecuaciones se debe reconocer a m_i como la masa total de la partícula i -ésima, \vec{r}_i la posición de su centro, \vec{v}_i su velocidad y δ la función de delta de Dirac en dos dimensiones.

2.3.2. Campos microscópicos con partículas con volumen

En contraste con esta idea, se destaca [15] que cada partícula del sistema posee un área de localización, y es necesario distribuir la propiedad en función de su localización en forma de un campo de densidad. En [15] se desarrollan estas ideas con una función general para describir la transmisión de esfuerzos en un sistema granular sometido a cizalle.

En este trabajo se extenderá este método para describir un sistema fluidizado donde los granos no están en contacto de forma permanente, las colisiones son instantáneas en el tiempo bajo el modelo de esferas duras. Se utilizará como función distribución solamente la función escalón de Heaviside Θ , en desmedro de la función delta de Dirac δ utilizada usualmente u otras. Esta decisión se justifica bajo la premisa de que se quiere describir la influencia del tamaño de los granos en la descripción del sistema, y para ello se incluyen explícitamente los límites de los granos en la descripción matemática del sistema.

Con estas consideraciones, se define la densidad de masa en todo el espacio en el tiempo t como sigue:

$$\rho_{2D}(x, y, t) \equiv \sum_{i=1}^N \delta_i \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] , \quad (2.4)$$

donde δ_i es la constante para que la integral de la densidad en todo el sistema sea igual a la masa total dentro del volumen, es decir $\delta_i = m_i / (\pi R_i^2)$.

La interpretación de esta función es simple: Si uno se encuentra a distancia menor que R del centro de algún disco, la densidad en ese lugar será δ_i . En caso contrario, la densidad será nula. Como los discos son sólidos, y en el modelo los choques son instantáneos sin deformaciones, puede haber un único disco que esté suficientemente cerca de un punto del espacio en un instante dado de tiempo.

Análogamente se define la densidad de momentum en el espacio:

$$\vec{P}_{2D}(x, y, t) \equiv \sum_{i=1}^N \delta_i \vec{v}_i \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \quad (2.5)$$

y la densidad de energía en función del tiempo

$$E_{2D}(x, y, t) \equiv \sum_{i=1}^N \delta_i \frac{(\vec{v}_i)^2}{2} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] . \quad (2.6)$$

Solo se incluye la energía cinética, y no la de gravedad, pues en el caso bidimensional se elegirán sistemas sencillos sin presencia de gravedad para permitir una comparación directa con resultados teóricos previos. Todas las interacciones con las paredes, de existir en el sistema, no están presentes en las ecuaciones pues su influencia corresponde a la de las condiciones de borde y no se pueden reducir a funciones potencial dependientes de la posición, por lo que se estudian independientemente.

A partir de estas definiciones se puede definir el campo de velocidad local:

$$\vec{V}_{2D}(x, y, t) \equiv \frac{\vec{P}_{2D}(x, y, t)}{\rho_{2D}(x, y, t)} , \quad (2.7)$$

siempre que $\rho_{2D}(x, y, t) \neq 0$. En caso que $\rho_{2D}(x, y, t) = 0$ se considera que $\vec{V}_{2D}(x, y, t) \equiv 0$, debido a que no hay ningún grano en ese lugar. Esta última consideración garantiza que el campo de velocidad local está bien definida en todo el espacio. Esta expresión ayudará posteriormente a dar una interpretación a las ecuaciones de balance.

Este último conjunto de definiciones ((2.4), (2.5) y (2.6)) serán las utilizadas a lo largo de este trabajo.

2.4. Integración en una celda

Una celda de medición es un subespacio de la región en que evolucionan los granos de cualquier forma y tamaño, fijo en el tiempo, que se usa para establecer una ventana para medir las propiedades del sistema y obtener un valor local a la celda. Esta forma de construir las celdas es consistente con la forma de estudiar los fluidos de Euler. Por ejemplo, si se mide densidad en un instante de tiempo, se establece la masa dentro de la celda y se divide por el área (volumen en el caso 3D) total de la celda. En general, para este trabajo se utilizan celdas rectangulares (paralelepípedo para el caso 3D) que teselan el espacio total de la simulación.

Para ilustrar cómo se realiza la medición se toma como ejemplo a la densidad. Se integra la función densidad definida (2.4) en el espacio dentro de la celda:

$$\begin{aligned} \iint_{\text{celda}} \rho_{2D}(x, y, t) d^2 r &= \sum_{i=1}^N \delta_i \iint_{\text{celda}} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \\ &= \sum_{i=1}^N \delta_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) , \end{aligned}$$

donde $\mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))$ depende de si el disco i -ésimo está totalmente dentro de la celda, atraviesa una de las paredes de la celda o atraviesa dos paredes de la celda.

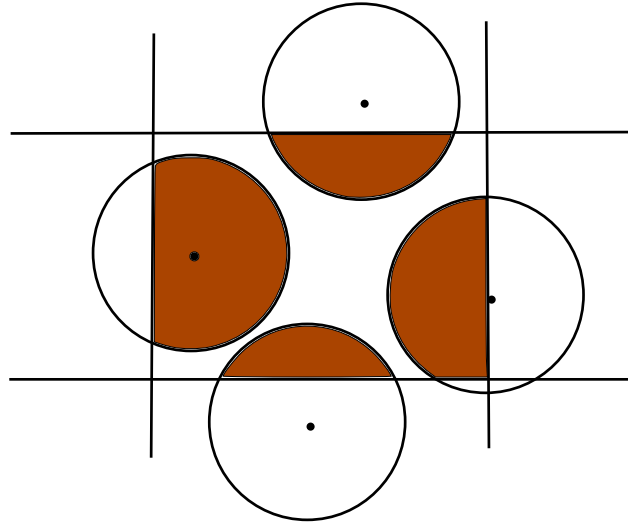


Figura 2.1: Densidad en una celda. Cada disco aporta con una porción de su masa señalada por el área coloreada en la figura.

En la figura 2.1 se muestra cómo, dentro de una celda, cada partícula aporta a la medición de la densidad en proporción al área del disco que se encuentra dentro de la celda. Esto es independiente de si el centro del disco está dentro o fuera de la celda, pero ciertamente depende de la posición del centro para determinar el tamaño de cada área considerada. La suma de las regiones dentro de la celda (coloreadas en la figura) determinan a la masa total dentro de esta, que se promedia en el volumen de la celda.

Hay cuatro posibilidades que definen $\mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))$ de forma diferente, y están ilustradas en la figura 2.2:

$$\mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) = \begin{cases} \pi R^2 & : \text{ Si la esfera está completamente contenida en la celda} \\ \mathbb{I}_{2c}(d) & : \text{ Si la esfera está dividida en 2 trozos o} \\ & \text{ está dividida en 3 trozos y el área considerada no contiene el centro} \\ \mathbb{I}_{3c}(d_1, d_2) & : \text{ Si la esfera está dividida en 3 trozos} \\ & \text{ y el segmento considerado contiene al centro} \\ \mathbb{I}_{4c}(d_1, d_2) & : \text{ Si la esfera está dividida en 4 trozos} \end{cases}$$

En el caso 2D, las integrales son calculables analíticamente en función de las distancias a las paredes de la celda con el centro de la esfera. Usando los parámetros d , d_1 y d_2 definidos en la

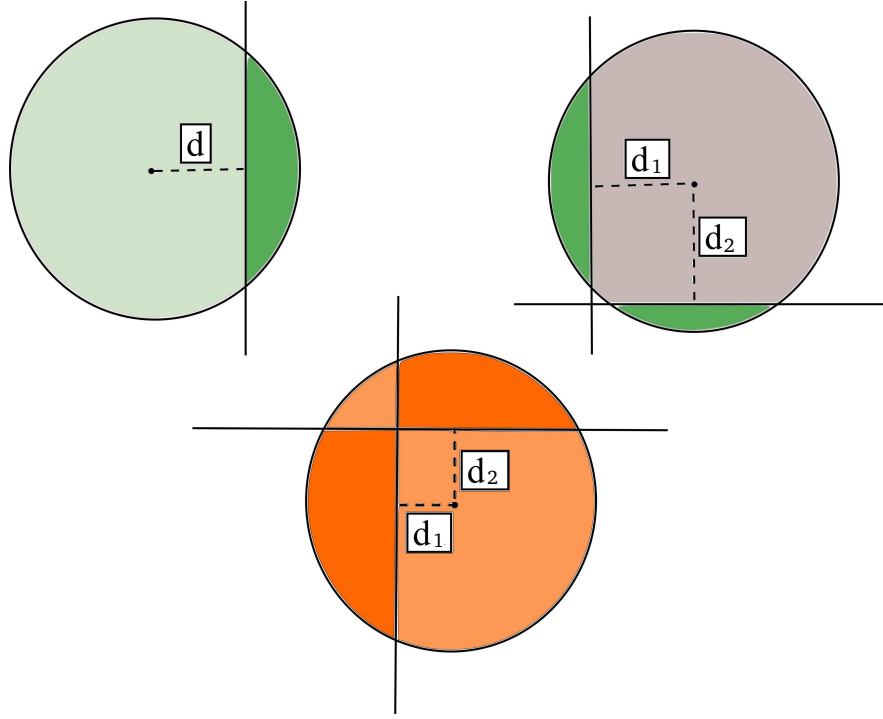


Figura 2.2: $\mathbb{I}_{\text{celda}}$ en sus distintos casos: \mathbb{I}_{2c} en verde, \mathbb{I}_{3c} en gris y \mathbb{I}_{4c} en naranja.

figura 2.2, se obtiene:

$$\begin{aligned} \mathbb{I}_{2c}(d) &= R_i^2 \left(\arccos\left(\frac{d}{R_i}\right) - \frac{d}{R_i} \sqrt{1 - \left(\frac{d}{R_i}\right)^2} \right), \\ \mathbb{I}_{3c}(d_1, d_2) &= \pi R_i^2 - \mathbb{I}_{2c}(d_1) - \mathbb{I}_{2c}(d_2), \\ \mathbb{I}_{4c}(d_1, d_2) &= \frac{R_i^2}{2} \left(\frac{2d_1 d_2}{R_i^2} - \frac{d_1}{R_i} \sqrt{1 - \frac{d_1^2}{R_i^2}} - \frac{d_2}{R_i} \sqrt{1 - \frac{d_2^2}{R_i^2}} + \arccos\left(\frac{d_1}{R_i}\right) - \arcsin\left(\frac{d_2}{R_i}\right) \right), \end{aligned}$$

que complementan la definición de $\mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))$.

2.4.1. Ejemplos de medición de densidad en una celda (en el tiempo)

A pesar de que en la práctica las mediciones deben realizarse de forma discreta en el tiempo, en sistemas sencillos es posible calcular los campos dentro de la celda de forma continua. Para ello a continuación se dan dos ejemplos.

El primero de ellos consiste en un disco pasando entre dos celdas. Su velocidad perpendicular a la pared que divide a las dos celdas es la relevante para el proceso, dado que se integra sobre la totalidad de cada celda independientemente. Se debe considerar por ende que las celdas son suficientemente grandes para que el proceso no involucre a otra celda. Sin pérdida de generalidad, en este ejemplo la partícula se mueve en dirección \hat{x} y las celdas comparten una pared vertical (figura 2.3).

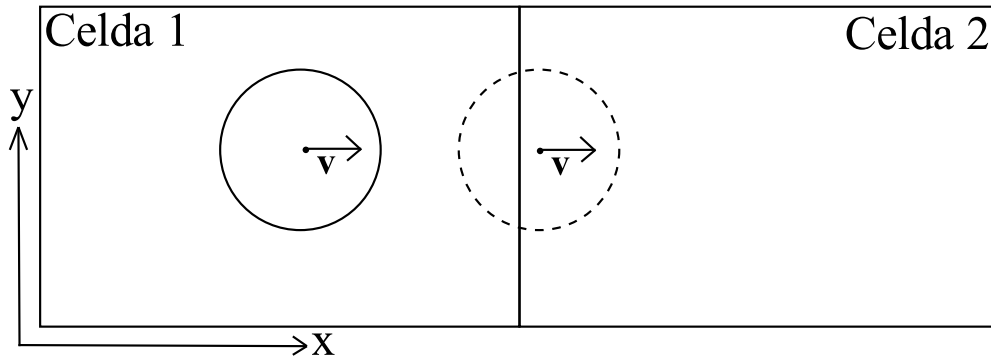


Figura 2.3: Disco pasando entre dos celdas. Línea sólida: condición inicial. Línea segmentada: estado intermedio.

Se grafica en la figura 2.4 la porción de masa del disco en cada celda. En $t = 0$ el centro del disco cambia de celda y su velocidad es tal que avanza un diámetro en un periodo de tiempo. La porción de masa está normalizada por la masa total del disco. Se puede notar que la masa en la celda 1 es complementaria a la masa en la celda 2.

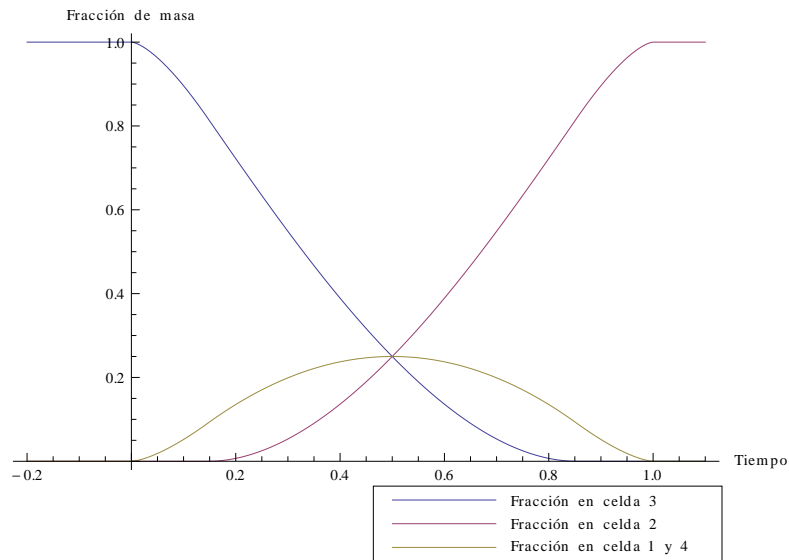


Figura 2.4: Porción de disco mientras pasa de una celda a otra (dividida solo entre dos celdas).

En este gráfico se observa que la masa pasa suavemente de una celda a otra. Todo el proceso se desarrolla en un intervalo de tiempo finito (entre masa nula a masa total del disco). En todo tiempo es calculable de manera exacta la masa total dentro de la celda.

Como segundo ejemplo se considera un disco viajando en línea recta con inclinación $\pi/4$ con respecto a \hat{x} (figura 2.5). La masa pasa por cuatro celdas distintas en distinta proporción dependiendo del tiempo. Esta configuración hace que $d_1 = d_2$ cuando se calcula $\mathbb{I}_{\text{celda}}$.

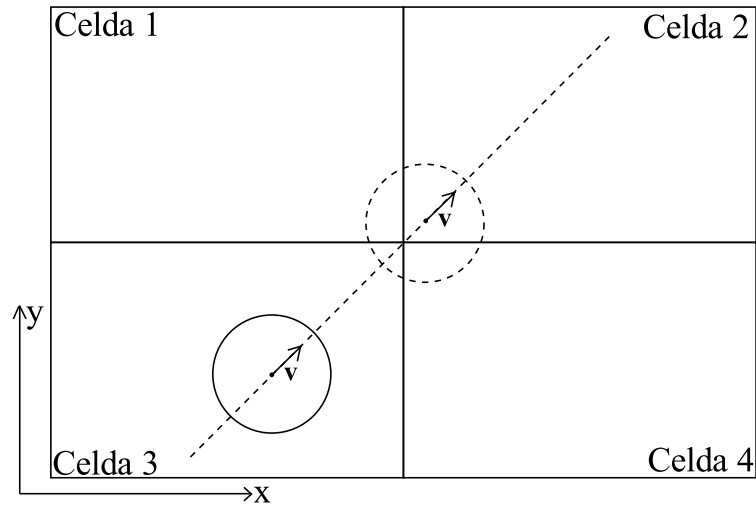


Figura 2.5: Disco pasando entre cuatro celdas. Línea sólida: condición inicial. Línea segmentada: estado intermedio y trayectoria del centro.

La velocidad del disco es tal que avanza un diámetro en un periodo de tiempo, y el disco está en la esquina superior derecha de la celda 3 en $t = 0$ (sin atravesar a las otras celdas). En la figura 2.6 se grafica la fracción de masa en cada una de las celdas. Por simetría, la fracción en las celdas 1 y 4 es igual.

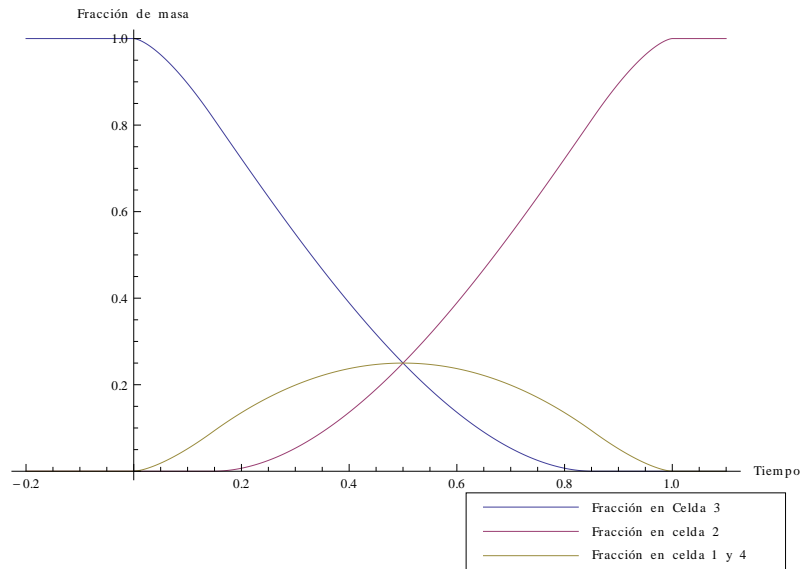


Figura 2.6: Porción de disco mientras pasa de una celda a otra (dividida entre cuatro celdas)

Es posible observar que hay una fracción del volumen que pasa a dos celdas que, usando la distribución usual considerando partículas puntuales no hubiesen sido tomadas en cuenta ya que el centro del disco no transita por ninguna de ellas. Todos los cambios son suaves y se observa el lugar donde el centro pasa de la celda 3 a la celda 2, en que las tres curvas se encuentran.

Se pueden extender estas observaciones a los otros campos, pues también dependen del área integrada de cada disco sobre el área total de la celda. Al tener esto en cuenta, el siguiente paso es encontrar ecuaciones que nos permitan, dado el estado del sistema, predecir de forma exacta los cambios en los campos que ocurran en el tiempo.

2.5. Ecuación de balance de masa

El cambio local de la masa en el tiempo está bien definido en [15]. En él se hace uso de forma general de la función de distribución de masa (en este caso la función es Heaviside). Se presenta a continuación la deducción:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\rho_{2D}(x,y,t)) &= \frac{\partial}{\partial t} \sum \delta_i \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \\
&= - \sum \delta_i \delta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \frac{\partial}{\partial t} (|\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}) \\
&= - \sum \delta_i \delta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \frac{\vec{r} - \vec{r}_i(t)}{|\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \vec{r}_i(t) \\
&= - \sum \delta_i \vec{v}_i(t) \cdot \vec{\nabla} (\Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}]) \\
&= - \vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{2D}(x,y,t) = - \vec{\nabla} \cdot (\rho_{2D} \vec{V}_{2D}) .
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Esta ecuación tiene una interpretación sencilla a su vez: el cambio local de masa se debe al movimiento de los granos en el espacio. Es decir, el campo de velocidad local mueve a la masa local.

2.5.1. Integración en celda

En la práctica, se debe integrar esta ecuación sobre la celda de medición de modo de predecir el futuro cambio de masa dentro de ella. Se presenta el detalle de los cálculos realizados para incorporar esta medición en las simulaciones numéricas.

Integrando se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_{\text{celda}} (\rho_{2D}(x,y,t)) dx dy = - \iint_{\text{celda}} \left(\sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} P_{2D\beta}(x,y,t) \right) dx dy , \tag{2.9}$$

donde hay que desarrollar el término dentro de la integral de la derecha, usando la definición de P_{2D} (2.5):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} P_{2D\beta} &= \sum_{i=1}^N \delta_i (\vec{v}_i \cdot \hat{e}_{\beta}) \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \\
&= - \sum_{i=1}^N \delta_i (\vec{v}_i \cdot \hat{e}_{\beta}) \delta (R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}) \frac{(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \cdot \hat{e}_{\beta}}{|\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}} .
\end{aligned}$$

Incorporando este resultado al término de la derecha de la ecuación (2.9):

$$- \iint_{\text{celda}} \left(\sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \vec{P}_{2D\beta}(x,y,t) \right) dx dy = \sum_{i=1}^N \delta_i \iint_{\text{celda}} \delta (R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}) \left(\vec{v}_i \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}_i(t)}{|\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}} \right) dx dy .$$

Haciendo un cambio de variables a un sistema de referencia centrado en cada disco, es decir $\vec{r} - \vec{r}_i(t) = \vec{r}_c$, se tiene:

$$- \iint_{\text{celda}} \left(\sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \vec{P}_{2D\beta}(x,y,t) \right) dx dy = \sum_{i=1}^N \delta_i \iint_{\text{celda}} \delta(R_i - r_c) \left(\vec{v}_i \cdot \frac{\vec{r}_c}{r_c} \right) dx dy . \quad (2.10)$$

Y finalmente usando coordenadas polares se llega a:

$$- \iint_{\text{celda}} \left(\sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \vec{P}_{2D\beta}(x,y,t) \right) dx dy = \sum_{i=1}^N \delta_i \int_{\text{arco en celda}} (\vec{v}_i \cdot \hat{r}_c(\theta) R_i d\theta) .$$

El cambio de variable se hace para cada disco, es decir para cada integral, independiente de si está fuera o dentro de la celda de medición, pero rápidamente se concluye que los discos que estén completamente dentro de la celda o completamente fuera de ella no aportan a la sumatoria final, dado que la integral se realizaría sobre todo el contorno del disco y es nula.

Si se aísla la parte integral de esta ecuación, se define:

$$\vec{H}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) = \int_{\text{arco en celda}} \hat{r}(\theta) R d\theta . \quad (2.11)$$

Es patente que si se completa el arco alrededor de todo el disco esta cantidad será nula. Esta última integral de línea sería realizada sobre el arco de la figura 2.7, donde se define además el significado de θ_i y θ_f .

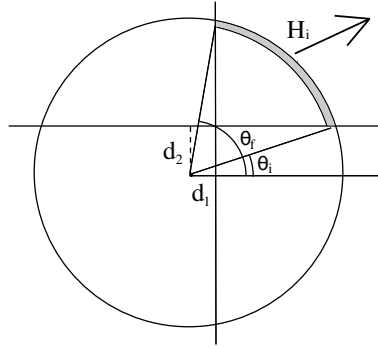


Figura 2.7: La figura muestra la porción de arco involucrada en la integral de la celda superior derecha, con sus ángulos iniciales y finales.

En definitiva se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \rho_{2D}(x,y,t) dx dy \right) = \sum_{i=1}^N \delta_i (\vec{v}_i \cdot \vec{H}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) , \quad (2.12)$$

donde $\vec{H}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)$ puede calcularse de forma exacta para el caso 2D. Por ejemplo, para el arco señalado en la figura 2.7:

$$\begin{aligned} \vec{H}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) &= (R_i \sin(\theta_f) - R_i \sin(\theta_i), R_i \cos(\theta_i) - R_i \cos(\theta_f)) \\ &= \left(\sqrt{R_i^2 - d_1^2} - d_2, d_1 + \sqrt{R_i^2 - d_2^2} \right) . \end{aligned} \quad (2.13)$$

Los otros arcos de circunferencia deben ser calculados en cada caso independientemente. Esta ecuación (2.12) tiene una interpretación sencilla: el cambio de la masa dentro de la celda de medición puede cuantificarse de forma instantánea mediante la proyección del arco de los disco, que está atravesando las paredes de la celda, sobre cada dirección ponderado por la velocidad en esa dirección. Este cambio puede medirse de forma exacta en todo el tiempo si se conoce la evolución de la posición de las partículas.

2.6. Ecuación de balance de momentum

A pesar de que en el artículo [15] también se desarrolla una expresión para la evolución temporal del momentum, debido a que se considera el modelo de interacción de Hertz en su deducción, se hace necesario derivar de forma particular esta ecuación para el caso de las esferas duras. Se parte de la definición de momentum en 2D (2.5) y se deriva con respecto al tiempo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{2D}(x, y, t) = \sum_{i=1}^N \left\{ \delta_i \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{v}_i \right) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] + \delta_i \vec{v}_i \left(\frac{\partial}{\partial t} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right) \right\}, \quad (2.14)$$

donde se tienen dos términos que se deben desarrollar en detalle en forma independiente.

El primer término de (2.14) es:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\delta_i \vec{v}_i) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] = \vec{f}_i \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}]$$

y corresponde al cambio de momentum de las partículas. Esto se debe a las fuerzas que afectan a los discos, pero como no se incluye a la gravedad esto significa que la única fuente de fuerzas son las colisiones entre partículas o colisiones de partículas con las paredes que limitan el espacio. El caso de las colisiones con las paredes se incluirá en las condiciones de borde para las ecuaciones de balance. Por ello se propone la siguiente definición:

$$\vec{f}_i = \sum_{j=1}^N \vec{f}_{i,j} = \sum_{j=1}^N \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t - t^*), \quad (2.15)$$

donde se define:

$$\Delta^{2D} \vec{v}_{ij} = \begin{cases} \vec{v}_i^+ - \vec{v}_i^0 & : \text{ Si } i \text{ ha chocado con } j \text{ en } t = t^* \\ 0 & : \text{ si no han chocado } i \text{ con } j \end{cases}$$

y \vec{v}_i^0 se refiere a la velocidad de impacto de i y \vec{v}_i^+ a la velocidad justo después del choque como está descrito en el modelo de esferas duras. Esta definición describe entonces a los choques de duración instantánea pero de cambio finito de velocidad.

Al desarrollar el último término de la ecuación (2.14) se llega a:

$$\begin{aligned} \delta_i \vec{v}_i \left(\frac{\partial}{\partial t} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right) &= - \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} (\delta_i \vec{v}_i \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] (\vec{v}_i \cdot \hat{e}_{\beta})) \\ &= - \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left(\frac{\vec{P}_{2D} P_{2D\beta}}{\rho_{2D}} \right) \\ &= - \vec{\nabla} \cdot ((\vec{P}_{2D}) \vec{V}_{2D}) . \end{aligned}$$

Este término es similar en estructura al encontrado para la ecuación de balance de masa (2.8), y corresponde al transporte de momentum debido a la velocidad local del sistema. No se ha hecho uso de la velocidad peculiar como se ha hecho en [15] dado que, por definición, es nula para todo momento y lugar. Se dará detalle de este resultado al discutir la temperatura granular en este capítulo, sección 2.10.

Con esta definición se tiene la ecuación de balance de momentum:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{2D}(x, y, t) = \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} - \vec{\nabla} \cdot \left((\vec{P}_{2D}) \vec{V}_{2D} \right) . \quad (2.16)$$

2.6.1. Integración en celda

Se ha integrado sobre la celda de medición la ecuación de balance de momentum (2.16). Estos resultados son exclusivos de este trabajo, dadas las consideraciones necesarias para llegar a la ecuación de balance.

Para el segundo término de la mano derecha de la ecuación (2.16) en principio se podría aplicar el teorema de Gauss y calcular los flujos de $(P_{2D})V_{2D} \cdot \hat{n}$, con \hat{n} el vector normal a cada pared de la celda integrada, pero la función no tiene derivada continua, de modo que es necesario tomar consideraciones adicionales para aplicar este teorema. Se ha elegido no utilizar este mecanismo y resolver las discrepancias utilizando las derivadas explícitamente, de modo que se tiene:

$$\begin{aligned} \iint_{\text{celda}} \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{2D}(x, y, t) dx dy &= \iint_{\text{celda}} \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} dx dy \\ &\quad - \iint_{\text{celda}} \vec{\nabla} \cdot \left((\vec{P}_{2D}) \vec{V}_{2D} \right) dx dy , \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \vec{P}_{2D}(x, y, t) dx dy \right) &= \sum_{i,j=1}^N \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \left\{ \iint_{\text{celda}} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] dx dy \right\} \\ &\quad + \sum_{i,j=1}^N \delta_i \vec{v}_i \iint_{\text{celda}} \left(\delta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \vec{v}_i \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}_i(t)}{|\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}} \right) dx dy , \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \vec{P}_{2D}(x, y, t) dx dy \right) &= \sum_{i,j=1}^N \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) \\ &\quad + \sum_{i,j=1}^N \delta_i \vec{v}_i \int_{\text{arco en celda}} \vec{v}_i \cdot \hat{r}(\theta) R d\theta , \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \vec{P}_{2D}(x, y, t) dx dy \right) &= \sum_{i,j=1}^N \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) + \sum_{i,j=1}^N \delta_i \vec{v}_i (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) . \quad (2.17) \end{aligned}$$

Con esta última ecuación es posible seguir la evolución del momentum dentro de la celda conociendo posición y velocidad de cada partícula (usados para calcular $\vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)$ por ejemplo). Como reflexión, si el disco está completamente contenido en la celda no aporta al segundo término, y

con el primero se tiene que si ambas partículas involucradas en el choque están dentro de la celda entonces no cambian el momentum de la celda dado que los choques conservan momentum.

2.7. Ecuación de balance de energía

En esta sección se analizará una tercera ecuación de balance que no está incluida en [15]. La razón es intentar completar el sistema de ecuaciones para tener un sistema de ecuaciones cerrado que pueda resolverse y sea más cercano a las ecuaciones de fluidos newtonianos clásicos. El único tipo de energía presente en este sistema es la cinética, pero para el caso tridimensional se estudia la inclusión de energías potenciales provenientes de campos externos en el capítulo 6.

Para derivar la ecuación de balance se parte de la definición de la energía cinética y se deriva con respecto al tiempo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} \right) = \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{2D} - \frac{1}{2} \left(\frac{P_{2D}}{\rho_{2D}} \right)^2 \frac{\partial}{\partial t} \rho_{2D}.$$

Se usan las ecuaciones de balance obtenidas para el cambio de momentum (2.16) y masa (2.8):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} \right) &= \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \cdot \left(\sum_{i=1}^N \{ \vec{f}_i \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \} - \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\vec{P}_{2D} \right) \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \right) \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\frac{P_{2D}}{\rho_{2D}} \right)^2 (\vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{2D}). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Desarrollando el primer término del lado derecho:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \sum_{i=1}^N \{ \vec{f}_i \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \} &= \sum_{i=1}^N \{ \vec{v}_i \cdot \vec{f}_i \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \} \\ &= \sum_{i,j=1}^N \{ \delta_i \vec{v}_i \cdot (\Delta^{2D} \vec{v}_{ij}) \delta(t - t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \}. \end{aligned}$$

Se debe interpretar el término $\vec{v}_i \cdot (\Delta^{2D} \vec{v}_{ij})$. La sutileza es que, al evaluar un choque necesariamente se tendría que asociar \vec{v}_i a la velocidad del disco en el choque. Pero no hay una velocidad durante el choque que esté bien definida, sino una antes y otra después de él. Por ello \vec{v}_i se define en esta expresión como el promedio de la velocidad antes y después del choque de modo que sea consistente con el cambio de energía experimentado en el sistema, es decir:

$$\begin{aligned} \vec{v}_i \cdot (\Delta^{2D} \vec{v}_{ij}) &= \vec{v}_i \cdot (\vec{v}_i^+ - \vec{v}_i^0) \\ &= \frac{\vec{v}_i^+ + \vec{v}_i^0}{2} \cdot (\vec{v}_i^+ - \vec{v}_i^0) \\ &= \frac{(\vec{v}_i^+)^2 - (\vec{v}_i^0)^2}{2} = \Delta^{2D} \left(\frac{v_{ij}^2}{2} \right). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Llevando este resultado al primer término de la ecuación (2.18):

$$\frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \sum_{i=1}^N \{ \vec{f}_i \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \} = \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \Delta^{2D} \left(\frac{(\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \delta(t - t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\}, \quad (2.20)$$

donde el término $\delta_i \Delta^{2D} \left(\frac{(\vec{v}_{ij})^2}{2} \right)$ corresponde al cambio de energía cinética producto del choque del i -ésimo disco con el j -ésimo disco, en caso de que t^* esté en el intervalo de tiempo de medición.

Con el segundo término de (2.18) se tiene:

$$\begin{aligned} -\frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \cdot \left(\vec{\nabla} \cdot \left(\left(\vec{P}_{2D} \right) \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \right) \right) &= -\sum_{\alpha,\beta} \frac{P_{2D,\alpha}}{\rho_{2D}} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(P_{2D\alpha} \frac{P_{2D\beta}}{\rho_{2D}} \right) \\ &= -\sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{P_{2D\alpha} P_{2D,\alpha}}{\rho_{2D}^2} \frac{\partial}{\partial x_\beta} P_{2D\beta} + \frac{P_{2D\alpha} P_{2D\beta}}{\rho_{2D}} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{P_{2D\alpha}}{\rho_{2D}} \right), \end{aligned} \quad (2.21)$$

y el tercer término de (2.18) corresponde a:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{P_{2D}}{\rho_{2D}} \right)^2 (\vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{2D}) = \sum_{\alpha,\beta} \frac{1}{2} \frac{P_{2D\alpha} P_{2D\alpha}}{\rho_{2D}^2} \frac{\partial}{\partial x_\beta} P_{2D\beta}. \quad (2.22)$$

Sumando (2.21) y (2.22) se obtiene:

$$\begin{aligned} -\frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \cdot \left(\vec{\nabla} \cdot \left(\left(\vec{P}_{2D} \right) \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \right) \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{P_{2D}}{\rho_{2D}} \right)^2 (\vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{2D}) \\ &= -\sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{P_{2D\alpha} P_{2D\alpha}}{2\rho_{2D}^2} \frac{\partial}{\partial x_\beta} P_{2D\beta} + 2 \frac{P_{2D\alpha} P_{2D\beta}}{2\rho_{2D}} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{P_{2D\alpha}}{\rho_{2D}} \right) \\ &= -\sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\frac{P_{2D\alpha} P_{2D\alpha}}{2\rho_{2D}} \frac{P_{2D\beta}}{\rho_{2D}} \right) \\ &= -\vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{2D}^2}{2\rho_{2D}} \right) \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \right). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Finalmente, considerando (2.20) y (2.23), se obtiene la ecuación de balance de energía:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} \right) &= \sum_{i,j=1}^N \left\{ \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i (\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} \\ &\quad - \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{2D}^2}{2\rho_{2D}} \right) \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \right). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Se puede reconocer la misma estructura que la ecuación de balance de momentum (2.16): el primer término corresponde al cambio de energía producto de los choques entre granos y el segundo término corresponde al cambio de energía producto de la velocidad local que transporta energía.

2.7.1. Integración en celda

Integrando sobre la celda la ecuación (2.24) se obtiene:

$$\begin{aligned}
\iint_{\text{celda}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} \right) dx dy &= \iint_{\text{celda}} \sum_{i,j=1}^N \left\{ \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i(\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} dx dy \\
&+ \iint_{\text{celda}} \sum_{i=1}^N \frac{\delta_i(\vec{v}_i)^2}{2} \left(\vec{v}_i \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}_i(t)}{|\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}} \right) \delta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] dx dy \\
\frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} dx dy \right) &= \sum_{i,j=1}^N \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i(\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \delta(t-t^*) \left\{ \iint_{\text{celda}} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] dx dy \right\} \\
&+ \sum_{i=1}^N \frac{\delta_i(\vec{v}_i)^2}{2} \int_{\text{arco en celda}} (\vec{v}_i \cdot \hat{r}(\theta)) R d\theta \\
\frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} dx dy \right) &= \sum_{i,j=1}^N \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i(\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \delta(t-t^*) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) \\
&+ \sum_{i=1}^N \frac{\delta_i(\vec{v}_i)^2}{2} \vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) . \tag{2.25}
\end{aligned}$$

Análogamente con la ecuación de balance de momentum, se puede observar que la evolución temporal de la energía en la celda puede descomponerse en un término que depende de los choques entre discos junto a otro que da cuenta del movimiento de la energía cinética producto de la velocidad local. Con esta información se puede predecir con exactitud el cambio en forma continua.

2.8. Recapitulando las ecuaciones

Los cambios locales de los campos cumplen:

- Balance de masa en la celda:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_{2D}(x, y, t)) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{2D}(x, y, t) = -\vec{\nabla} \cdot (\rho_{2D} \vec{V}_{2D}) . \tag{2.8}$$

- Balance de momentum en la celda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{2D}(x, y, t) = \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} - \vec{\nabla} \cdot \left((\vec{P}_{2D}) \vec{V}_{2D} \right) . \tag{2.16}$$

- Balance de energía en la celda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} \right) = \sum_{i,j=1}^N \left\{ \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i(\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} - \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{2D}^2}{2\rho_{2D}} \right) \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \right) . \tag{2.24}$$

La medición de los distintos campos hidrodinámicos en las celdas definidas del espacio tendrán que cumplir las siguientes reglas de balance:

- Balance de masa en la celda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \rho_{2D}(x, y, t) dx dy \right) = \sum_{i=1}^N \delta_i (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) . \quad (2.12)$$

- Balance de momentum en la celda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \vec{P}_{2D}(x, y, t) dx dy \right) = \sum_{i,j=1}^N \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) + \sum_{i,j=1}^N \delta_i \vec{v}_i (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) . \quad (2.17)$$

- Balance de energía en la celda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} dx dy \right) = \sum_{i,j=1}^N \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i (\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \delta(t-t^*) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) + \sum_{i=1}^N \frac{\delta_i (\vec{v}_i)^2}{2} (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) , \quad (2.25)$$

donde se define

$$\begin{aligned} \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) &= \iint_{\text{celda}} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] dx dy , \\ \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}} &= \int_{\text{arco en celda}} \vec{v}_i \cdot \hat{r}_c R_i d\theta , \end{aligned}$$

donde \vec{r}_c es el vector posición con el sistema de referencia centrado en cada grano. Ambas integrales se pueden resolver analíticamente en 2D.

2.9. Ejemplos sencillos de aplicación

2.9.1. Ejemplo de cambio en celda sin choque

Se toma el sistema de la figura siguiente, que está compuesto por una sola esfera de radio R y el espacio está dividido en dos celdas.

La partícula 1 está descrita por:

$$\begin{aligned} \text{Velocidad} &: \vec{v}_1(t) = V\hat{x} \\ \text{Posición} &: \vec{r}_1(t) = h\hat{y} + (x_0 + Vt)\hat{x} \end{aligned}$$

Elijiendo x_0 tal que $d(t) = R - Vt$ (mientras el centro no cruce la celda, d es positivo).

Tomando la ecuación (2.12) de balance de masa en la celda II se estudia la diferencia entre el

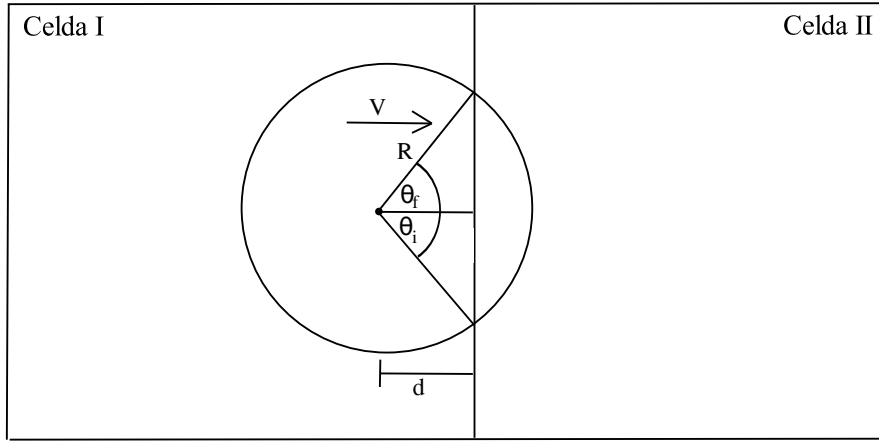


Figura 2.8: Transición de la esfera entre dos celdas. Se miden los campos hidrodinámicos en todo momento.

lado derecho con el izquierdo. Para el último se tiene:

$$\begin{aligned}
 f_\rho(t) &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \rho_{2D}(x,y,t) dx dy \right) = \frac{\partial}{\partial t} (\delta_1 \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_1)) \\
 &= \delta_i \frac{\partial}{\partial t} R^2 \left(\arccos\left(\frac{d}{R}\right) - \frac{d}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{d}{R}\right)^2} \right) \\
 &= \delta_i R^2 \left(\frac{V}{R} \left(\sqrt{1 - \left(\frac{R-Vt}{r}\right)^2} \right)^{-1} - \frac{V}{R^3} (R^2 - 4RVt + 2V^2t^2) \left(\sqrt{\frac{Vt(2R-Vt)}{R^2}} \right)^{-1} \right) \\
 &= 2\delta_i V \sqrt{Vt(2R-Vt)}
 \end{aligned}$$

y para el lado derecho se tiene:

$$g_\rho(t) = \sum_{i=1}^N \delta_i (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) = \delta_1 VR(\sin(\theta_f) - \sin(\theta_0)) .$$

Pero en este caso $\theta_f = -\theta_0$ y $\sin\theta_f = \frac{\sqrt{R^2-d^2}}{R}$ como se puede observar en la figura 2.8, luego:

$$\begin{aligned}
 g_\rho(t) &= 2\delta_1 V \left(\sqrt{R^2 - d^2} \right) = 2\delta_1 V \left(\sqrt{R^2 - (R-Vt)^2} \right) \\
 &= 2\delta_1 V \left(\sqrt{R^2 - R^2 - V^2t^2 + 2VRt} \right) = 2\delta_1 V \sqrt{Vt(2R-Vt)} ,
 \end{aligned}$$

por lo que es claro que se demuestra que $f_\rho(t) = g_\rho(t)$, y se muestra en la figura 2.9. Para construir el gráfico se considera un radio $R = 1$, $V = 1$ y $\delta_i = 1$, por lo tanto se expresa la evolución en un tiempo adimensional.

Esta medición es análoga para cualquier campo descrito mientras no haya presencia de choques. Es claro a su vez que lo que pierde la celda I lo ganará la celda II, por lo que no es necesario calcular el cambio de momentum sobre esta celda conociendo el cambio sobre la celda II.

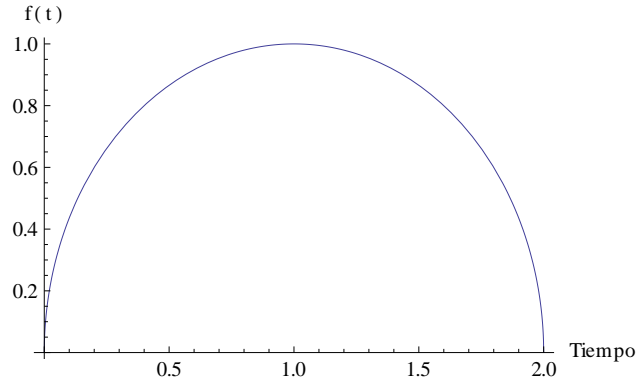


Figura 2.9: Cambio de la densidad por paso de disco entre celdas sin choques.

2.9.2. Ejemplo de cambio en celda con choque: momentum

Se toma el siguiente sistema, donde ambos discos tienen igual radio R y densidad δ :

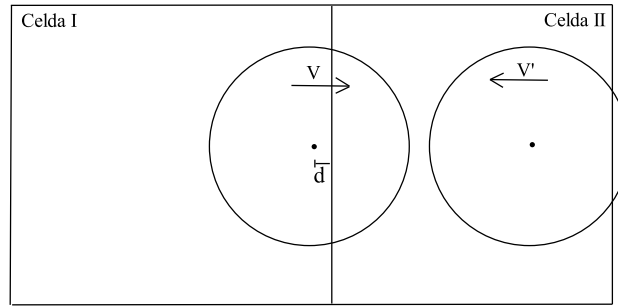


Figura 2.10: Efecto en el momentum por el choque de esferas en distintas celdas.

Se llama 1 al disco de la izquierda y 2 al disco de la derecha, y se tiene como condiciones del sistema:

| Antes del choque | | Después del choque | |
|---|-------------------------|---|--------------------------------|
| $\vec{r}_1(t) = h\hat{y} + (x_{0,1} + Vt)\hat{x}$ | $\vec{v}_1 = V\hat{x}$ | $\vec{r}_1(t) = h\hat{y} + (x_{00,1} - \alpha Vt)\hat{x}$ | $\vec{v}_1 = -\alpha V\hat{x}$ |
| $\vec{r}_2(t) = h\hat{y} + (x_{0,2} - Vt)\hat{x}$ | $\vec{v}_2 = -V\hat{x}$ | $\vec{r}_2(t) = h\hat{y} + (x_{00,2} + \alpha Vt)\hat{x}$ | $\vec{v}_2 = \alpha V\hat{x}$ |

donde α corresponde al coeficiente de restitución del modelo de esferas duras. De modo que $x_{0,1}$ y $x_{0,2}$ son elegidos para que choquen los discos justo cuando el punto central del disco está en la división entre las celdas I y II. Luego $x_{00,1}$ y $x_{00,2}$ son encontrados a partir de ese hecho. Entonces se tiene que $x_{00,1} = 0$ y $x_{0,2} = 2R$.

Se estudia el cambio de momentum en la celda I. La ecuación de balance del momentum (2.17) tiene una gran diferencia con la ecuación de balance de la masa (2.12), pues toma en cuenta el instante en que las masas se encuentran con una función tipo delta de Dirac. Para poder comparar ambos lados se debe integrar en el tiempo. Se usa como intervalo de integración desde antes que las esferas choquen hasta que el choque ocurra, es decir $(t' - \Delta t, t')$ si el tiempo en que se encuentran es t' .

En el lado derecho de la ecuación (2.17), que se denotará f_p , se tiene:

$$f_p(t) = \int_{t'-\Delta t}^{t'} \frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \vec{P}_{2D}(x, y, t) dx dy \right) dt = \iint_{\text{celda}} \vec{P}_{2D}(t') dx dy - \iint_{\text{celda}} \vec{P}_{2D}(t' - \Delta t) dx dy .$$

El primer término de la derecha corresponde a la situación final, cuando ya ha ocurrido el choque (con $d = 0$):

$$\iint_{\text{celda}} \vec{P}_{2D}(t') dx dy = -\alpha V \delta_1 \frac{\pi R^2}{2} .$$

El último término corresponde a la situación inicial ($d = V\Delta t$):

$$\iint_{\text{celda}} \vec{P}_{2D}(t' - \Delta t) dx dy = V \delta_1 R^2 \left[\arccos \left(\frac{V\Delta t}{R} \right) - \frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R} \right)^2} \right] .$$

Finalmente

$$f_p(t) = -\delta_1 V R^2 \left[\frac{\pi \alpha}{2} + \arccos \left(\frac{V\Delta t}{R} \right) - \frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R} \right)^2} \right] .$$

Para el lado derecho de la ecuación (2.17), que se denotará g_p se tiene, al integrar en el tiempo:

$$\begin{aligned} g_p(t) &= \int_{t'-\Delta t}^{t'} \sum_{i,j=1}^N \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t') \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) dt + \int_{t'-\Delta t}^{t'} \sum_{i,j=1}^N \delta_i \vec{v}_i (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) dt \\ &= \sum_{i,j=1}^N \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t')) + \sum_{i,j=1}^N \delta_i \vec{v}_i \int_{t'-\Delta t}^{t'} (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))) dt . \end{aligned} \quad (2.26)$$

El primer término de la derecha corresponde al cambio de estado producto del choque en el instante del choque, es decir:

$$\sum_{i,j=1}^N \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t')) = \delta_i (-\alpha V - V) \frac{\pi R^2}{2} = -\delta_i V \frac{\pi R^2}{2} (\alpha + 1) .$$

El segundo término de (2.26) debe ser evaluado en detalle. Como la integral $\vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}$ depende del tiempo, entonces se debe evaluar su resultado:

$$\int_{t'-\Delta t}^{t'} (\vec{v}_1 \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_1(t))) dt = \int_{t'-\Delta t}^{t'} VR (\sin(\theta_f) - \sin(\theta_o)) dt = 2 \int_{t'-\Delta t}^{t'} VR (\sin(\theta_f)) dt .$$

En el último paso se usó que $\theta_o = -\theta_f$. Pero θ_f es una función del tiempo, pues depende de d , que cambia entre $t' - \Delta t$ y t' . Explicitando este hecho se tiene:

$$\sin(\theta_f) = \sqrt{1 - \left(\frac{d(t)}{R} \right)^2} = \sqrt{1 - \left(\frac{V(t' - t)}{R} \right)^2} .$$

Luego, juntando esto se tiene

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^N \delta_i \vec{v}_i \int_{t'-\Delta t}^{t'} (\vec{v}_i \cdot \vec{H}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))) dt &= 2\delta_1(V\hat{x})VR^2 \int_{t'-\Delta t}^{t'} \sqrt{1 - \left(\frac{V(t'-t)}{R}\right)^2} dt \\
&= \delta_1(V\hat{x})R^2 \left(\frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R}\right)^2} + \arcsin\left(\frac{V\Delta t}{R}\right) \right) \\
&= \delta_1(V\hat{x})R^2 \left(\frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R}\right)^2} + \frac{\pi}{2} - \arccos\left(\frac{V\Delta t}{R}\right) \right).
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$g_p = \delta_1(V\hat{x})R^2 \left\{ -\frac{\pi}{2}\alpha + \frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R}\right)^2} - \arccos\left(\frac{V\Delta t}{R}\right) \right\}.$$

Lo que comprueba que en este caso $f_p(t) = g_p(t)$, independiente de cuando se comience a medir (cuál sea el valor de Δt). Para hacer un análisis hasta el tiempo $t' + \Delta t$ solo se tendría que incorporar al cambio de momentum total el término del momentum transferido después del choque, que corresponde al análisis hecho para el caso sin choque de la sección anterior.

El gráfico de f_p se presenta a continuación en la figura 2.11, con $t' = 0$ y el tiempo es negativo, pues se definió previamente $\Delta t > 0$.

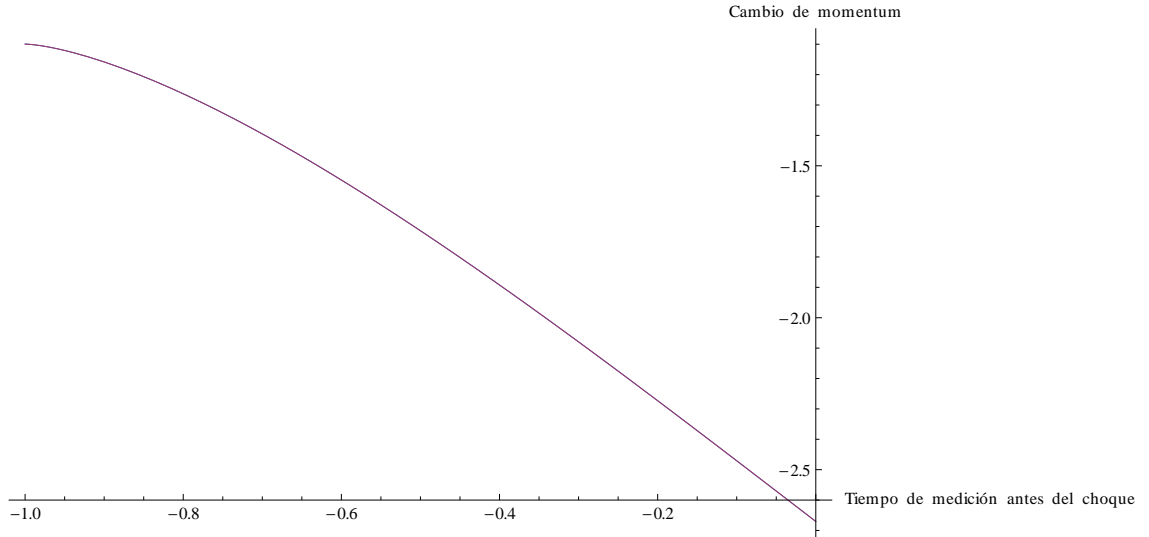


Figura 2.11: Evolución del momentum por el choque de esferas en distintas celdas. Se han considerado los valores $R = V = \delta = 1$, $\alpha = 0.7$.

2.9.3. Ejemplo de cambio en celda con choque: energía

Se usa el mismo sistema de la figura 2.10, pero se analizará la ecuación (2.25) de balance de energía. Usando el mismo argumento que para el momentum, se debe integrar la ecuación en el

tiempo.

En el lado izquierdo, que se denotará f_E , se tiene:

$$\begin{aligned}
f_E &= \int_{t'-\Delta t}^{t'} \frac{\partial}{\partial t} \left(\iint_{\text{celda}} \left(\frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} \right) (t) dx dy \right) dt \\
&= \left(\iint_{\text{celda}} \left(\frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} \right) (t') \right) - \left(\iint_{\text{celda}} \left(\frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} \right) (t' - \Delta t) \right) \\
&= \delta_1 \frac{(-\alpha V)^2 \pi R^2}{2} - \delta_1 \frac{V^2}{2} R^2 \left(\arccos \left(\frac{V\Delta t}{R} \right) - \frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R} \right)^2} \right) \\
&= \frac{\delta_1 V^2 R^2}{2} \left(\frac{\pi \alpha^2}{2} - \arccos \left(\frac{V\Delta t}{R} \right) + \frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R} \right)^2} \right). \tag{2.27}
\end{aligned}$$

El lado derecho, que se denotará g_E , corresponde a:

$$\begin{aligned}
g_E &= \int_{t'-\Delta t}^{t'} \sum_{i,j=1}^N \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i (\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \delta(t-t') \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) dt + \int_{t'-\Delta t}^{t'} \sum_{i=1}^N \frac{\delta_i (\vec{v}_i)^2}{2} (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) dt \\
&= \sum_{i,j=1}^N \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i (\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t')) + \sum_{i=1}^N \frac{\delta_i (\vec{v}_i)^2}{2} \int_{t'-\Delta t}^{t'} (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) dt.
\end{aligned}$$

Nuevamente se analizan los términos de la derecha independientemente. El primero de ellos corresponde al cambio de energía producto del choque, es decir:

$$\sum_{i,j=1}^N \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i (\vec{v}_{ij})^2}{2} \right) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t')) = \left(\delta_1 \frac{(-\alpha V)^2}{2} - \delta_1 \frac{V^2}{2} \right) \frac{\pi R^2}{2}.$$

El segundo término de la derecha corresponde a la misma integral vista en la sección anterior, por lo que se tiene

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^N \frac{\delta_i (\vec{v}_i)^2}{2} \int_{t'-\Delta t}^{t'} (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)) dt &= \delta_1 \frac{V^2}{2} R^2 \left(\frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R} \right)^2} + \arcsin \left(\frac{V\Delta t}{R} \right) \right) \\
&= \delta_1 \frac{V^2}{2} R^2 \left(\frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R} \right)^2} + \frac{\pi}{2} - \arccos \left(\frac{V\Delta t}{R} \right) \right),
\end{aligned}$$

por lo que finalmente

$$g_E = \frac{\delta_1 V^2 R^2}{2} \left(\frac{\pi \alpha^2}{2} - \arccos \left(\frac{V\Delta t}{R} \right) + \frac{V\Delta t}{R} \sqrt{1 - \left(\frac{V\Delta t}{R} \right)^2} \right). \tag{2.28}$$

Esto comprueba que $f_E = g_E$. El gráfico de f_E es similar al de la figura 2.10, pues se puede observar que $f_E = \frac{V\hat{x}}{2} \cdot f_P$.

2.10. Temperatura granular en 2D

Dentro de los campos hidrodinámicos de interés suele encontrarse la temperatura, donde se hacen consideraciones de su definición para sistemas granulares. Es definida usualmente [11, 21] de dos formas distintas $T^{(1)}$ y $T^{(2)}$. En el caso de las partículas puntuales, para cada celda de medición se define:

$$\begin{aligned} T^{(1)}(\text{Celda}) &= \left\langle \frac{1}{N_{\text{Celda}}} \sum_{i \in \text{Celda}} \frac{m}{2} (\vec{v}_i - \vec{V}_{\text{Celda}})^2 \right\rangle_t \\ &= \left\langle \frac{1}{N_{\text{Celda}}} \sum_{i=1}^N \iint_{\text{Celda}} \frac{m}{2} (\vec{v}_i - \vec{V}_{\text{Celda}})^2 \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) dx dy \right\rangle_t, \end{aligned} \quad (2.29)$$

donde los paréntesis $\langle \dots \rangle_t$ indican un promedio temporal o de ensamble, m es la masa de cada uno de los discos del sistema, N_{Celda} es el número de partículas dentro de la celda:

$$N_{\text{Celda}} = \sum_{i \in \text{Celda}} 1 = \sum_{i=1}^N \iint_{\text{Celda}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) dx dy$$

y \vec{V}_{Celda} corresponde a la velocidad media de los discos en la celda:

$$\vec{V}_{\text{Celda}} = \frac{1}{N_{\text{Celda}}} \sum_{i \in \text{Celda}} \vec{v}_i = \frac{1}{N_{\text{Celda}}} \sum_{i=1}^N \iint_{\text{Celda}} \vec{v}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) dx dy. \quad (2.30)$$

La ecuación (2.29) puede interpretarse como el promedio temporal de la velocidad fluctuante media por partícula dentro de la celda, y la velocidad fluctuante está definida por:

$$\vec{C}_i = \vec{v}_i - \vec{V}_{\text{Celda}}. \quad (2.31)$$

Así también, dado que se esperan fluctuaciones grandes en el campo de velocidad, se puede calcular la temperatura $T_{2D}^{(2)}$ [21]:

$$\begin{aligned} T^{(2)}(\text{Celda}) &= \left\langle \frac{1}{N_{\text{Celda}}} \sum_{i \in \text{Celda}} \frac{m v_i^2}{2} \right\rangle_t - \frac{m}{2} \langle \vec{V}_{\text{Celda}} \rangle_t^2 \\ &= \left\langle \frac{1}{N_{\text{Celda}}} \sum_{i=1}^N \iint_{\text{Celda}} \frac{m v_i^2}{2} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) dx dy \right\rangle_t - \frac{m}{2} \langle \vec{V}_{\text{Celda}} \rangle_t^2, \end{aligned} \quad (2.32)$$

donde el primer término corresponde a la energía cinética media por grano en la celda y el segundo a la energía cinética del flujo local. Ambas definiciones, (2.29) y (2.32), no incluyen a la constante de Boltzmann k_B y eso genera que ambas temperaturas tengan unidades de energía.

Si se transforman estas definiciones manteniendo el espíritu en que fueron definidas pero incorporando los conceptos de los que se hace uso en este trabajo para considerar partículas con volumen y no partículas puntuales, es decir, cambiando la función $\delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$ y distribuyendo sus propiedades en todo el volumen dentro de cada disco, se tendría:

$$T_{2D}^{(1)} = \left\langle \frac{1}{N_{2D}(\text{Celda})} \sum_{i=1}^N \iint_{\text{Celda}} \frac{\delta_i}{2} (\vec{v}_i - \vec{V}_{2D}(\text{Celda}))^2 \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx dy \right\rangle_t, \quad (2.33)$$

donde el número de partículas dentro de la celda quedaría definida por:

$$N_{2D}(\text{Celda}) = \sum_{i=1}^N \iint_{\text{Celda}} \frac{1}{\pi R_i^2} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx dy . \quad (2.34)$$

Si se tiene un sistema monodisperso en tamaño y masa, es decir $m_i = m$ y $R_i = R$, se tiene la igualdad $N_{2D}(\text{Celda}) = \frac{\rho_{2D}}{m}$. Es importante notar que para un sistema con distribución no uniforme de tamaños o masas la definición del número de partículas debe ser interpretada de forma especial. Esto se debe a que se puede tener dos fracciones iguales del volumen de esferas distintas que contengan una cantidad distinta de masa pero que aportan de la misma forma al número de partículas. Existen estrategias para solucionar este problema, por ejemplo, tomando un número distinto por cada especie presente en el sistema, por ejemplo en una mezcla de dos tipos de esferas con radio igual y masa distinta. En este trabajo se utiliza solo el caso monodisperso.

La velocidad media por partícula dentro de la celda sería:

$$\vec{V}_{2D}(\text{Celda}) = \frac{1}{N_{2D}(\text{Celda})} \sum_{i=1}^N \iint_{\text{Celda}} \frac{\vec{v}_i}{\pi R_i^2} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx dy . \quad (2.35)$$

Usualmente, en el contexto de la teoría cinética, la velocidad fluctuante se define como la diferencia de la velocidad de la partícula i -ésima con el promedio temporal y espacial de la velocidad local. Esta definición da paso a interpretaciones interesantes de las ecuaciones de balance. En este trabajo, se ha definido la velocidad fluctuante distribuida sobre el volumen del disco:

$$\vec{C}_i = \vec{v}_i - \vec{V}_{2D} , \quad (2.36)$$

de modo que se obtienen las siguientes propiedades, que no tienen correspondencia con la definición usual:

- Al integrar sobre la celda de medición la velocidad fluctuante, se tiene:

$$\iint_{\text{Celda}} \sum_i \delta_i \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx dy = 0 . \quad (2.37)$$

- Usando la teoría cinética se puede obtener, a partir de la ecuación del cambio de energía, un término que se identifica como el flujo de calor \vec{Q} y se calcula a partir de la velocidad fluctuante y al distribución de probabilidad $f(v, t)$:

$$\vec{Q} = \int f(v, t) \frac{mC^2}{2} \vec{C} dv \quad (2.38)$$

y que hasta ahora no se ha identificado explícitamente. Es implícitamente parte del término $-\vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{2D}^2}{2\rho_{2D}} \right) \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \right)$ de la ecuación (2.24) y en el próximo capítulo se estudiará este término en detalle, en la sección 3.5.

De esta misma forma es posible transformar la definición (2.32), con la suposición de masa uniforme, para llegar a:

$$T_{2D}^{(2)} = \left\langle \frac{1}{N_{2D}(\text{Celda})} \sum_{i=1}^N \iint_{\text{Celda}} \frac{\delta_i v_i^2}{2} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx dy \right\rangle - \frac{m}{2} \left\langle \vec{V}_{2D}(\text{Celda}) \right\rangle_t^2 . \quad (2.39)$$

Se debe destacar que es posible calcular $T_{2D}^{(1)}$ y $T_{2D}^{(2)}$ dentro de las simulaciones por cada celda de medición independiente de su tamaño.

2.11. Resumen del capítulo

Se han definido en todo momento y lugar los campos de densidad de masa (2.4), densidad de momentum (2.5) y densidad de energía (2.6), extendiendo la idea propuesta inicialmente por Goldhirsch [15]. A partir de ellos, y usando el modelo de esferas duras, se ha logrado deducir sus ecuaciones de balance (2.8), (2.16) y (2.24), respectivamente para choques instantáneos entre granos.

Se presentaron ejemplos sencillos donde se puede calcular independientemente cada término de las ecuaciones y se observa que las igualdades que se proponen en las ecuaciones de balance se sostienen exactamente. En estos ejemplos se ha descrito con exactitud el movimiento de los granos en el sistema en todo momento y de forma continua. Cuando el número de granos en el sistema y el de choques por unidad de tiempo aumentan, resulta demasiado costoso seguir analíticamente el desarrollo de cada uno de los discos por separado y se utilizan mediciones de tiempo en forma discontinua, como se verá en los experimentos numéricos. En el caso de tiempo discontinuo puede existir un error asociado que no permita la igualdad exacta en todo momento, pero se espera que el error asociado disminuya con el paso temporal utilizado.

Finalmente se utilizó el esquema de distribución uniforme en el volumen para reinterpretar las definiciones usuales de temperatura y encontrar una interpretación cercana a la hidrodinámica y teoría cinética del esquema propuesto inicialmente por Goldhirsch [15]. Estas definiciones hacen uso del concepto de la velocidad fluctuante, que tiene propiedades especiales en el caso del formalismo propuesto.

Capítulo 3

Interpretación de las ecuaciones de balance bidimensional

3.1. Sumario

En este capítulo se exponen distintos mecanismos de inyección y al forma en que deben ser incorporados en las ecuaciones de balance local. Se incluye el caso de la pared térmica.

Se ampliarán las definiciones del capítulo anterior para abarcar una forma explícita para el tensor de presión \mathbb{P} , con sus partes cinética y colisional, junto a la forma de calcularlos a partir de las simulaciones y las propiedades distintivas de estas definiciones.

Se propone a su vez, a partir de la obtención del tensor de presión, la posibilidad de calcular por distintos métodos un coeficiente de viscosidad relevante a escala local.

3.2. Introducción

Hasta este punto, las conclusiones obtenidas en el capítulo anterior son sencillas y directas. A pesar de ello, las implicancias que las ecuaciones de balance obtenidas pueden tener sobre el análisis de sistemas granulares son diversas y debe hacerse un paralelo con los sistemas hidrodinámicos clásicos. Hay que notar que las comparaciones resultan a veces forzosas, por ejemplo al observar las distintas ecuaciones de estado, por las aproximaciones que se han realizado para llegar a sus ecuaciones directoras, sobre todo la que relaciona el número de partículas sobre una unidad diferencial de volumen o área y permite considerar a los campos como continuos en el espacio.

Considerando esto, las analogías a desarrollar deben tener un paralelo directo comparadas con los sistemas usuales continuos con propiedades generales similares. Esto incluye a las comparaciones de los diversos términos sobre flujos promedios y flujos fluctuantes que surgen a partir de este esquema propuesto con los obtenidos a raíz de la teoría cinética.

3.3. Inyección de energía

Para los sistemas disipativos es necesario un suministro constante de energía para mantener un estado estacionario fuera del equilibrio. En caso de no existir inyección el sistema tiende rápidamente al reposo. En el caso de los medios granulares, la forma más usual y efectiva de disipación consiste en que cada choque, entre granos y con las paredes, es inelástico. Las ecuaciones hasta ahora analizadas no incluyen la inyección de energía, pues las ecuaciones de fluidos usuales tampoco lo hacen.

Para los fluidos newtonianos no ideales la disipación ocurre a través del término de presión \mathbb{P} . Se ha identificado que, dado que los cambios debido a los choques se agrupan bajo términos donde se involucra \mathbb{P}^a , este tiene también interpretación disipativa. Pero ninguno de los términos de las ecuaciones de balance (2.8), (2.16) y (2.24) está asociado automáticamente a una inyección de momentum o energía.

Para incluir estos términos se debe observar de manera particular el mecanismo de inyección de energía considerado relevante en el experimento o la simulación. Se incluye en esta lista (sin que sea exhaustiva):

- Caja vibrada: Los choques con las paredes inducen movimiento relativo dentro de la caja que mantiene el movimiento.
- Choques con coeficiente de restitución aleatorio: En este caso los choques entre granos ganan un impulso extra asignado aleatoriamente según distribución gaussiana. Es decir, algunos choques disipan, pero otros aumentan la energía local.
- Inyección de partículas a mayor energía: Es posible tener una fuente continua de masa análoga a una llave o corriente que transporte estas partículas e interactúen con las que se encuentran en la caja, junto a un sector de salida de este flujo. En este caso la dinámica de las esferas que ingresan al volumen estudiado o salen de él no es importante mientras permanezcan fuera de los límites.
- Paredes térmicas: Los choques con las paredes modifican la velocidad normal a la pared según una distribución gaussiana de temperatura T . Cada pared puede tener una temperatura distinta y esta depender de la posición de choque. Esta temperatura actúa como un termostato mecanicoestadístico del estado del sistema.

Cada uno de ellos, como mecanismo, tendrá una definición distinta del término fuente. Como ejemplo se considera el caso de las paredes térmicas. Dado que no hay intercambio de masa con la pared, sino cambio de momentum en el choque, no hay cambio en la masa dentro del sistema y el término fuente para la masa es nulo. Podrán suceder que, dado que se usa una distribución de probabilidad gaussiana de velocidad de salida del grano, en un choque con ella se pierda energía y momentum, pero en promedio se gana ambas cantidades en un tiempo considerable con múltiples choques. Entonces, se tiene la inyección de masa F_ρ , inyección de momentum \vec{F}_P e inyección de

energía F_E :

$$\begin{aligned}
F_\rho &= 0 \\
\vec{F}_P &= \sum_{i,\text{pared } p} \delta_i \Delta \vec{v}_{ip} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \delta(t - t^*) , \\
F_E &= \sum_{i,\text{pared } p} \Delta \left(\frac{\delta_i v_{ip}^2}{2} \right) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \delta(t - t^*) , \tag{3.1}
\end{aligned}$$

donde la sumatoria sobre ‘ $i, \text{pared } p$ ’ corresponde a todos los choques del disco i -ésimo con alguna pared térmica p , $\Delta \vec{v}_{ip}$ es el cambio de velocidad que experimenta un disco al chocar con la pared p y t^* el instante de tiempo en que el choque ocurre. Las sumatorias se realizan sobre todas las partículas y todas las paredes. Dado que en este trabajo no se considera la rotación de los discos, la velocidad afectada por el choque será únicamente la velocidad normal a la pared.

3.4. Sobre el tensor de presión colisional

Las ecuaciones presentadas (2.8), (2.16) y (2.24) pueden ser comparadas con las ecuaciones usuales de fluidos [22]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) , \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) = -\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P} - \vec{\nabla} \cdot ((\rho \vec{v}) \vec{v}) , \tag{3.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho v^2}{2} \right) = -\vec{v} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}) - \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{\rho v^2}{2} \right) \vec{v} \right) . \tag{3.4}$$

donde se debe notar que la velocidad local \vec{v} es un promedio hidrodinámico de la velocidad de muchísimas partículas que se concentran en un volumen pequeño y realizan múltiples configuraciones de igual energía en un intervalo de tiempo pequeño, por lo que esta medición es distinta en naturaleza a la propuesta para medir la velocidad en el capítulo anterior para los medios granulares. Se dará detalles de esta diferencia en la sección 3.5.

Comparando (3.3) con (2.16) se llega a la conclusión de que:

$$-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}} = \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t - t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} . \tag{3.5}$$

El superíndice ‘col’ indica que este tensor es calculado a partir de las colisiones entre granos. En el anexo B se definirán otros tensores relacionados. Para interpretar qué significa \mathbb{P}^{col} se tienen dos caminos. El primero consiste en construir una celda que englobe el sector a medir y luego estudiar la fuga de momentum que ocurre en las paredes producto de los choques ocurridos en su proximidad. Este análisis es difícil de desarrollar, en especial por las esquinas, donde hay que definir de forma exacta cuánto momentum atraviesa cada pared involucrada.

Debido a que $\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}}$ no es continua con derivada continua en todo el espacio no es posible aplicar directamente el teorema de Gauss y estudiar el contorno de la celda de medición tomando en el

primer camino, por lo que no se utilizará en este trabajo.

El segundo camino consiste en encontrar una definición que sea independiente de la celda observada, y que sin embargo permita medir esta cantidad dentro de una celda. Para ello se considera que:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{f}_{2D}(\vec{r}) &= \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \\ \Rightarrow \vec{f}_{2D}(\vec{r}) &= \frac{\vec{r} - \vec{r}_i(t)}{2} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] + \vec{u}(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) ,\end{aligned}\quad (3.6)$$

donde se debe cumplir que $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}(\vec{r}) = 0$. La implicancia en esta ecuación no es exacta matemáticamente en forma general y para justificar su uso se deben considerar 3 zonas distintas: dentro del grano, el borde del grano y fuera de él. Dentro del grano la función f solo puede ser la ya descrita en (3.6), debe crecer linealmente con la distancia al centro del grano. Fuera del grano la divergencia de f debe ser nula y no tiene físicamente sentido que f tenga valor distinto de cero, pues son los granos los portadores de las propiedades en el sistema (masa, momentum, energía). Juntando estas dos observaciones, en el borde del grano la función f debería cambiar bruscamente de valor. Este cambio no va a afectar al cálculo de la presión, pues se integra en el área de toda la celda y el valor que tome la función integrada sobre una línea finita será siempre nulo al integrarla sobre un área. En definitiva, esta implicancia es válida si se integra el área donde están contenidos los granos.

En la ecuación (3.6) se tiene un grado de libertad o “gauge” representado por la función u . En este caso se elige $\vec{u} \equiv 0$ para ambas direcciones \hat{x} e \hat{y} , pues no debería jugar un papel importante en el desarrollo. Esto se debe a que en la práctica el tensor de presión no está determinado directamente en las ecuaciones, sino solamente aparece como la divergencia de la presión. Al medir la presión sobre un objeto se integra sobre la superficie sobre la que está aplicada, por lo que un campo que tiene divergencia nula no afectaría el resultado [20]. Lo mismo puede decirse en caso de medirse sobre un volumen (área en 2D), pues la presión se relaciona con el flujo de momentum que atraviesa el límite del volumen.

Tomando este resultado (3.6) se tiene:

$$\begin{aligned}-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}} &= \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} \\ &= \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{r} - \vec{r}_i(t)}{2} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right) \right\} \\ &= \vec{\nabla} \cdot \left(\sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \frac{\vec{r} - \vec{r}_i(t)}{2} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} \right) , \\ \Rightarrow \mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}} &= - \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i (\Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \cdot \hat{e}_\alpha) \delta(t-t^*) \frac{(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \cdot \hat{e}_\beta}{2} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} .\end{aligned}\quad (3.7)$$

Este nuevo campo tensorial está bien definido en todo el espacio y puede ser integrado dentro de cada celda de medición de tamaño y forma arbitrario. No es necesario hacer excepciones especiales con las esquinas de las celdas, al margen de los límites de integración para cada partícula

dentro de la celda de medición. Se debe observar, sin embargo, que la definición (3.7) no genera un tensor simétrico como es esperable para el tensor de presión, pero en promedio las mediciones de este tensor demostrarán que las componentes fuera de la diagonal son similares entre sí y forman (con algún margen de error) un tensor simétrico.

Esta familia de campos escalares tiene unidades de presión en 2D y puede ser interpretada como el tensor de presión. El hecho de haber elegido $\vec{u} \equiv 0$ no da espacio a incluir una presión global constante de referencia, pero es obvio que esta puede ser incorporada si esta fuese de interés, o cualquier campo \vec{u} que cumpla que $\nabla \cdot \vec{u} = 0$, por ejemplo $\vec{u} = \nabla \times \xi$, con ξ un campo escalar continuo. Se discute esta opción en mayor profundidad en el capítulo 8.

3.4.1. Medición de \mathbb{P}^{col} en las simulaciones

Cuando se integra dentro de la celda, cada esfera involucrada en cada choque entre los tiempos de medición será evaluada de forma independiente con su vecino chocado al calcular el tensor de presión colisional. De este modo solo se toma en cuenta un disco a la vez. Esto se observa en la sumatoria, pues considera a la partícula i -ésima y su cambio de velocidad producto del choque con la j -ésima en el lugar donde se encuentra la primera, y posteriormente se considera el cambio de velocidad de la partícula j -ésima en el mismo choque.

Dado que la presión es una cantidad intensiva, y por tanto debe tener el mismo valor para distintos tamaños de celda en un sistema homogéneo, se debe medir la presión colisional media dentro de la celda. Esto se logra si se integra la definición de \mathbb{P}^{col} (3.7) en una celda arbitraria y se normaliza por el tamaño de dicha celda:

$$\begin{aligned}
\iint_{\text{celda}} \mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}} dx dy &= - \iint_{\text{celda}} \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i (\Delta^{2D} \vec{v}_{ij})_{\alpha} \delta(t-t^*) \frac{(\vec{r} - \vec{r}_i(t))_{\beta}}{2} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} dx dy \\
&= - \sum_{i,j=1}^N \frac{\delta_i}{2} (\Delta^{2D} \vec{v}_{ij})_{\alpha} \delta(t-t^*) \iint_{\text{celda}} \left\{ (\vec{r} - \vec{r}_i(t))_{\beta} \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} dx dy \\
&= - \sum_{i,j=1}^N \frac{\delta_i}{2} (\Delta^{2D} \vec{v}_{ij})_{\alpha} \delta(t-t^*) \mathbb{K}_{\beta}(\vec{r}_i(t)) .
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Esta integral $\mathbb{K}_{\beta}(\vec{r}_i(t))$ debe ser estudiada de la misma forma en que se analizó $\mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))$ para la integración de los campos escalares definidos en el capítulo anterior. Es decir, se examinan de forma independiente los casos en que el disco está dividido en 2, 3 ó 4 celdas distintas.

Por ejemplo, en la figura 3.1 se tiene, en la celda I:

$$\begin{aligned}
\mathbb{K}_x(\vec{r}_i(t)) &= \int_{x=-R_i}^d \int_{y=-\sqrt{R_i^2-x^2}}^{\sqrt{R_i^2-x^2}} x dx dy = \int_{x=-R_i}^d 2x \sqrt{R_i^2-x^2} dx = -\frac{2}{3} (R_i^2-d^2)^{3/2} , \\
\mathbb{K}_y(\vec{r}_i(t)) &= 0 .
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Esto implica que, excluyendo la posibilidad de otros discos colisionando en la misma celda, se

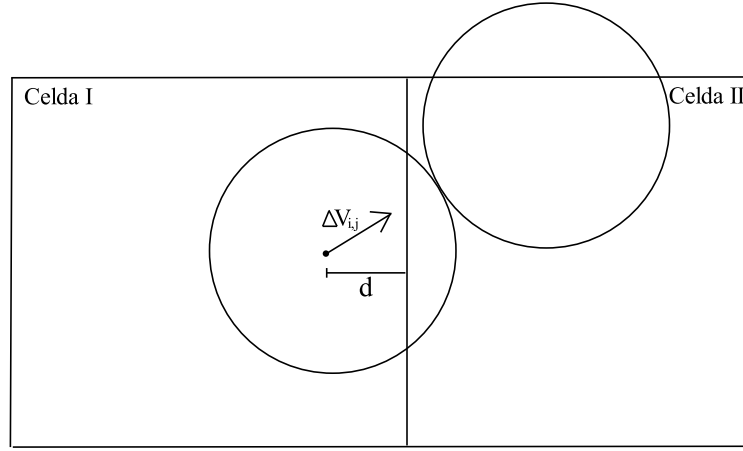


Figura 3.1: Diferentes adiciones a \mathbb{P}^{col} en cada celda

tiene que:

$$\begin{aligned} \iint_{\text{celda I}} \mathbb{P}_{xx}^{\text{col}} dx dy &= \delta_i(\Delta^{2D} \vec{v}_{ij})_x \delta(t-t^*) \frac{2}{3} (R_i^2 - d^2)^{3/2} , \\ \iint_{\text{celda I}} \mathbb{P}_{xy}^{\text{col}} dx dy &= 0 , \\ \iint_{\text{celda I}} \mathbb{P}_{yx}^{\text{col}} dx dy &= \delta_i(\Delta^{2D} \vec{v}_{ij})_y \delta(t-t^*) \frac{2}{3} (R_i^2 - d^2)^{3/2} , \\ \iint_{\text{celda I}} \mathbb{P}_{yy}^{\text{col}} dx dy &= 0 , \end{aligned}$$

y dado que $\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}}$ depende de $|d|$, existen dos posiciones con respecto a la pared (teniéndola como plano de simetría) que dan origen a un valor similar calculado para estas componentes de la presión colisional.

Siguiendo esta lógica se puede calcular que para la celda II se tendrán valores similares pero con signo contrario para los valores de \mathbb{P}^{col} asociados a este disco, de modo que si la partícula se encuentra contenida completamente en la celda no modificará el valor del tensor de presión. Este resultado incluye de forma implícita la normal a la superficie de haber podido aplicar el teorema de Gauss y es consistente con este.

Los otros casos posibles de división entre celdas pueden calcularse sin complicaciones. Para ellos se señala \mathbb{K}_β , tomando d_1 y d_2 según la figura 3.2.

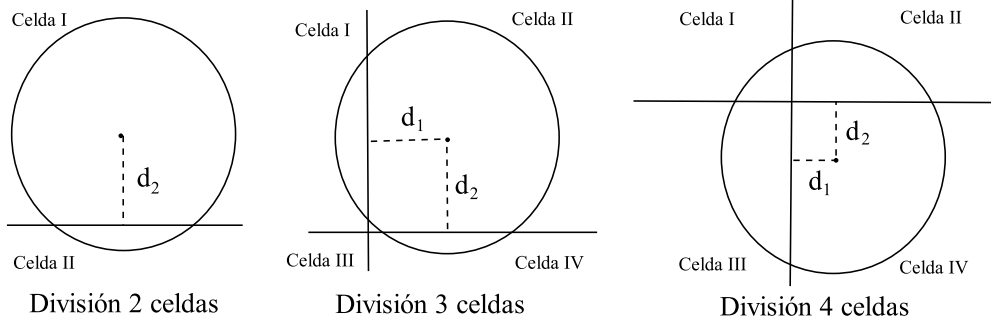


Figura 3.2: Divisiones de un disco entre celdas para calcular \mathbb{K}_β

| Celda | \mathbb{K}_x | \mathbb{K}_y |
|-------|----------------|-----------------------------|
| I | 0 | $2/3(R_i^2 - d_2^2)^{3/2}$ |
| II | 0 | $-2/3(R_i^2 - d_2^2)^{3/2}$ |

División 2 celdas

| Celda | \mathbb{K}_x | \mathbb{K}_y |
|-------|-----------------------------|-----------------------------|
| I | $-2/3(R_i^2 - d_1^2)^{3/2}$ | 0 |
| II | $2/3(R_i^2 - d_1^2)^{3/2}$ | $2/3(R_i^2 - d_2^2)^{3/2}$ |
| III | 0 | 0 |
| IV | 0 | $-2/3(R_i^2 - d_2^2)^{3/2}$ |

División 3 celdas

| Celda | \mathbb{K}_x |
|-------|--|
| I | $-1/6[3d_2R_i^2 - 3d_1^2d_2 - d_2^3 + 2(R_i^2 - d_1^2)^{3/2}]$ |
| II | $1/6[3d_2R_i^2 - 3d_1^2d_2 - d_2^3 + 2(R_i^2 - d_1^2)^{3/2}]$ |
| III | $1/6[3d_2R_i^2 - 3d_1^2d_2 - d_2^3 - 2(R_i^2 - d_1^2)^{3/2}]$ |
| IV | $-1/6[3d_2R_i^2 - 3d_1^2d_2 - d_2^3 - 2(R_i^2 - d_1^2)^{3/2}]$ |

| Celda | \mathbb{K}_y |
|-------|--|
| I | $-1/6[3d_1R_i^2 - 3d_1d_2^2 - d_1^3 - 2(R_i^2 - d_2^2)^{3/2}]$ |
| II | $1/6[3d_1R_i^2 - 3d_1d_2^2 - d_1^3 + 2(R_i^2 - d_2^2)^{3/2}]$ |
| III | $1/6[3d_1R_i^2 - 3d_1d_2^2 - d_1^3 - 2(R_i^2 - d_2^2)^{3/2}]$ |
| IV | $-1/6[3d_1R_i^2 - 3d_1d_2^2 - d_1^3 + 2(R_i^2 - d_2^2)^{3/2}]$ |

División 4 celdas

Con estas tablas, agregando la información faltante de la división de 2 celdas explicitadas anteriormente, conociendo la posición de los discos en cada choque se puede asignar cada cambio de momentum a una celda en particular en el espacio. Esto nos permite calcular, dentro de una simulación por eventos y por cada intervalo de tiempo, la presión colisional media sobre la celda $\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}}(\text{Celda})$ de forma local sin ambigüedades.

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}}(\text{Celda}) = -\frac{1}{A_{\text{Celda}}} \sum_{i,j=1}^N \frac{\delta_i}{2} (\Delta^{2D} \vec{v}_{ij})_\alpha \delta(t-t^*) \mathbb{K}_\beta(\vec{r}_i(t)), \quad (3.10)$$

donde A_{Celda} es el área de la celda de medición.

Se debe observar que la división entre cuatro celdas no mantiene la dependencia de $|d|$ de modo que el signo de d_1 y d_2 influye en el cálculo de cada elemento de \mathbb{K} . A su vez, si se suman elementos de dos celdas contiguas, ya sea en el caso de tres o cuatro porciones de disco en distintas celdas, se recupera el resultado obtenido para considerar la división del grano entre dos celdas.

3.5. Sobre el tensor de presión cinética

Dentro de la literatura ([15], [8], [20]) se ha definido el tensor de presión de estos sistemas con múltiples partículas como la suma de dos partes: la presión colisional o de interacción entre partículas y la presión cinética. Esta última da cuenta del transporte de momentum que ocurre en el sistema producto de que los granos que lo conforman tienen velocidades ligeramente distintas a las del fluido que las rodea si se considera un gran número de partículas. Esta es la velocidad peculiar ya fue definida para dar sentido al concepto de temperatura granular (2.36). Usando esta idea en la ecuación de balance de momentum (2.16) se tiene, para el último término aún no discutido:

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} \cdot ((\vec{P}_{2D}) \vec{V}_{2D}) &= \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left(\sum_i \delta_i \vec{v}_i (\vec{v}_i \cdot \hat{e}_{\beta}) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right) \\
&= \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left(\sum_i \delta_i (\vec{C}_i + \vec{\nabla}_{\text{Celda}}) ((\vec{C}_i + \vec{\nabla}_{\text{Celda}}) \cdot \hat{e}_{\beta}) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right) \\
&= \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \sum_i \delta_i (\vec{C}_i (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\beta}) + \vec{\nabla}_{\text{Celda}} (\vec{\nabla}_{\text{Celda}} \cdot \hat{e}_{\beta})) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \\
&\quad + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \sum_i \delta_i (\vec{\nabla}_{\text{Celda}} (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\beta}) + \vec{C}_i (\vec{\nabla}_{\text{Celda}} \cdot \hat{e}_{\beta})) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] , \\
&= \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \sum_i \delta_i (\vec{C}_i (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\beta})) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} (\vec{\nabla}_{\text{Celda}} (\vec{\nabla}_{\text{Celda}} \cdot \hat{e}_{\beta}) \rho_{2D}) \\
&\quad + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \vec{\nabla}_{\text{Celda}} \left(\sum_i \delta_i \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \cdot \hat{e}_{\beta} \right) \\
&\quad + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} (\vec{\nabla}_{\text{Celda}} \cdot \hat{e}_{\beta}) \sum_i \delta_i \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] . \tag{3.11}
\end{aligned}$$

El primer término puede interpretarse como la divergencia del tensor de presión cinético [20]:

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{cin}} = \sum_i \delta_i (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\alpha}) (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\beta}) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] . \tag{3.12}$$

El segundo término de (3.11) corresponde al movimiento medio dentro de la celda y es similar al último término de la ecuación hidrodinámica (3.3), por lo que no se incluye en el tensor de presión cinético. Los últimos dos términos podrían ser interpretados como un nuevo tensor, pero al integrarlos en la celda, utilizando la propiedad (2.37), son nulos, por lo que tampoco se incluyen en este tensor de presión.

Finalmente, el tensor de presión es calculado como la suma de ambos tensores de presión:

$$\mathbb{P} = \mathbb{P}^{\text{col}} + \mathbb{P}^{\text{cin}} . \tag{3.13}$$

Cabe señalar que la forma de medir ambos tensores dentro de las simulaciones llevadas por eventos es distinta, dado que la presión colisional es calculada en el instante donde ocurre un choque y la presión cinética está bien definida en todo instante de tiempo, mientras se tenga un valor local promedio de la velocidad. Por esta última razón se hace necesario considerar el cálculo sobre un estado estacionario que desarrolle el sistema.

Esta misma idea, utilizar la velocidad fluctuante, puede ser aplicada al último término de la ecuación de balance de energía (2.24):

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{2D}^2}{2\rho_{2D}} \right) \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \right) &= \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \sum_i \delta_i v_i^2 \vec{v}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \\
&= \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\rho_{2D} \mathbb{V}_{\text{Celda}}^2}{2} \vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} + \sum_i \frac{\delta_i}{2} (\vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} \cdot \vec{C}_i) \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right) \\
&+ \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} \sum_i \frac{\delta_i}{2} C_i^2 \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] + \sum_i \frac{\delta_i}{2} C_i^2 \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right) \quad (3.14) \\
&+ \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} \cdot \sum_i \frac{\delta_i}{2} \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right) \vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} + \mathbb{V}_{\text{Celda}}^2 \sum_i \frac{\delta_i}{2} \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right).
\end{aligned}$$

Se analizarán los términos dentro de la divergencia. Estos términos son análogos a los obtenidos al analizar el flujo de energía en el contexto de la teoría cinética. Los dos últimos son nulos una vez se integran en una celda y se aplica la propiedad (2.37). El primer término corresponde al flujo de energía cinética media debido a campos medios locales, similar al último término observado en la ecuación hidrodinámica de conservación de energía (3.4). El segundo término de (3.14) corresponde a $\vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} \cdot \mathbb{P}^{\text{cin}}$.

El tercer término de la misma ecuación puede relacionarse con la temperatura $T^{(1)}$ (2.33), solo si se toma un promedio temporal de esta cantidad. Sería entonces equivalente a $N_{2D}(\text{Celda}) T^{(1)} \vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}}$. Finalmente, el cuarto término de la ecuación (3.14) puede interpretarse como el flujo de calor \vec{Q} :

$$\vec{Q} = \sum_i \frac{\delta_i C_i^2}{2} \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|], \quad (3.15)$$

y puede calcularse dentro de cada celda de medición de la simulación.

De esta forma, puede reescribirse:

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{2D}^2}{2\rho_{2D}} \right) \frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \right) &= \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\rho_{2D} \mathbb{V}_{\text{Celda}}^2}{2} \vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} + \vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} \cdot \mathbb{P}^{\text{cin}} + \vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} \sum_i \frac{\delta_i}{2} C_i^2 \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] + \vec{Q} \right) \\
&+ \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} \cdot \sum_i \frac{\delta_i}{2} \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right) \vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}} + \mathbb{V}_{\text{Celda}}^2 \sum_i \frac{\delta_i}{2} \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right).
\end{aligned}$$

La interpretación de cada una de estas cantidades puede diferir con las observadas en la literatura referida a la teoría cinética, dado que en ella se realiza un coarse graining temporal junto al espacial, a diferencia de este trabajo donde solo se hace un promedio espacial dentro de cada celda para definir la velocidad local $\vec{\mathbb{V}}_{\text{Celda}}$. Esta observación excluye al término relacionado con la temperatura $T^{(1)}$.

3.5.1. Medición de \mathbb{P}^{cin} en las simulaciones

Para medir dentro de las simulaciones el tensor de presión cinética (3.12) en cada celda de medición se debe integrar el campo dentro de la celda. Es posible conocer el valor de cada componente en cualquier instante de tiempo. Se debe considerar, sin embargo, que al integrar el campo sobre la celda el resultado deja de tener unidades de presión, y tiene características de presión por volumen. En el capítulo siguiente se presentará a la presión cinética media dentro de la celda como la integral de la presión cinética dividida por el área de la celda de medición A_{Celda} .

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{\alpha\beta}^{cin}(Celda) &= \frac{1}{A_{Celda}} \iint_{Celda} \sum_i \delta_i (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_\alpha) (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_\beta) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx dy \\ &= \frac{1}{A_{Celda}} \sum_i \delta_i (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_\alpha) (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_\beta) \mathbb{I}_{celda}(\vec{r}_i), \end{aligned} \quad (3.16)$$

donde \vec{C}_i (2.31) depende de la velocidad media por partícula en la celda (2.30). Este cálculo, por lo tanto, debe hacerse en dos pasos: primero calcular $\vec{\mathbb{V}}_{Celda}$ y luego calcular la presión cinética media para cada componente y cada celda de medición.

3.6. Recapitulando las ecuaciones

Se ha eliminado el subíndice ‘Celda’ de \mathbb{V}_{Celda} y se ha definido

$$\vec{C} = \sum_i \delta_i \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|], \quad (3.17)$$

$$\bar{C}^2 = \sum_i \frac{\delta_i}{2} C_i^2 \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|], \quad (3.18)$$

de modo que al agregar las definiciones obtenidas para la presión colisional y a la presión cinética a las ecuaciones de balance, obtenidas en las secciones anteriores, se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{2D} = -\vec{\mathbb{V}} \cdot \vec{P}_{2D} + F_\rho, \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{2D} = -\vec{\mathbb{V}} \cdot (\mathbb{P}^{col} + \mathbb{P}^{cin}) - \vec{\mathbb{V}} \cdot ((\vec{\mathbb{V}}) \rho_{2D} \vec{\mathbb{V}}) - \vec{\mathbb{V}} \cdot ((\vec{C}) \vec{\mathbb{V}}) - \vec{\mathbb{V}} \cdot ((\vec{\mathbb{V}}) \vec{C}) + \vec{F}_P, \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(P_{2D})^2}{2\rho_{2D}} \right) &= -\vec{V}_{2D} \cdot (\vec{\mathbb{V}} \cdot \mathbb{P}^{col}) - \vec{\mathbb{V}} \cdot (\vec{\mathbb{V}} \cdot \mathbb{P}^{cin}) - \vec{\mathbb{V}} \cdot \left(\frac{\rho_{2D} \mathbb{V}^2}{2} \vec{\mathbb{V}} \right) - \vec{\mathbb{V}} \cdot (\bar{C}^2 \vec{\mathbb{V}}) \\ &\quad - \vec{\mathbb{V}} \cdot \vec{Q} - \vec{\mathbb{V}} \cdot \left(\left(\vec{\mathbb{V}} \cdot \frac{\vec{C}}{2} \right) \vec{\mathbb{V}} \right) - \vec{\mathbb{V}} \cdot \left(\mathbb{V}^2 \frac{\vec{C}}{2} \right) + F_E. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Los términos F_ρ , \vec{F}_P y F_E dependen del tiempo y de la posición. Estos deben ser explicitados al momento de calcularlos, tanto en una simulación como en un experimento y dependen directamente del mecanismo de inyección de energía.

3.7. Cálculo de viscosidad de cizalle

Para los fluidos newtonianos no ideales se define el siguiente término de modo de incluir la viscosidad de cizalle η y la viscosidad de volumen ζ :

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}(x, y, t) = p(x, y, t) \delta_{\alpha\beta} - \eta \left(\partial_\alpha v_\beta + \partial_\beta v_\alpha - \delta_{\alpha\beta} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) - \zeta \delta_{\alpha\beta} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}, \quad (3.22)$$

donde p corresponde a la presión hidrostática usual (escalar), \vec{v} es el campo local de velocidades, ∂_i es la derivada espacial en la dirección \hat{e}_i y $\delta_{\alpha\beta}$ es la delta de Kronecker.

Dadas las definiciones que se han presentado, es posible obtener de forma independiente dentro de una celda de medición, dentro de una simulación o experimento, cada elemento de la definición anterior con excepción de las constantes y de la presión hidrostática. Se proponen a continuación dos métodos para calcular la viscosidad de cizalle η .

3.7.1. Método directo

Esta definición se puede desglosar en cuatro otras independientes dado que $\alpha, \beta \in \{x, y\}$:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{xx}(x, y) &\equiv p(x, y) - \eta \left(\partial_x u_x - \partial_y u_y \right) - \zeta \vec{\nabla} \cdot \vec{u}, \\ \mathbb{P}_{xy}(x, y) &\equiv -\eta \left(\partial_x u_y + \partial_y u_x \right), \\ \mathbb{P}_{yx}(x, y) &\equiv -\eta \left(\partial_y u_x + \partial_x u_y \right), \\ \mathbb{P}_{yy}(x, y) &\equiv p(x, y) - \eta \left(\partial_y u_y - \partial_x u_x \right) - \zeta \vec{\nabla} \cdot \vec{u}. \end{aligned}$$

Como \mathbb{P} es medido en la simulación, tomando alguna de las dos definiciones ya explicadas, junto con $\partial_i u_j$, se despeja η :

$$\eta_{D_1} = \frac{\mathbb{P}_{xx} - \mathbb{P}_{yy}}{2(\partial_y u_y - \partial_x u_x)}, \quad (3.23)$$

$$\eta_{D_2} = -\frac{\mathbb{P}_{xy} + \mathbb{P}_{yx}}{2(\partial_y u_x + \partial_x u_y)}. \quad (3.24)$$

Ambas ecuaciones, en un fluido ideal, deberían ser equivalentes, pero en la simulación podrían diferir debido a que se consideran valores locales tanto en tiempo como espacio y no existe una relación que estas cantidades deban cumplir en conjunto.

Estas fórmulas requieren de algunas consideraciones especiales. Para calcular $\partial_\alpha u_\beta$ se usa la discretización espacial en celdas de medición y se calcula la diferencia de velocidad promedio entre celdas. Este valor, en caso de estados estacionarios, tiene el riesgo de ser muy pequeño y, por consiguiente, la fracción, que da paso a η , ser muy grande, sobrestimando el valor a calcular.

La otra expresión que se deriva de la definición de los fluidos clásicos sería la relación entre la presión y el coeficiente de roce de cuerpo:

$$\mathbb{P}_{xx} + \mathbb{P}_{yy} = 2p - 2\zeta \left(\partial_y u_y + \partial_x u_x \right). \quad (3.25)$$

Esta expresión tiene como complicación que $p(x, y)$ depende de la posición de la medición, por lo que no se puede calcular directamente ζ sin hacer alguna suposición sobre esta presión escalar o

considerar una medición indirecta a través de encontrar una relación empírica entre las mediciones directas de p y $\partial_\alpha u_\beta$. Para ello, si se desprecia el segundo término de la mano derecha de la ecuación (3.25), se puede calcular la presión escalar como $p = \frac{1}{2} Tr[\mathbb{P}]$, donde Tr corresponde a la traza del tensor.

Puede, así también, ζ ser medido de forma indirecta observando una curva donde se haya medido de forma independiente $2(\partial_y u_y + \partial_x u_x)$ y $\mathbb{P}_{xx} + \mathbb{P}_{yy}$. Si el sistema se comporta como un fluido usual entonces la curva será, aproximadamente, una recta de pendiente ζ . Esta técnica no se incluye en el alcance de este trabajo.

3.7.2. Método de Green-Kubo

En un fluido newtoniano, existe una relación entre el campo de velocidades y el tensor de presión, con $\alpha \neq \beta$,

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta} = -\eta \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right).$$

Se mantendrá esta condición para el resto de la discusión. A partir de esta relación se desarrolla en [23, 24] y se explicita en [25] una relación para η en función de \mathbb{P} :

$$\eta_{\text{GK}} = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \langle \mathbb{P}_{\alpha\beta}(0); \mathbb{P}_{\alpha\beta}(t) \rangle dt. \quad (3.26)$$

Como en la práctica se mide en tiempos discretos y finitos, se obtiene una serie de valores para $\mathbb{P}(\vec{r}, vdt)$ con $v \in \{0, \dots, N_t\}$ y se calcula:

$$\eta_{\text{GK}}(\mathbb{P}_{\alpha\beta}, \vec{r}) = \frac{V}{k_B T} \sum_{\tau=0}^{N_t} \langle \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, 0); \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, \tau dt) \rangle dt$$

y como estimador de la autocorrelación de \mathbb{P} se puede usar tanto el estimador insesgado

$$\langle \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, 0); \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, \tau dt) \rangle_{\text{ins}} = \frac{1}{N_t - \tau} \sum_{v=0}^{N_t - \tau} \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, vdt) \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, (\tau + v)dt) \quad (3.27)$$

como el estimador sesgado

$$\langle \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, 0); \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, \tau dt) \rangle_{\text{ses}} = \frac{1}{N_t - \tau} \sum_{v=0}^{N_t - \tau} \frac{(\mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, vdt) - \bar{X}(\mathbb{P}_{\alpha\beta}, \vec{r})) (\mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, (\tau + v)dt) - \bar{X}(\mathbb{P}_{\alpha\beta}, \vec{r}))}{\sigma(\mathbb{P}_{\alpha\beta}, \vec{r})^2}, \quad (3.28)$$

con $r \in \{a, b\}$, \bar{X} el promedio y σ la desviación estándar de la serie de valores de $\mathbb{P}_{\alpha\beta}$ obtenida por cada celda de medición en distintos tiempos. Se compararán ambos estimadores para considerar cuál de ellos es más adecuado. La condición para que el estimador tenga sentido estadístico es que $N_t - \tau \gg 1$, por ende no es adecuado que el límite de la sumatoria en η_{GK} sea N_t , sino que se modifica para cumplir esta condición.

$$\eta_{\text{GK}}(\mathbb{P}_{\alpha\beta}, \vec{r}) = \frac{V}{k_B T} \sum_{\tau=0}^{\kappa N_t} \langle \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, 0); \mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, \tau dt) \rangle dt, \quad (3.29)$$

con $0 < \kappa \ll 1$. En la práctica se usa $\kappa = 0.5$ y con ello se asegura la condición estadística señalada. Se verá el estimador insesgado genera, por definición, menor dispersión en los datos y por ende es una herramienta más adecuada para estimar η .

3.8. Resumen del capítulo

Se han dado ejemplos de mecanismos de inyección de energía relevantes a los sistemas granulares numéricos y experimentales junto a su forma de incorporarse a las ecuaciones de balance microscópica de las distintas densidades.

Se ha explicitado el tensor de presión colisional y su forma de cálculo dentro de las simulaciones. Debido al esquema de choques instantáneos estas interacciones deben ser calculadas dentro de las simulaciones en el instante de tiempo en que ocurren. Junto a este tensor, se ha explicitado el tensor de presión cinético, el cual tiene una estructura similar al descrito por la teoría cinética y al encontrado por Goldhirsch [15]. Este análisis da paso a definiciones secundarias como el flujo de calor \vec{Q} que pueden activamente ser calculados dentro de la simulación.

A su vez, las definiciones de los tensores de presión permiten el cálculo de las autocorrelaciones de los elementos fuera de la diagonal con el fin de encontrar la viscosidad de cizalle η en cada celda de una simulación que permanezca en un estado estacionario fuera del equilibrio. Se ha propuesto un esquema para lograr medir la viscosidad de volumen ζ a partir de la presión escalar y los gradientes del campo de velocidad.

Capítulo 4

Medición en un sistema bidimensional

4.1. Sumario

En este capítulo se analizará un sistema numérico simulado donde se calcula cada uno de los términos definidos en los capítulos anteriores. Se comprobará la validez de las ecuaciones de balance, la utilidad de las definiciones del tensor de presión y se compararán las distintas formas de coeficientes de viscosidad de cizalle, para poder establecer un criterio y elegir la definición más útil entre las definiciones redundantes de temperatura y el coeficiente de viscosidad.

4.2. Introducción

Para asegurar la validez de las ecuaciones se estudia la evolución de las variables de un sistema bidimensional, en particular se utiliza una caja cuadrada periódica en la dirección \hat{x} y con paredes térmicas en los límites superiores e inferiores. Se calcula independientemente cada término de las ecuaciones de balance y se muestra el tensor de presión calculado directamente en la simulación.

Todas las cantidades han sido adimensionalizadas apropiadamente. Las longitudes son comparadas con respecto al diámetro uniforme de los discos dentro de la caja, la masa está normalizada por la masa uniforme de los discos y el tiempo se vincula con la temperatura de la pared térmica inferior de la caja cuadrada. Se pueden comparar estas dimensiones con las de un sistema real en un laboratorio escalando las cantidades de acuerdo a estos parámetros. Se entregan algunos detalles de este proceso en el apéndice A.1.

Se toma como la posición de la celda de medición el centro geométrico de la misma. El sistema elegido tiene especial interés pues presenta múltiples densidades locales, superando localmente el punto de validez de las aproximaciones de baja densidad [26].

4.3. El sistema a analizar

Se considera un sistema que no incorpora la gravedad y cuyo mecanismo de inyección de energía está dado por paredes térmicas.

En una caja cuadrada de 20 diámetros de lado se localizan 300 discos de diámetro $2R = 1$. Para realizar las mediciones locales se construyeron $19 \times 19 = 361$ celdas, mostradas en la figura 4.1 con las líneas punteadas. Se destaca en la misma figura el eje \hat{x} horizontalmente y el eje \hat{y} vertical, con el origen en la esquina inferior izquierda.

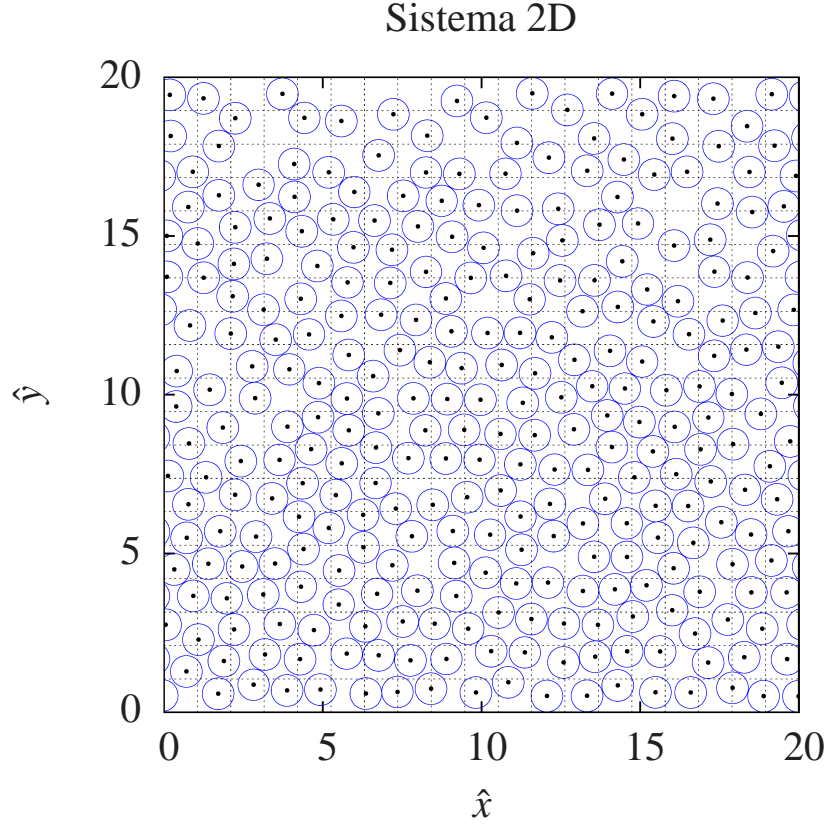


Figura 4.1: Ejemplo de un sistema 2D con 300 discos en una caja semiperiódica. En líneas punteadas, las divisiones para las celdas de medición. Las circunferencias marcan el contorno de los discos y los puntos sus centros. En este caso el sistema se han utilizaron las temperaturas $T_1 = 1$ y $T_2 = 5$ en las paredes y una inelasticidad de $q_n = 0.01$.

Las paredes verticales no existen y se impone sobre ellas condiciones de borde periódicas para que los discos puedan atravesarlas libremente. Sobre la pared superior e inferior se imponen reglas de choque especiales: cada pared tiene una temperatura característica independiente. Esta temperatura se traduce en que al chocar la i -ésima partícula contra la pared esta la refleja, en la dirección normal, con una velocidad obtenida aleatoriamente de la distribución de probabilidad maxwelliana con temperatura T :

$$f(v_y) = \frac{m_i}{k_B T} v_y \exp\left[-\frac{m_i v_y^2}{2k_B T}\right] \quad (4.1)$$

donde m_i es la masa del disco involucrado y v_y la componente de la velocidad normal a la pared con que incide el disco. La velocidad tangencial (en este caso v_x) no es modificada. En este caso se toma la constante de Boltzmann $k_B = 1$ de modo que la temperatura de las paredes tiene directa relación con la temperatura granular. De este modo se inyecta momentum y energía a través de

las paredes y se logra que la disipación producto de choques entre discos no haga decaer a todo el sistema en el reposo, sino que se mantenga en un estado estacionario fuera del equilibrio. En lo sucesivo, a la temperatura de la pared inferior se le llamará T_1 y T_2 a la temperatura de la pared superior.

Esta forma de inyectar energía, cuando los choques entre los granos son inelásticos, genera una aglomeración en el interior de la caja lejos de las paredes térmicas (según dirección \hat{y}) donde la energía cinética es menor y se observa una natural simetría de traslación en la dirección \hat{x} , que potencialmente puede romperse espontáneamente [27,28]. Este rompimiento se discute para el campo de velocidades vectorial.

Otros datos del sistema:

- Fracción de volumen ocupada $\phi = 0.589$
- Gravedad nula $\vec{g} = 0$

El coeficiente de inelasticidad y los valores para las temperaturas de las paredes serán diferentes para distintas instancias de la simulación.

4.3.1. Fuentes de momentum y energía

Dado que la inyección de energía está dada por la condición de borde que imponen las paredes térmicas se tendrá como términos fuente:

$$F_{P_x} = 0 , \quad (4.2)$$

$$F_{P_y} = \sum_{i, \text{pared } p} \delta_i \Delta(\vec{v}_{i,p}) \cdot \hat{e}_y \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) , \quad (4.3)$$

$$F_E = \sum_{i, \text{pared } p} \frac{\delta_i}{2} \Delta(v_{i,p}^2) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) , \quad (4.4)$$

donde se mantiene el esquema presentado en las ecuaciones (3.1). Por la forma en que se inyecta energía es claro que $\Delta\vec{v}_{i,p}$ solo tiene componente no nula en la dirección \hat{e}_y . Por la naturaleza localizada de esta expresión solo será relevante para las celdas adyacentes a las paredes térmicas.

4.3.2. Sobre los gráficos

En este capítulo, y los posteriores, se presentan diversos tipos de gráficos. Dada la capacidad del método desarrollado, es posible medir cada una de las cantidades definidas por cada una de las celdas de medición. En este caso, significa que se tendrán 361 series de datos dependientes del tiempo y cada una de ellas puede ser analizada y graficada de forma independiente.

Debido a esto se hace uso de 4 tipos de gráfico:

1. Los gráficos de las series dependientes del tiempo. Usadas en el caso de los campos microscópicos, este gráfico exige elegir una de las celdas de medición y presenta el cambio de cada cantidad en un intervalo de tiempo.

2. Los gráficos vectoriales. En cada celda se mide una cantidad vectorial, donde cada componente se calcula por separado, y se promedia en el tiempo. Los resultados son presentados mostrando toda la caja que contiene a los granos, se muestran las paredes de las celdas de medición y en cada uno de sus centros se dibuja el origen del vector graficado. Este tipo de gráfico es utilizado tanto para el campo de velocidad local V_{2D} como para el flujo de calor $vecQ$.
3. Los gráficos de todo el sistema, agrupando celdas en la dirección \hat{x} . Por cada celda se calcula la serie de la cantidad medida y se obtiene un valor observado para cada celda, como promedio o desviación estándar de la serie usualmente. Pero, dado que se observa la simetría de traslación en la dirección horizontal de la caja, se espera que las celdas que comparten posición \hat{y} tengan comportamiento similar y, para simplificar visualmente los gráficos, se pueden agrupar todas estas celdas en grupos con igual posición \hat{y} .

Para generar estos gráficos se utilizan 3 puntos: el máximo y mínimo valor alcanzado por una celda en cada grupo y el promedio de los valores de todas las celdas en cada grupo. Luego, se construye una “barra de error” donde los extremos corresponden al máximo y mínimo y el punto central al promedio.

Cuando se presenta más de una serie de datos en un mismo gráfico, cada barra de error se desplaza levemente del centro de la celda para que no exista superposición entre los datos graficados de las distintas series.

4. Gráfico tridimensional. Se utiliza solamente en el gráfico 4.24(a) para tener una referencia de los gradientes locales de la temperatura. Se construye tomando los valores de cada celda, asociando el valor con el punto central de la celda y trazando una superficie uniendo estos puntos generados.

4.4. Centro de masa

Una de las primeras diferencias significativas que es posible observar al reducir las propiedades de cada disco a su centro o distribuir las según su volumen consiste en calcular en el tiempo el centro de masa del sistema descrito. Dado que el centro de masa de cada disco es el centro geométrico, es posible calcularlo como sigue:

$$\vec{r}_{CM,\delta} = \frac{\sum_{i=1}^N m_i \vec{r}_i(t)}{\sum_{i=1}^N m_i} . \quad (4.5)$$

Esta definición nos permite obtener la figura 4.2(a), donde se observa una extraña situación: debido a la periodicidad en la dirección \hat{x} las partículas saltan en forma discreta todo el largo de la caja, generando que el centro de masa se mueva en pasos discretos en la misma dirección. O bien, si se parte de la definición del centro de masa usando la distribución de masa en el disco se tiene:

$$\vec{r}_{CM,\Theta} = \frac{\sum_{i=1}^N \int_V \delta_i \vec{r} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|]}{\sum_{i=1}^N \int_V \delta_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|]} . \quad (4.6)$$

Para los discos que no atraviesan las paredes verticales ambas definiciones coinciden, pero para aquellos que lo hacen, se traslada la porción de masa que está al otro lado de la pared al sector

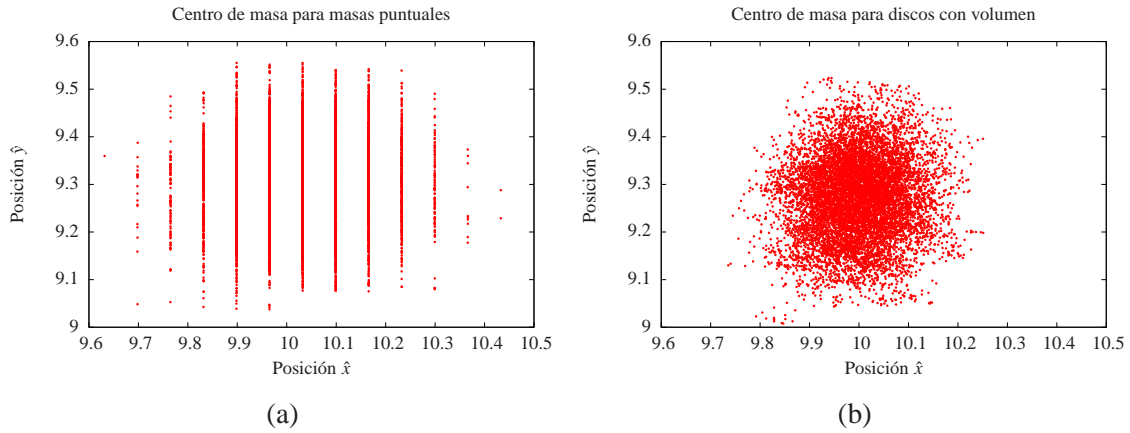


Figura 4.2: Posición del centro de masa en distintos instantes de tiempo comparando los casos de masas puntuales y discos con densidad de masa. (a) Centro de masa para partículas puntuales. Se usa la definición (4.5). (b) Centro de masa considerando partículas con volumen. Se hace uso de la definición (4.6).

dentro del volumen que corresponda. De este modo se obtiene la figura 4.2(b), donde la aberración del salto del centro de masa se ha corregido y los cambios del centro de masa son suaves en ambas direcciones del plano.

Ambas figuras difieren del rango de posiciones en la dirección \hat{x} dado que corresponden a dos instancias distintas en la simulación con condiciones iniciales y evolución distintas. A pesar de ello, coinciden en el rango en que se mueve el centro de masa en la dirección \hat{y} , dado que desarrollan la misma estructura donde el perfil de la densidad local en esa dirección es semejante.

Es posible, a partir de la posición del centro de masa, estudiar la fuerza neta externa ejercida sobre los discos en el sistema, pero es sabido que esta se vincula directamente al mecanismo de inyección de energía. Este análisis no es importante para el desarrollo del método descrito en este trabajo, por lo que no se estudiará.

4.5. Campos microscópicos

Se hizo la medición en cada celda de los tres campos estudiados en las ecuaciones de balance. Se examina en estos casos una celda adjunta a la pared inferior (de temperatura menor $T_1 = 1$), una en el centro de la caja y una adyacente a la pared superior (de temperatura mayor $T_2 = 5$). Se ha fijado un coeficiente de inelasticidad de $q_n = 0.01$, dado que permite reconocer valores cercanos al caso elástico con complejidades propias de los medios granulares.

Para efecto de comparar se presenta un gráfico del promedio y la desviación estándar en el tiempo donde solo se juzga relevante la posición vertical de la celda (hay 19 puntos por cada altura). El promedio es realizado para mediciones entre los tiempos $t_0 = 100$ y $t_f = 1100$ con intervalos de medición $dt = 0.1$.

4.5.1. Masa

Corresponde a la integración en la celda del campo densidad definido en (2.4). La integración se realiza en el instante de tiempo t conocidas todas las posiciones de los centros de los discos y sus velocidades instantáneas.

Cabe mencionar que el área de las celdas de medición es $A_{\text{celda}} \approx 1.108$ y si estuviese llena de masa con la misma densidad de los discos tendría $M_{\text{max}} \approx 1.411$. Ciertamente no es posible alcanzar esta densidad, dado que entre los discos siempre hay espacio sin llenar. Pero la mayor densidad posible consiste en rodear cada disco con otros seis de modo que sus centros forman una red triangular perfecta. Esta configuración corresponde a una masa dentro de la celda de $M_{\Delta} \approx 1.279$. Esta última es la mayor masa posible dentro de la celda para el sistema estudiado.

Se presentan a continuación mediciones de masa dentro de celdas a distinta posición en el eje \hat{y} . El comportamiento comparando celdas que comparten posición en el eje \hat{y} es similar dado que pueden comunicarse por la pared vertical periódica. Se han elegido dos celdas a distinta altura que presentan densidades promedio distintas. Se muestra, junto a la definición de densidad de masa usada en este trabajo (2.4), a la masa si se considerasen a los granos como partículas puntuales usando la definición (2.1).

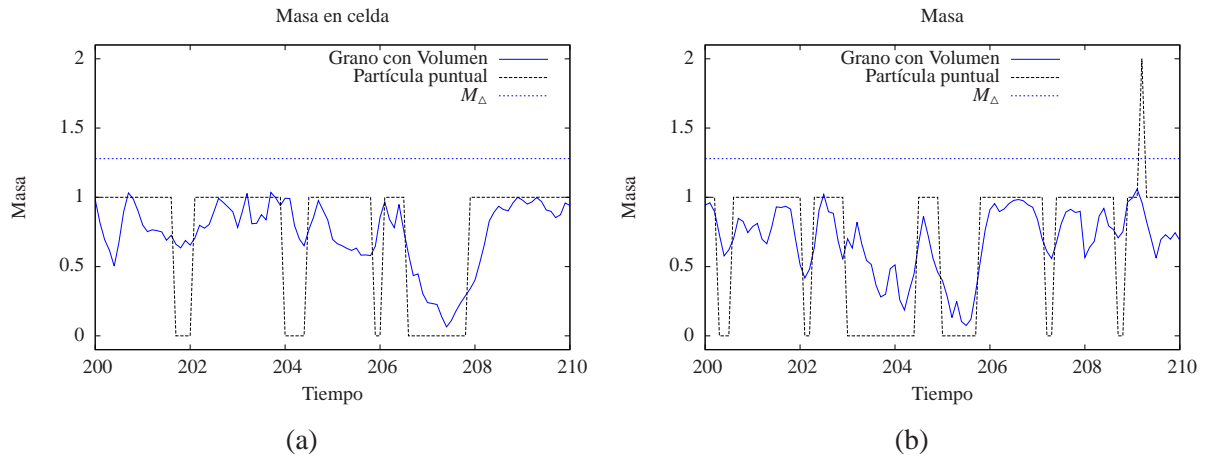


Figura 4.3: Medición de la masa dentro de cada celda en el tiempo. Se incluye el valor M_{Δ} como referencia. (a) Masa en celda a altura media medida en distintos instantes, con posición $y = \frac{L_y}{2}$. (b) Masa en celda cercana a la pared superior medida en distintos instantes, con posición $y = \frac{5L_y}{6}$.

La diferencia para celdas tan pequeñas considerando la distribución de masa puntual, usando la función delta de Dirac, con la masa distribuida propuesta en este trabajo es notoria. Con la primera solo se pueden alcanzar valores enteros, por lo que los cambios son bruscos y, por instantes, sobrestima en casi del doble del valor real de masa dentro de la celda y puede superar el valor máximo posible M_{Δ} para sistemas bidimensionales.

Los parámetros estadísticos, graficados en la figura 4.4, tanto para el esquema de masas puntuales como de granos con volumen, muestran una estabilidad notable reflejada en la dispersión de

los valores (tamaño de las barras), dado que se han agrupado a todas las celdas en la misma altura como similares. Incluso en los extremos, cerca de las paredes térmicas, el promedio de masa en la celda parece depender solamente de la posición vertical, dado que la dispersión de los promedios es baja y podría reducirse aumentando el número de instantes incluidos en la medición. Sin embargo hay una diferencia entre el ancho o dispersión de los promedios de las dos mediciones, junto al valor distinto alcanzado en los bordes. Desde este punto de vista la estrategia que se presenta en este trabajo es superior a la usual que considera masas puntuales.

Hay una asimetría natural al comparar ambos extremos, dado que la pared superior tiene una temperatura mayor a la pared inferior, es esperable que la densidad en las celdas superiores sea menor que las inferiores y que el máximo se encuentre más cercano a la pared fría.

El comportamiento de la desviación estándar, que en el caso de la masa es de un tamaño menor en cada punto comparado con el valor del promedio, en ambas series de datos es estable y presenta una clara dependencia de la altura. En el caso de los granos con volumen, el mínimo de la desviación coincide con el máximo de la masa y tiene un comportamiento asimétrico esperable, dadas las distintas temperaturas de las paredes superior e inferior. El tamaño de la dispersión de los datos en el caso de las partículas puntuales es mayor a la otra serie, resultado esperado al observar que los valores alcanzables son solo números enteros.

Existe una caída en la masa promedio que parece extraña, en consideración con el resto de los datos, cerca de la pared inferior. Esto se debe a que la pared rígida no permite que los granos puedan acomodarse de la misma forma cerca de la pared que lejos de ella. Esta situación también es apreciable en las otras mediciones.

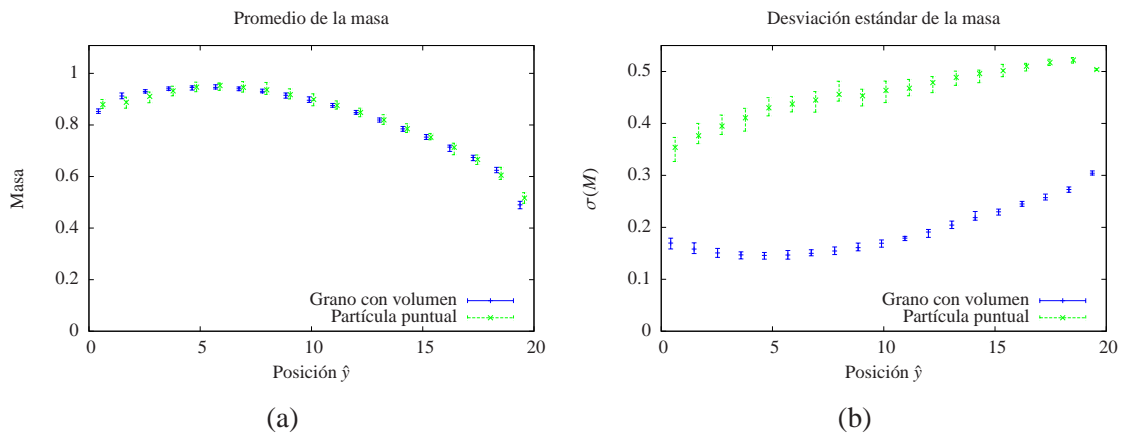


Figura 4.4: Estadísticos de la medición de masa por celda. (a) Promedio de masa por celda. (b) Desviación estándar por celda.

Estos gráficos nos indican que es posible dividir el espacio de la caja en celdas de medición más pequeñas de modo de conseguir una densidad local (a través de la masa local) que puede describirse por una curva continua.

4.5.2. Momentum \hat{x}

El momentum en la dirección \hat{x} se calcula integrando la función (2.5), aislando la componente apropiada de la velocidad de los granos. Dado que el sistema presenta simetría de reflexión en cualquier recta vertical y simetría de traslación dadas las condiciones de borde periódicas, es esperable que la cantidad de momentum horizontal observada sea cercana a cero y pequeña comparada con la componente \hat{y} del momentum.

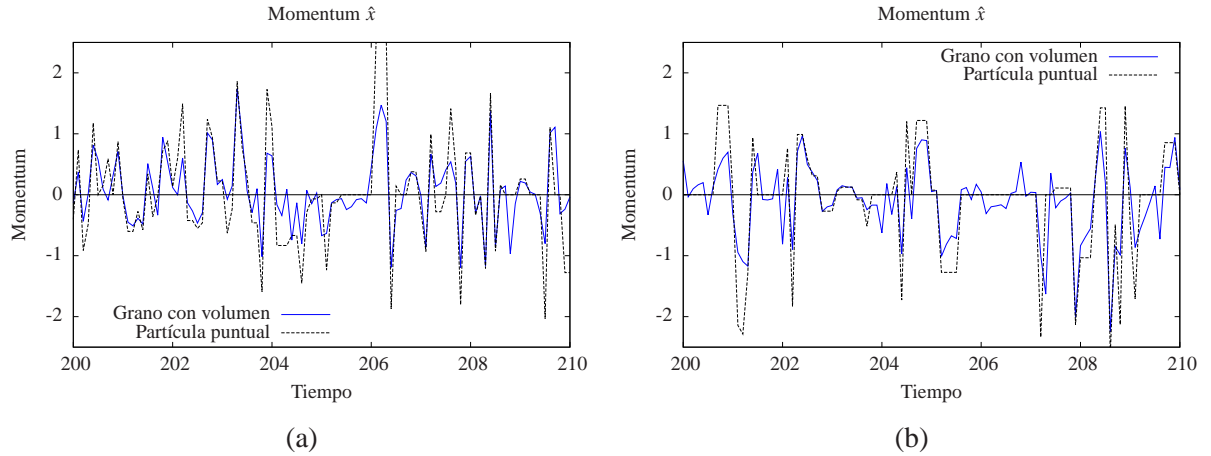


Figura 4.5: Momentum \hat{x} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum en la dirección \hat{x} en celda central, con posición $y = \frac{L_y}{2}$. (b) Momentum \hat{x} en celda superior, con posición $y = \frac{5L_y}{6}$.

Se puede observar en la figura 4.5 que los valores calculados para el momentum usando masas puntuales suelen ser mayores en módulo que el valor del módulo del momentum dentro de la celda para los granos con volumen. La primera serie de datos repite la tendencia de presentar cambios bruscos de los valores y mantiene el valor por un periodo corto de tiempo donde se presume no ocurren choques de granos que pertenezcan a la celda. Con respecto a los valores de ambas series de datos se mantienen similares entre las celdas, con la única diferencia de que los valores son en módulo ligeramente más grandes para la celda superior.

Estas características se ven reflejadas en la figura 4.5(b), donde la desviación estándar es menor cerca del centro de la caja, siendo el extremo superior el que acumula mayor dispersión en los datos. Teniendo esto en cuenta, resulta comprensible que los datos de la desviación estándar estén poco dispersos a distintas alturas, comparados con los valores de los promedios en el gráfico 4.5(a), donde los valores son pequeños y muy dispersos. En ambos casos, promedios y desviaciones estándar, los valores observados para las dos series de datos son distintas, en especial para la desviación estándar, donde la dispersión de los valores medidos en la simulación son menores para el esquema propuesto en este trabajo. En la serie de promedios las diferencias no son tan notorias pero existen, principalmente en el tamaño de las barras.

A pesar de ello, se observa en la figura 4.6(a) que hay dos zonas importantes, una en $y \in [0 : 10]$ donde todos los promedios de velocidades son principalmente negativos y otro sector en $y \in [10 : 20]$ donde los valores de los promedios son principalmente positivos. Estas características han sido observadas en la literatura pues ocurre, por la geometría de los choques, un quiebre espontáneo de

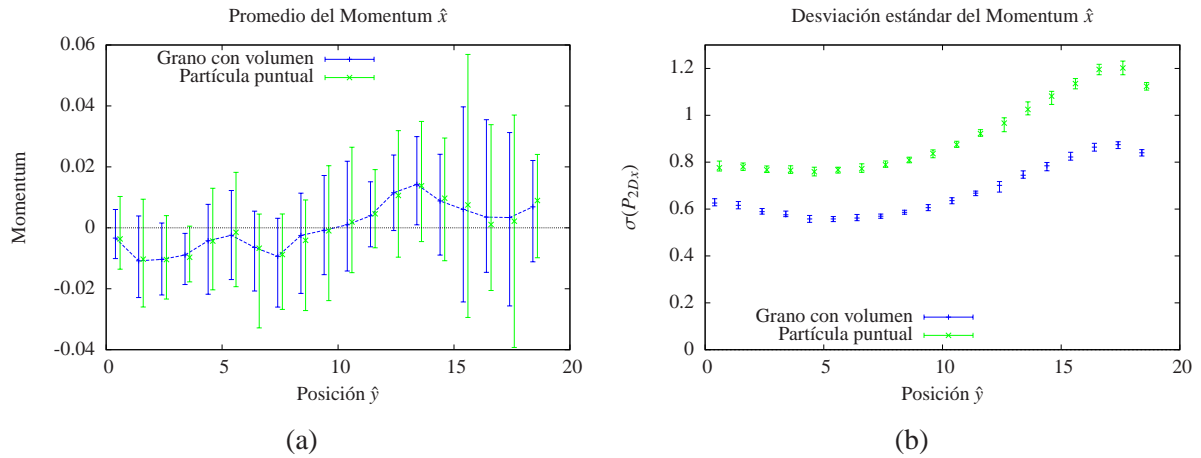


Figura 4.6: Estadísticos del momentum en la dirección \hat{x} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{x} local. La línea punteada une a los centros de las barras para los granos con volumen. (b) Desviación estándar del momentum \hat{x} por celda agrupados según su posición \hat{y} .

simetría [27]. Este fenómeno es observado en distintas iteraciones de las condiciones iniciales pero no siempre mantiene el orden en los signos observado en estos gráficos. Disminuir el tamaño de las celdas de medición podría hacer aparecer el fenómeno con mayor notoriedad pero medir una mayor cantidad de intervalos de medición temporal hace que el rango de valores del promedio disminuya, por lo que no es persistente en el tiempo, puede considerarse un estado transitorio de decaimiento lento.

4.5.3. Momentum \hat{y}

Se obtienen los valores de forma análoga a los del momento en la dirección \hat{y} .

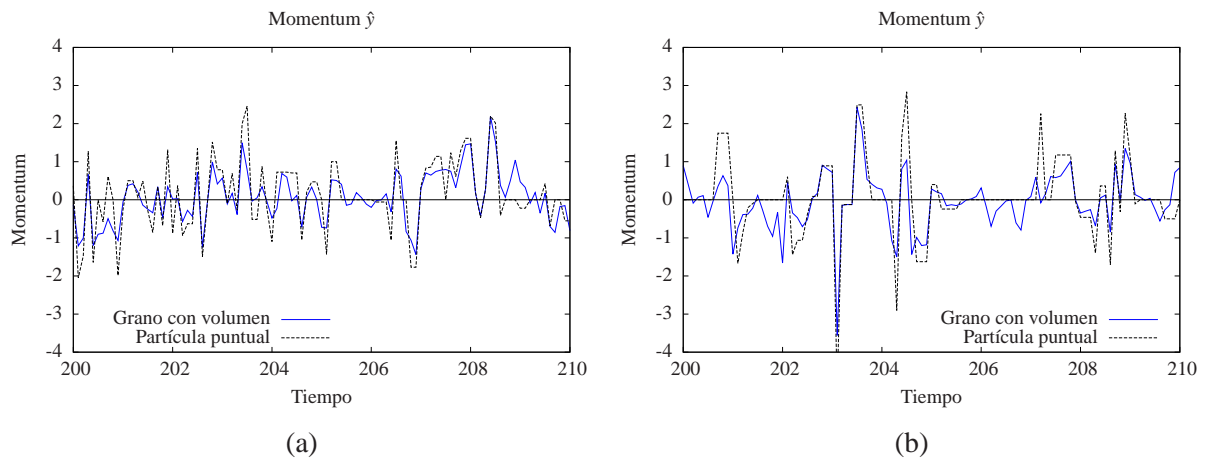


Figura 4.7: Momentum en la dirección \hat{y} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum \hat{y} en celda central, con posición $y = \frac{L_y}{2}$. (b) Momentum \hat{y} en celda superior, con posición $y = \frac{5L_y}{6}$.

Se distinguen características similares en la figura 4.7. Se espera que la influencia de las condiciones de borde en este caso haga que la cercanía de las paredes influya en la velocidad de los discos, por lo que junto a la densidad, constituyen la razón de la distinción entre cada celda según la altura.

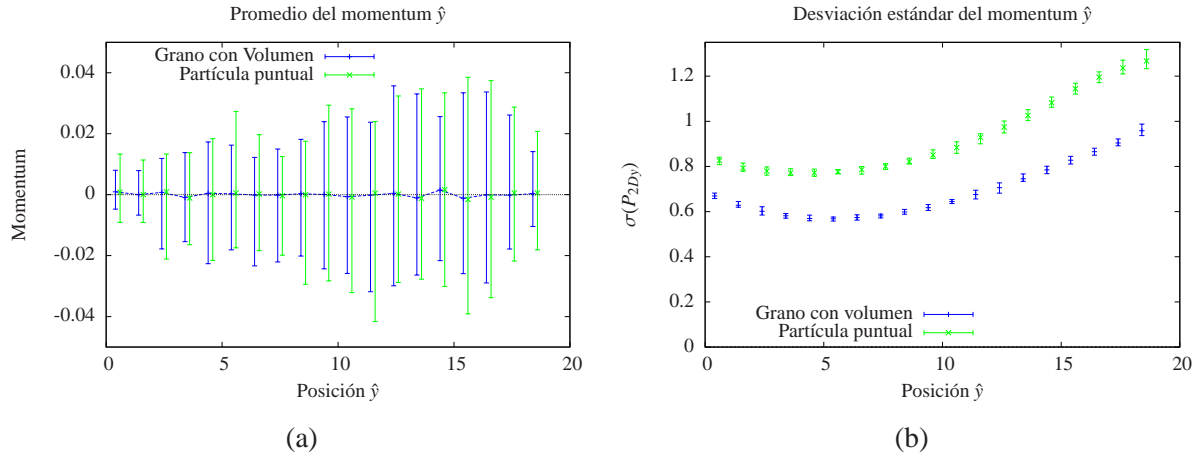


Figura 4.8: Estadísticos del momentum en la dirección \hat{y} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{y} local. La línea punteada une a los centros de las barras para los granos con volumen. (b) Desviación estándar del momentum \hat{y} por celda.

Las series de datos presentadas en la figura 4.8 reproducen las observaciones comparativas entre los esquemas de partículas puntuales y granos con volumen. No existen diferencias significativas en cuanto a los promedios, pero si en la desviación estándar por celda, donde es menor para el esquema presentado en este trabajo. Esto reafirma la idea de que este esquema refleja cambios más suaves y relacionados de mejor manera con el estado del sistema.

Se observa que, para el promedio, la dispersión de los datos es similar al momentum \hat{x} , por lo que podría haber alguna influencia en la posición horizontal. Se analizará la combinación del momentum en las dos direcciones para identificar zonas especiales dentro del espacio simulado en la siguiente sección. Se espera, sin embargo, que cualquier estructura persistente pierda su influencia en los promedios al realizar un promedio sobre un tiempo de simulación mayor, dado que pueden potencialmente desplazarse en la dirección \hat{x} sin dificultad.

4.5.4. Campo de velocidad vectorial

Para aclarar la discusión acerca de la inhomogeneidades del momentum se incluye la figura 4.9, donde se hace uso de los promedios obtenidos independientemente para $(P_{2D})_x$ y $(P_{2D})_y$.

En la figura 4.9(a) se observan en la parte superior varias estructuras de circulación cerrada con distintos tamaños y velocidades características. La sección cercana a la pared superior el momentum tiene sentido hacia la derecha del gráfico y parece rodear la forma que generan las estructuras. En la parte inferior el momentum apunta hacia la izquierda principalmente.

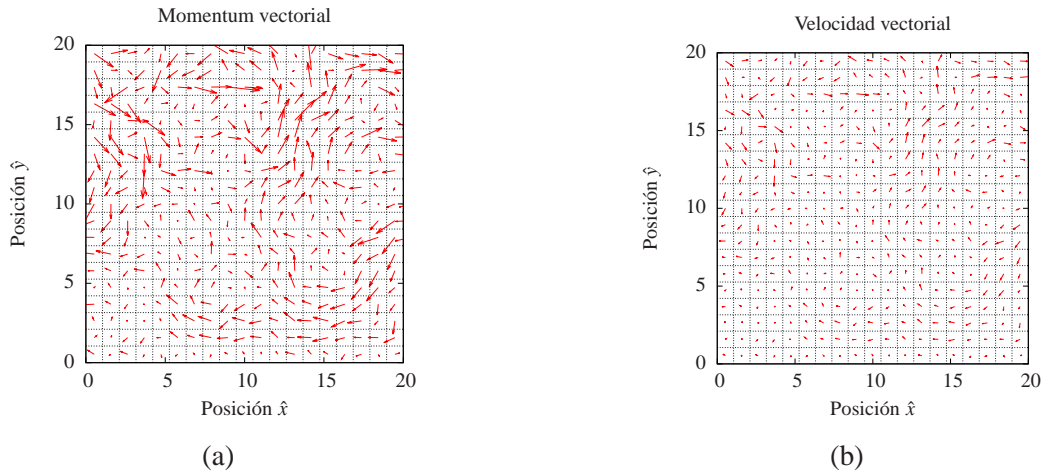


Figura 4.9: Estadísticos del momentum en la dirección \hat{x} medido por celda. (a) Campo de momentum promediado por celda. (b) Campo de velocidad promediada por celda.

Estas características están presentes no solo en este gráfico, pero como en la práctica los fluidos se analizan con la velocidad local, que permite el transporte de propiedades en el espacio, se incluye el gráfico 4.9(b) donde se muestra el campo de velocidad promedio en la simulación. Las observaciones son análogas, salvo que las estructuras inferiores están menos definidas y la velocidad en la parte superior, junto a la pared, es mucho mayor que la presente en el resto del sistema.

Si se comparan estos gráficos con una simulación de mayor duración (por ejemplo si $t_f = 2100$) los circuitos cerrados están menos definidos pues el promedio de la velocidad del sistema medido por mayor tiempo es menor. Sin embargo el movimiento de las distintas capas superior e inferior se regulariza. Estas condiciones dan a pensar que en la interfaz entre las dos capas, en la altura media de la caja, los discos tendrán un forzamiento mayor que en el resto del sistema.

Este quiebre espontáneo de simetría no es nuevo en los sistemas granulares y ha sido observado, por ejemplo, para el caso de la inyección de energía por medio de vibraciones de la caja en que están contenidas las partículas [27, 28].

4.5.5. Energía

La energía, únicamente cinética en este sistema, se calcula a partir de la definición (2.6) dentro de cada celda de medición en el tiempo.

Se presentan las figuras 4.10 donde se grafica una celda en el tiempo en las distintas regiones de interés. Se observa que el rango de los datos alcanzado por cada una de ellas es característica de la altura donde se encuentran, la celda media tiene un rango de valores de la energía más restringido que la celda superior. Este hecho está relacionado directamente con el análisis de los gráficos de momentum (figuras 4.5 y 4.7) y con la temperatura de cada pared térmica.

Se puede observar que la energía cinética presenta una diferencia entre considerar a los discos con su área o considerarlos como partículas puntuales, pero esta no es tan pronunciada como en

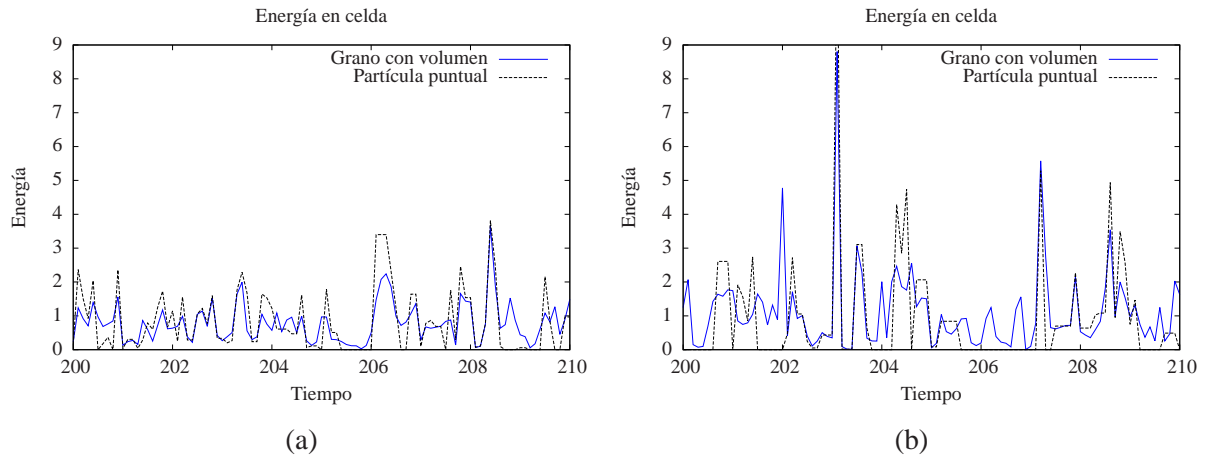


Figura 4.10: Energía cinética medida dentro de cada celda en el tiempo. (a) Energía en celda central, con posición $y = \frac{L_y}{2}$. (b) Energía en celda superior, con posición $y = \frac{5L_y}{6}$.

el caso del momentum o la masa. Los valores son cercanos y los cambios abruptos de ambas cantidades coinciden en gran medida. El gran inconveniente de considerar partículas puntuales reside en los intervalos de tiempo donde la energía no cambia en una gran cantidad, pareciendo artificialmente constante sin considerar el movimiento del disco hacia fuera o dentro de la celda.

La diferencia de la energía con el caso del momentum y la masa se debe a que estamos considerando un estado estacionario, de modo que localmente la energía cinética de los granos es similar, y por ello localmente un trozo faltante de un disco cuyo centro está dentro de la celda de un disco puede ser fácilmente compensado con otro trozo de algún otro disco presente en la celda, dado que ambas energías de los discos pueden ser también similares. Las mayores coincidencias entre ambos campos ocurren cuando dentro de la celda está presente una sola partícula.

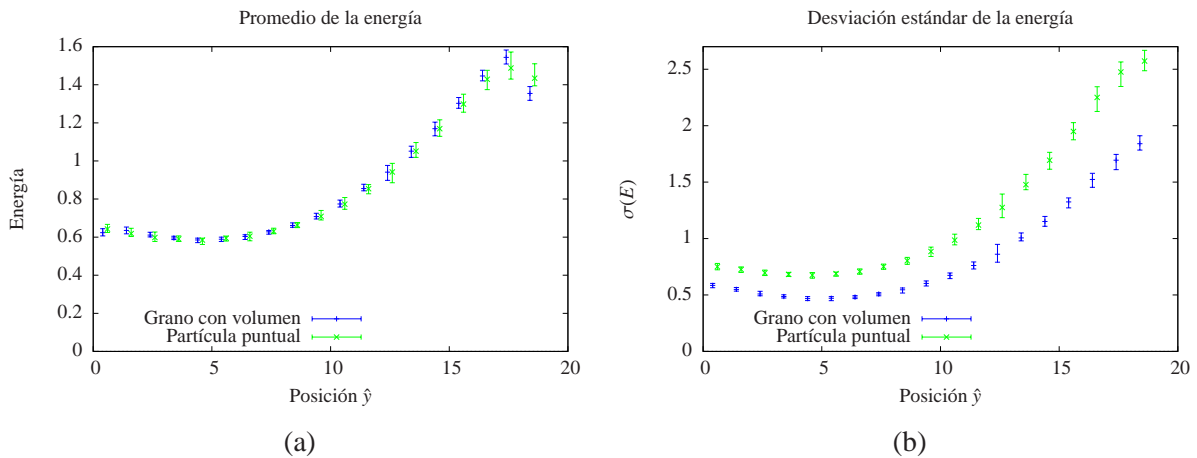


Figura 4.11: Estadísticos de la energía medida por celda. (a) Promedio de energía por celda. (b) Desviación estándar de la energía por celda.

Con respecto a los gráficos 4.11 de promedio y desviación estándar, estos presentan una estabilidad y diferencias entre las dos mediciones que se asemeja a la presente en los gráficos de masa (figura 4.4), donde se observa una curva muy estable, implicando que el promedio solo depende de la altura. Este gráfico presenta una caída en los bordes cerca de las paredes que podría deberse a la baja densidad de granos que genera que haya un menor número de granos que puedan portar energía. Esta caída es más pronunciada en el caso de los granos con volumen.

La desviación estándar presenta valores comparables a los valores del promedio y esto da muestras de las fluctuaciones que están presentes en estos sistemas granulares y son persistentes incluso en estados estacionarios. La desviación estándar reproduce las diferencias observadas para los otros campos al comparar las series de datos de las partículas puntuales con los granos con volumen.

4.5.6. Comentarios generales acerca de los campos microscópicos

Los campos medidos con el esquema presentado en este trabajo presentan una gran estabilidad, los cambios son suaves y a pesar de que las celdas son parecidas al tamaño de los granos se puede medir promedios y desviaciones estables. Las diferencias con el esquema usual de partículas puntuales son notorias en la mayoría de los gráficos presentados.

Se identificaron zonas de comportamiento significativamente diferente: las zonas cercanas a las paredes con su velocidad horizontal y el sector central donde hay una mayor densidad de granos y una energía cinética menor, con sus estructuras locales. Sin embargo, no se tiene una definición precisa de estos sectores pues los campos (y sus promedios) presentan comportamientos continuos y no existen saltos discontinuos que nos puedan ayudar a esta caracterización.

La influencia en los campos de las paredes se hace patente en cada uno de los campos y hay una clara distinción entre ambas temperaturas características a las paredes. Con excepción del momentum en \hat{y} y las estructuras circulatorias localizadas observadas en el campo de velocidad, es posible analizar el sistema mirando los campos hidrodinámicos en cada celda según su altura, aunque su evolución para tiempos pequeños es ruidosa y con grandes cambios. Esto es predecible desde el análisis de las simetrías presentes en el sistema.

Dado que en todos los gráficos existe una dependencia de la altura resulta relevante pensar en que la definición de fluctuación [19] como la desviación de la medida local con respecto al promedio global podría estar incluyendo gradientes naturales en el sistema, pudiendo ser calculadas las fluctuaciones a partir de la desviación con respecto al promedio temporal local.

4.6. Ecuaciones de balance

Cada uno de los términos de las ecuaciones de balance para masa, momentum y energía puede ser calculado dentro de la simulación, por celda, en cada intervalo de tiempo de forma independiente de las demás. Gracias a esta propiedad es posible seguirlos en el tiempo.

Se incluirá en cada gráfico, de ser necesario, una curva para seguir al lado izquierdo de cada ecuación de balance microscópica, junto a la curva del término de mayor importancia, y valor,

del lado derecho y la suma de los restantes términos para ayudar al análisis. Se han usado como parámetros de esta sección: $T_1 = T_2 = 1$, $q_n = 0$.

4.6.1. Cálculo de error

Existen diversas formas de estudiar la convergencia del error numérico para asegurar que las ecuaciones, a pesar de la discretización, se cumplan. Se han definido tres funciones de error para dos series de A y B con s elementos cada uno:

$$Er(A, B) = \frac{1}{s} \sum_{n=1}^s |A_n - B_n| , \quad (4.7)$$

$$Er_2(A, B) = \frac{1}{s} \sum_{n=1}^s |A_n| - |B_n| , \quad (4.8)$$

$$ECM_{0,5}(A, B) = \sqrt{\frac{1}{s} \sum_{n=1}^s (A_n - B_n)^2} . \quad (4.9)$$

Las series A_n y B_n corresponderán al lado derecho e izquierdo de las ecuaciones de balance de los distintos campos. El primer y tercer error son típicos de los estudios de cálculo numérico. El segundo tiene un interés en este caso, dado que, de ser positivo o negativo consistentemente, se puede demostrar que una serie subestima a la otra. Cada uno de ellos tendrá un tipo de convergencia distinto, pero es un buen indicador observar que todos los tipos de error disminuyen cuando la serie de datos ha sido obtenida de una simulación con paso temporal dt cada vez menor.

Por cada paso temporal dt se ha tomado una serie de 10000 datos por cada celda y luego se promedia el error en todo el espacio, para permitir la comparación de distintos dt .

4.6.2. Balance de masa

Para medir los distintos términos de la ecuación (2.12) entre tiempos discretos se discretizan ambos lados entre t y $t + dt$ para obtener

$$\begin{aligned} \Delta\rho &= \left(\iint_{\text{celda}} \rho_{2D}(x, y, t + dt) dx dy - \iint_{\text{celda}} \rho_{2D}(x, y, t) dx dy \right) \\ &= \left(\sum_{i=1}^N \delta_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t + dt)) - \sum_{i=1}^N \delta_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) \right) , \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$-\nabla \cdot ((\rho)V) = dt \iint_{\text{celda}} \vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{2D}(x, y, t) dx dy = dt \sum_{i=1}^N \delta_i (\vec{v}_i(t) \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))) . \quad (4.11)$$

Ambos términos en principio son equivalentes, pero se ha realizado una aproximación para tiempos discretos, de modo que podría afectar los resultados. Se ha usado la discretización de Euler, que tiene un error de orden $\vartheta(dt)$ asociado a la discretización. Se miden ambos términos de forma independiente en la simulación dentro de una celda a media altura y se presentan los resultados en la figura 4.12.

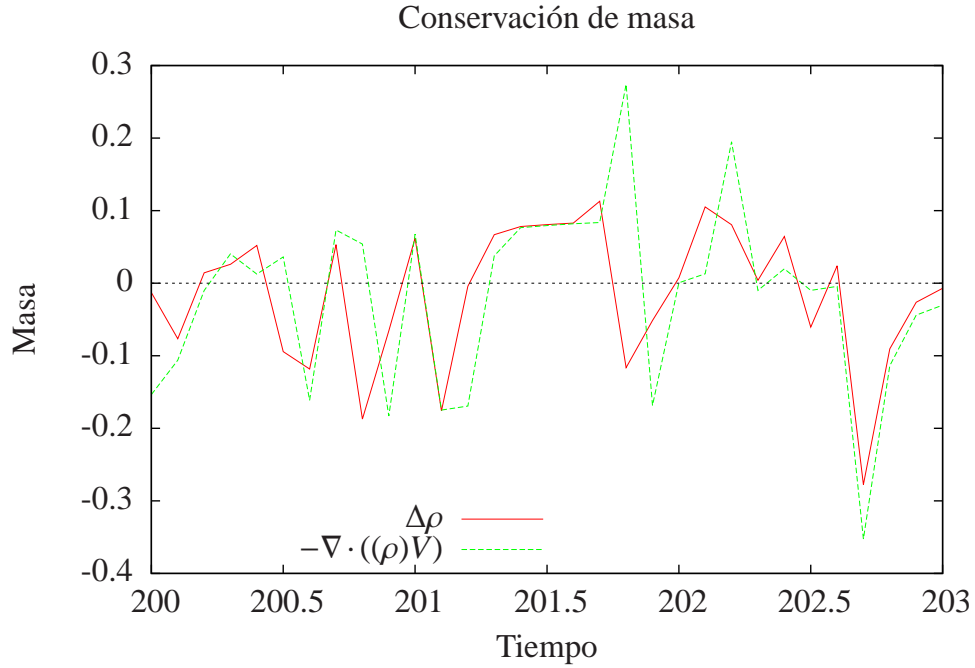


Figura 4.12: Errores en la ecuación de balance de masa para distintos instantes de tiempo en una celda a altura $y = \frac{L_y}{2}$.

En el gráfico se observa que el cambio de masa dentro de la celda (curva en rojo) es pequeño comparado con la masa de la celda (según figura 4.4(a) es del orden de $m \approx 0.9$) por lo que no es posible evacuar toda la masa en un solo intervalo de tiempo. Sobre el término de divergencia $-\nabla \cdot ((\rho)V)$ (curva en verde) se puede notar que no siempre coincide con el término del lado derecho, pero esto es esperable por el error numérico al discretizar el tiempo. Sin embargo, hay algunos máximos o mínimos en esta función que no coinciden con los del término derivada y pueden tener su origen en que la configuración de velocidades puede cambiar violentamente en una celda producto de múltiples choques entre discos en un intervalo corto de tiempo.

A pesar de ello, suena razonable afirmar que ambas curvas en la práctica son muy similares, estimando que una disminución del tamaño del intervalo de tiempo de medición dt puede también disminuir las diferencias entre ambas curvas. Esto se puede observar en el gráfico 4.13, donde el error Er es proporcional a dt . Es destacable también que el lado derecho de la ecuación de balance es sistemáticamente mayor que el lado izquierdo, dado que $Er_2 < 0$. A pesar de ello, se puede afirmar que la ecuación de balance de masa es exacta y la diferencia de las curvas en la figura 4.12 se debe a la discretización utilizada. El error cuadrático medio $ECM_{0,5}$ presenta una tendencia de orden $\vartheta(dt^2)$ y reafirma la idea de la convergencia entre ambos lados de la ecuación de balance. Este comportamiento general del error se verá repetido en las otras ecuaciones de balance presentadas.

4.6.3. Balance de momentum

Se debe usar un tratamiento similar al anterior para obtener una medición numérica de los términos de la ecuación de balance de momentum. Integrando la ecuación (2.17) entre los tiempos t y $t + dt$, para una celda que no esté adyacente a las paredes térmicas, se tiene:

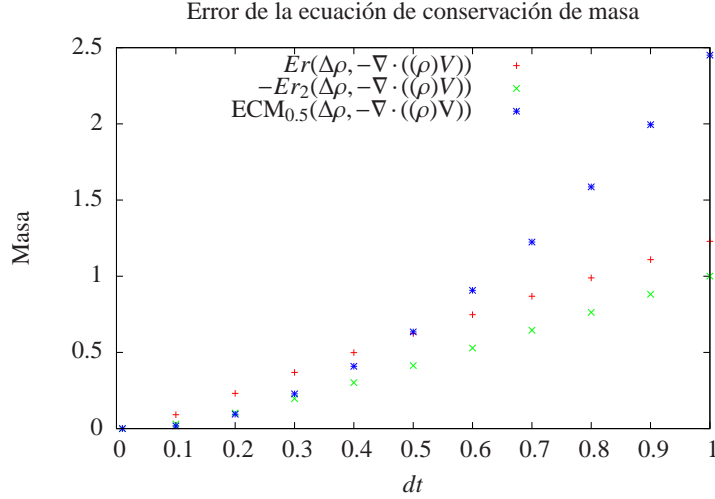


Figura 4.13: Balance de masa desglosado por término.

$$\Delta P_\alpha = \int_t^{t+dt} dt \iint_{\text{celda}} \frac{\partial}{\partial t} P_{2D,\alpha} dx dy \quad (4.12)$$

$$= \sum_{i=1}^N \delta_i (\vec{v}_i \cdot \hat{e}_\alpha) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t+dt)) - \sum_{i=1}^N \delta_i (\vec{v}_i \cdot \hat{e}_\alpha) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) , \quad (4.13)$$

$$-\nabla \cdot ((P_\alpha)V) = \int_t^{t+dt} dt \iint_{\text{celda}} -\vec{\nabla} \cdot ((P_{2D,\alpha})\vec{V}_{2D}) dx dy = dt \sum_{i,j=1}^N \delta_i (\vec{v}_i \cdot \hat{e}_\alpha) (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))) , \quad (4.14)$$

$$-(\nabla \cdot \mathbb{P}^a)_\alpha = \int_t^{t+dt} dt \iint_{\text{celda}} -(\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^a)_\alpha dx dy = \sum_{i,j=1}^N \delta_i (\Delta^{2D} \vec{v}_{i,j} \cdot \hat{e}_\alpha) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t^*)) . \quad (4.15)$$

Todos estos términos son vectoriales, y para mayor claridad se grafican ambas componentes de manera independiente. Los primeros dos elementos son similares en forma de medición a los discutidos en la sección anterior. Para el último término, $-(\nabla \cdot \mathbb{P}^a)_\alpha$ es necesario, en el momento del choque, evaluar el cambio de velocidad en ambos discos y asignarle cada cantidad calculada a las celdas en donde están distribuidas sus masas.

Se grafica cada término en el tiempo para una celda a altura media en las figuras 4.14 y 4.15 para las direcciones \hat{x} e \hat{y} respectivamente. La curva de color rojo corresponde a ΔP_α , verde a $-\nabla \cdot ((P_\alpha)V)$ y azul a $-(\nabla \cdot \mathbb{P}^a)_\alpha$.

Se puede notar en estos gráficos que el mayor promotor de cambio de momentum en estas celdas es el choque de discos, ya que da cuenta de la mayor parte de la forma que toma la curva roja. Nuevamente se observa que no hay una coincidencia exacta entre los cambios que se evidencian en el término relacionado a la divergencia y los que son reflejados en el término ΔP_α . Al parecer en esta escala de tiempo sigue siendo un buen predictor del cambio de momentum. Si junto a ello, y con algunas excepciones, se le suma el término restante se puede afirmar que se da cuenta del

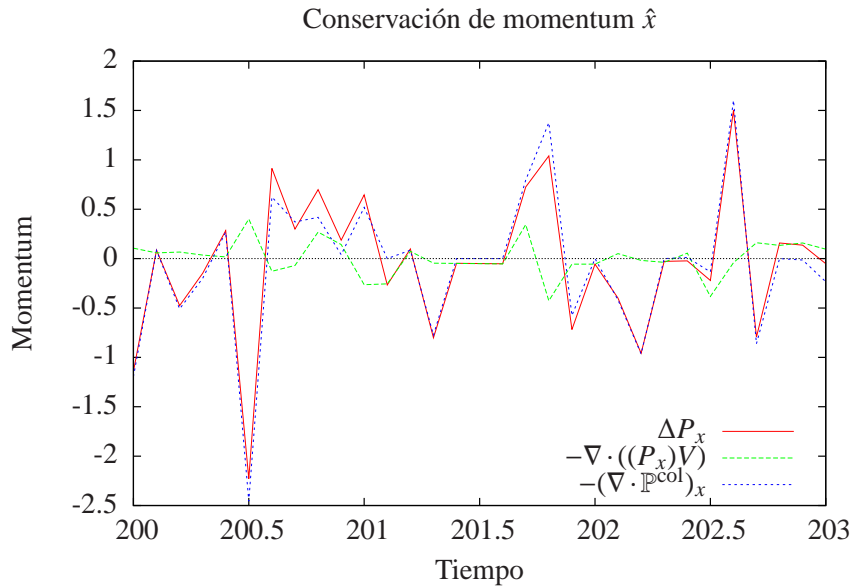


Figura 4.14: Balance de momentum \hat{x} desglosado por término en una celda a altura $y = \frac{L_y}{2}$.

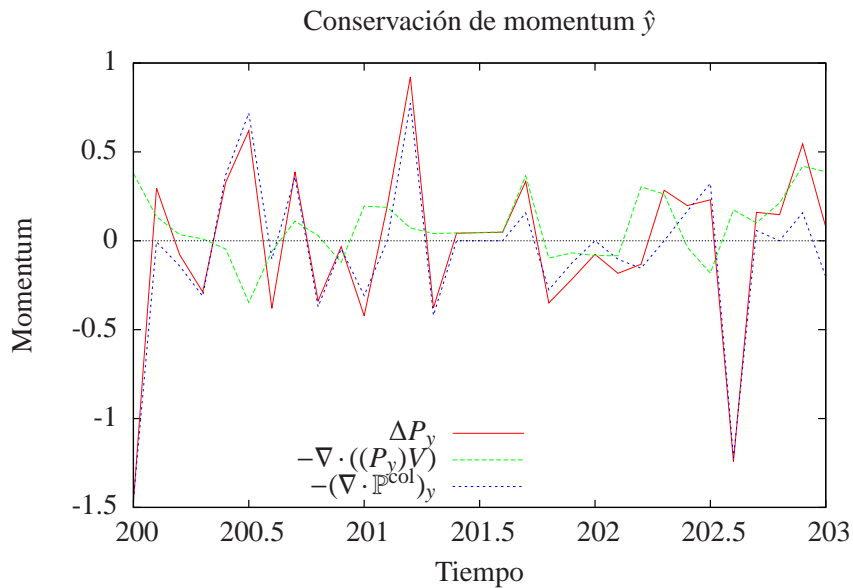


Figura 4.15: Balance de momentum \hat{y} desglosado por término en una celda a altura $y = \frac{L_y}{2}$.

cambio en su totalidad, validando la ecuación de balance usada.

El caso de las celdas junto a las paredes térmicas es interesante solo para el balance de momentum en la dirección \hat{y} , ya que los choques con las paredes no modifican la velocidad en la dirección normal a la pared, como se observa en (4.3). Se agrega en este caso un término especial al lado derecho de la ecuación de balance F_{P_y} y se combinan los términos restantes del lado derecho en una sola curva.

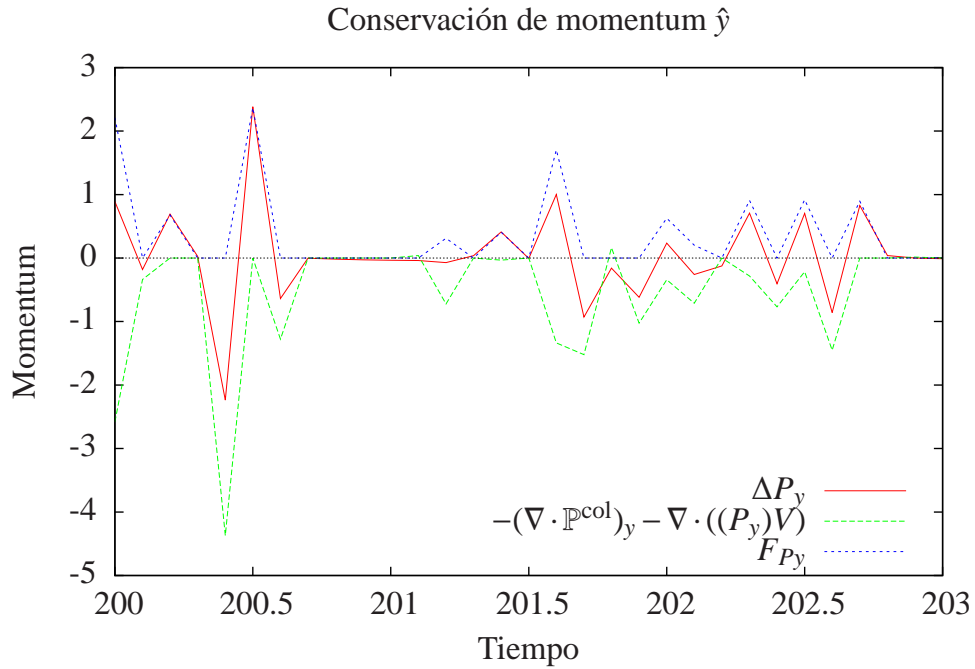


Figura 4.16: Balance de momentum \hat{y} desglosado por término en una celda adyacente a la pared térmica inferior. Se han usado las definiciones (4.13),(4.14),(4.15) y (4.3) respectivamente.

En la figura 4.16 se observa que el término de fuente, de color azul, es comparable en influencia al que proviene de los choques entre granos. Se destaca también que, aunque está valorado como ‘fuente’, puede eventualmente permitir la pérdida de momentum para alguno de los choques, aunque en promedio siempre generará una ganancia. Otra de las observaciones es que el término $-\nabla((P_\alpha)V)$ es pequeño en comparación con los otros, teniendo menos influencia total en los cambios ocurridos en la celda.

A su vez, se tienen intervalos de tiempo donde no hay cambio de momentum dentro de la celda. Es probable que dentro de ella no esté presente en ese momento ningún disco. A pesar de ello, la ecuación de momentum tiene validez y logra mostrar la evolución y sus causas desglosadas adecuadamente.

Se ha estudiado complementariamente el término de error, agrupando todos los términos del lado derecho de la ecuación (2.17) y se presentan los distintas formas de calcular el error en las figuras 4.17 para las direcciones x e y, respectivamente.

Se puede observar que el error Er en ambas direcciones decae linealmente con dt . El resto de los errores medidos decae también a cero a medida que se disminuye el tiempo de discretización, apoyando la idea de que la ecuación de balance de momentum es una representación exacta del cambio de momentum dentro de cada celda.

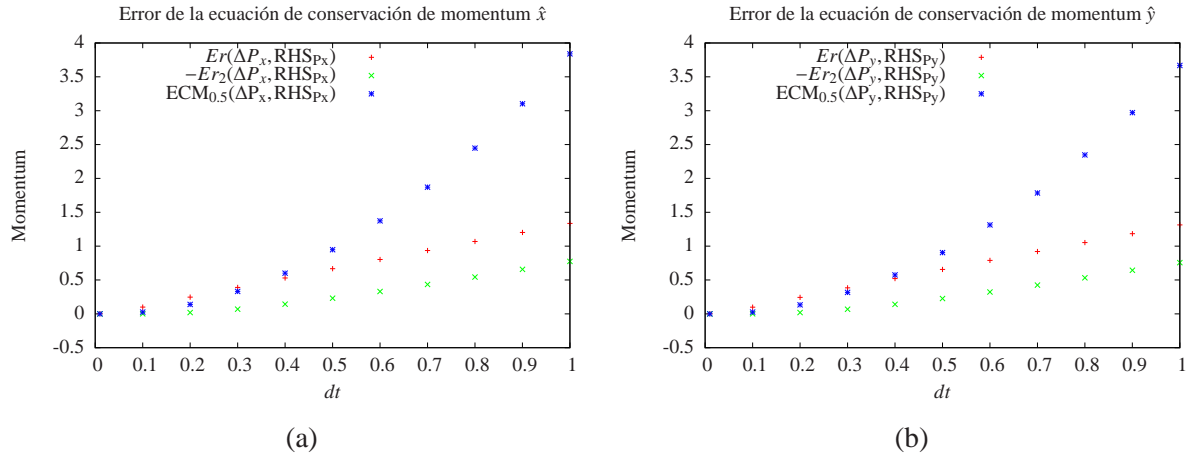


Figura 4.17: Error en la ecuación de balance de momentum por cada dirección. Se ha promediado cada error de cada celda en todo el espacio para distintos intervalos de discretización dt . (a) Error de la ecuación de balance de momentum \hat{x} . (b) Error de la ecuación de balance de momentum \hat{y} .

4.6.4. Balance de energía

Finalmente, en la simulación se midió la ecuación (2.25), donde cada término se calculó como sigue:

$$\Delta E = \int_t^{t+dt} dt \iint_{\text{celda}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{P_{2D}^2}{2\rho_{2D}} \right) dx dy = \sum_{i=1}^N \delta_i \vec{v}_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t+dt)) - \sum_{i=1}^N \delta_i \vec{v}_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)), \quad (4.16)$$

$$-\nabla \cdot ((E)V) = \int_t^{t+dt} dt \iint_{\text{celda}} -\vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{2D}^2}{2\rho_{2D}} \right) \vec{V}_{2D} \right) dx dy = dt \sum_{i,j=1}^N \frac{\delta_i (\vec{v}_i)^2}{2} (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))), \quad (4.17)$$

$$-V \cdot (\nabla \cdot \mathbb{P}^a) = \int_t^{t+dt} dt \iint_{\text{celda}} -\vec{V}_{2D} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^a) dx dy = \sum_{i,j=1}^N \delta_i \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i (\vec{v}_{i,j})^2}{2} \right) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t^*)). \quad (4.18)$$

Se presenta la medición en la simulación numérica en la figura 4.18. Los colores utilizados son análogos a los mostrados en los gráficos para momentum. En ella se observa que los cambios que ocurren sobre la energía en una celda a altura media se deben principalmente a los choques entre partículas, y el término de divergencia ($-\nabla \cdot ((E)V)$) aporta en menor medida a la evolución. Sin embargo, es posible, al igual que los campos anteriores, describir las razones por las que cambia la energía en cada momento.

Se deben analizar de forma especial las celdas adyacentes a las paredes, de modo de explicitar el término fuente F_E , en color negro en la figura 4.19.

Ecuación de conservación de energía por término en celda a altura media

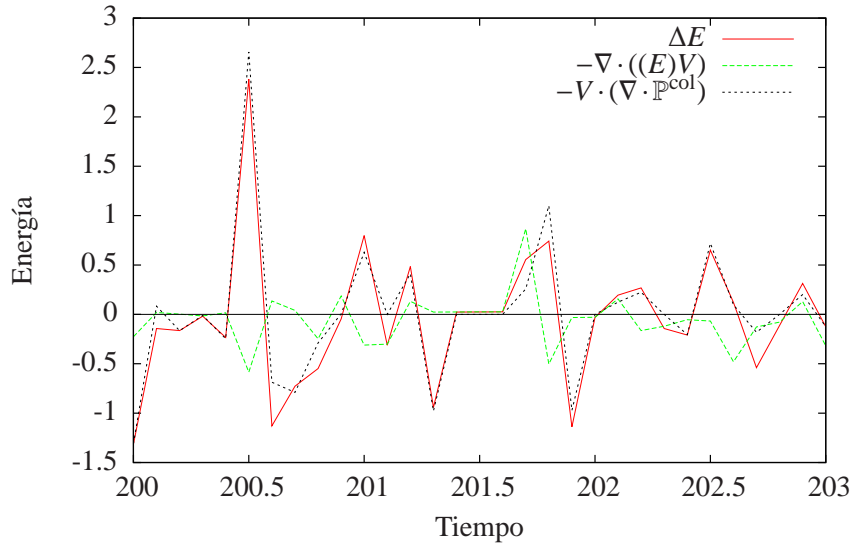


Figura 4.18: Términos de la ecuación de balance de energía medidos en una celda a altura media.

Ecuación de conservación de energía por término en celda junto a la pared inferior

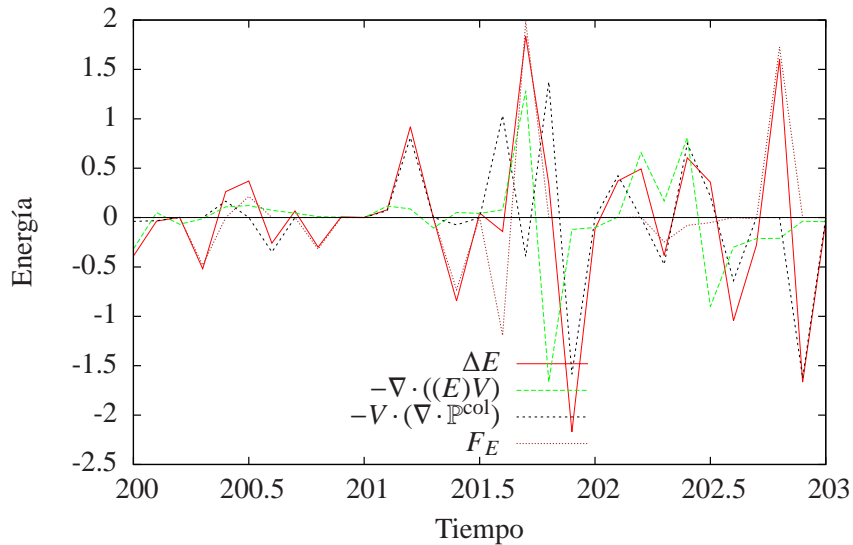


Figura 4.19: Términos de la ecuación de balance de energía medidos en una celda a altura adyacente a la pared inferior.

Se identifica la influencia de la pared en la energía dentro de la celda con los valores, en general, positivos de la curva de fuente. Son seguidos, en general por picos negativos donde la mayor influencia son los choques entre discos. De esta forma se propaga la energía rápidamente, sin esperar a que el disco viaje fuera de la celda. Resulta llamativo, nuevamente, que el término de divergencia cumple un papel menor en el balance.

Se muestra, finalmente, la figura 4.20 donde se muestra el error para cada paso temporal dt

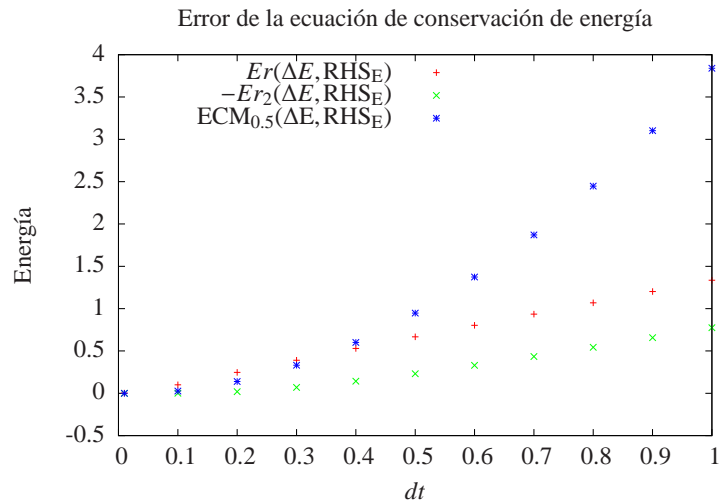


Figura 4.20: Balance de masa desglosado por término

utilizado. Se observa que la serie de error Er converge también linealmente con el paso temporal y que los otros errores convergen de la misma forma. La conclusión observada para Er_2 en el caso de la masa se mantiene, de modo que los términos de la mano derecha, en especial $-\nabla \cdot ((E)V)$ subestiman el cambio de energía dentro de la celda.

4.7. Temperatura en el sistema

A partir de las definiciones (2.33) y (2.39) se calcula la temperatura granular dentro de cada celda en distintos sistemas. En lo siguiente se omite el subíndice $2D$.

El sistema más sencillo en que se puede medir la temperatura consiste en considerar choques elásticos entre partículas, es decir $q = 0$. Este sistema ha sido estudiado con anterioridad a este trabajo y se ha observado que, en el estado estacionario, la temperatura depende linealmente de la distancia con las paredes.

En la figura 4.21(a) se ha impuesto que las paredes térmicas tengan la misma temperatura $T_1 = T_2 = 1$ y se ha medido por celda el valor de cada temperatura definida. Se puede observar que la temperatura $T^{(2)}$ se mantiene constante, con algunas fluctuaciones, con valores cercanos a 1, y en cambio la temperatura $T^{(1)}$ tiene todos sus valores menores a 0.5.

Es un resultado notable que $T^{(1)}$ no es constante cerca de las paredes donde hay una extraña caída en su valor. Este cambio se debe, a que por el efecto de borde de las paredes, no se puedan posicionar las partículas al otro lado de la pared y por tanto el promedio de la temperatura en ellas contiene en promedio menos partículas que en una celda a altura \hat{y} media, y por tanto el cálculo de la velocidad peculiar contiene un mayor error. Este problema no está presente en los resultados de $T^{(2)}$.

Considerando un sistema donde exista una diferencia entre las temperaturas de ambas paredes, como por ejemplo en la figura 4.21(b) con temperaturas $T_1 = 1$ y $T_2 = 5$, se observa que nuevamente

$T^{(2)}$ sigue los valores esperados para la temperatura del medio, es decir, depende linealmente de la posición. Esta vez existe una diferencia entre los valores de la temperatura en las paredes con los valores esperados al extrapolar la serie de datos cerca de las paredes. Esto es esperable dada la naturaleza del medio granular, que no puede ocupar todos los espacios disponibles cerca de ellas. La serie de valores de $T^{(1)}$ es nuevamente mucho menor que los valores esperados. Esta caída cerca de las paredes es un resultado conocido por la teoría cinética [29].

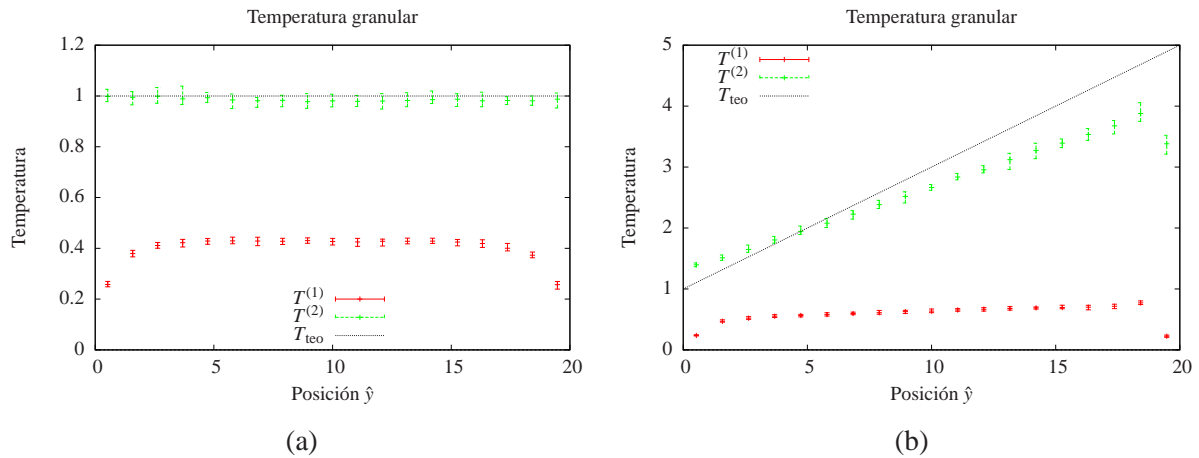


Figura 4.21: Temperatura granular para dos sistemas con choques elásticos, $q = 0$. Las paredes térmicas superior e inferior tienen temperaturas T_1 y T_2 , respectivamente. Se adjunta la curva de la temperatura esperada para este sistema a partir de la literatura T_{teo} . (a) Paredes con temperaturas $T_1 = T_2 = 1$. (b) Paredes con temperaturas $T_1 = 1$ y $T_2 = 5$.

Se ha observado a su vez que, en las celdas que no son adyacentes a las paredes, la temperatura $T^{(2)}$ coincide en la mayoría de los casos con la energía media por partícula. Todas estas razones son indicadores de que la temperatura $T^{(2)}$ es la que describe de mejor manera la temperatura local de agitación de los granos en el sistema.

Sin embargo, existe al menos un ejemplo en que ambas definiciones de temperatura entregan resultados similares. En la figura 4.22 se muestra la medición de ambas temperaturas para un sistema de mayor tamaño pero del mismo número de celdas. Tiene 80 diámetros de longitud de sus caras y está compuesto por 4800 discos encerrados entre dos paredes térmicas de temperatura distinta, $T_1 = 1$ y $T_2 = 5$ para las paredes inferior y superior, respectivamente, y un coeficiente de inelasticidad $q = 0$.

Se puede observar que ambas curvas siguen la forma esperada para la temperatura en el caso elástico, mostrada por la curva T^{teo} , dado que la inelasticidad es nula. El mayor número de discos dentro de la celda de medición genera al calcular la velocidad de la celda típica \vec{V}_{2D} sea un promedio entre muchas partículas, ponderadas por la fracción de masa presente en la celda, y no coincida con la velocidad de la única partícula en la celda. Esta distinción genera que la diferencia entre la velocidad de la celda y la velocidad de los discos sea no nula para muchos instantes de la medición y, por lo tanto, en (2.33) la sumatoria toma valores mayores en cada celda y más cercanos al valor esperado.

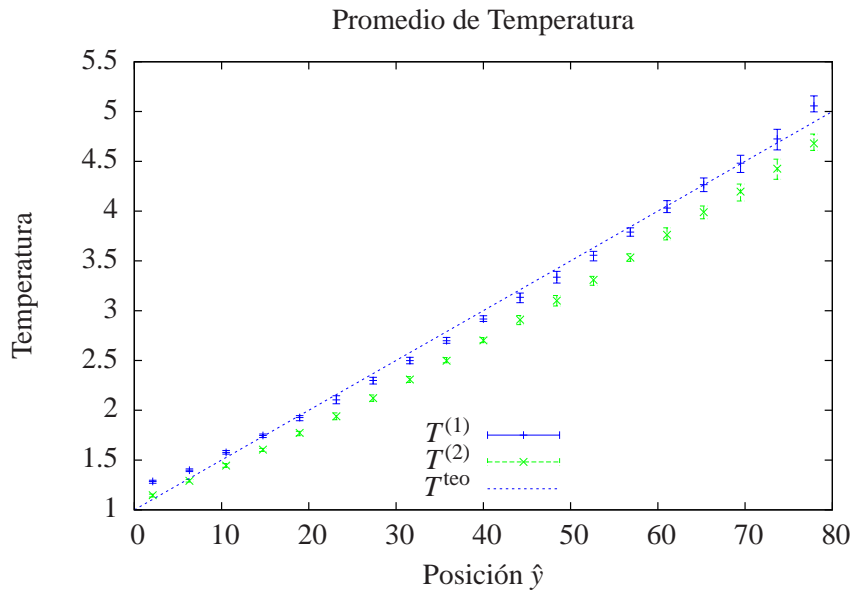


Figura 4.22: Temperatura por cada celda calculada promediando en el tiempo en el sistema con un tamaño 80×80 diámetros y 4800 partículas. Inelasticidad $q = 0$.

Se muestra un par de ejemplos de temperatura para sistemas de tamaño 20×20 diámetros, 300 partículas con temperatura $T_1 = T_2 = 1$ en las paredes y coeficientes de inelasticidad no pequeños. Se presenta en la figura 4.23 solo la temperatura $T^{(2)}$ pues es la que ha demostrado tener validez en todos los casos.

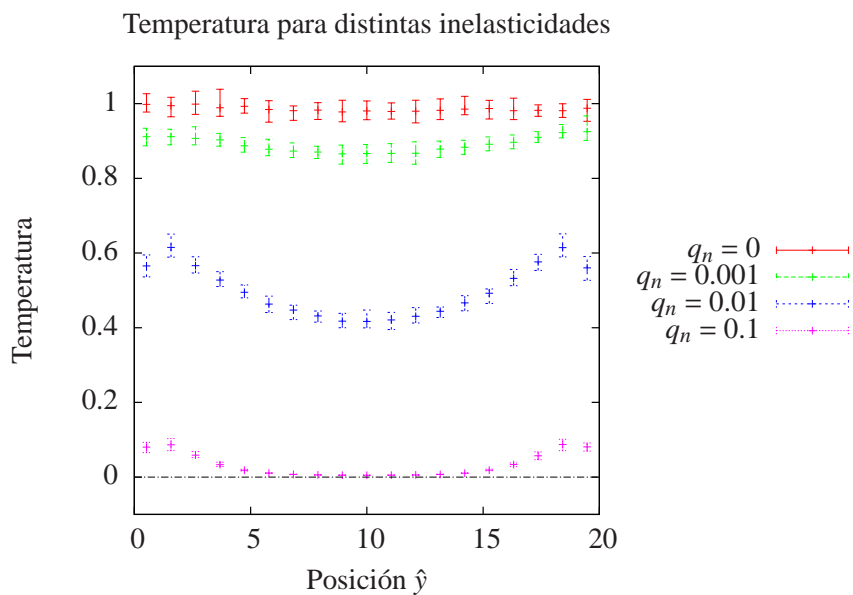


Figura 4.23: Temperatura $T^{(2)}$ por cada celda en distintos sistemas de igual tamaño pero con distinta inelasticidad de los choques entre partículas.

4.7.1. Flujo de calor

Se ha medido el flujo de calor a partir de la definición (3.15) en un sistema con paredes térmicas, de temperatura $T_1 = 1$ y $T_2 = 5$ para la pared inferior y superior, respectivamente, y un coeficiente de inelasticidad $q = 0.01$. Se presenta esta medición, junto al campo de temperatura promedio en cada celda como referencia, pues es usual relacionarlos, inicialmente, con la ley de Fourier para transferencia de calor $q = -\kappa\Delta T$, con κ la conductividad térmica (por ejemplo [8] y con correcciones en [19]).

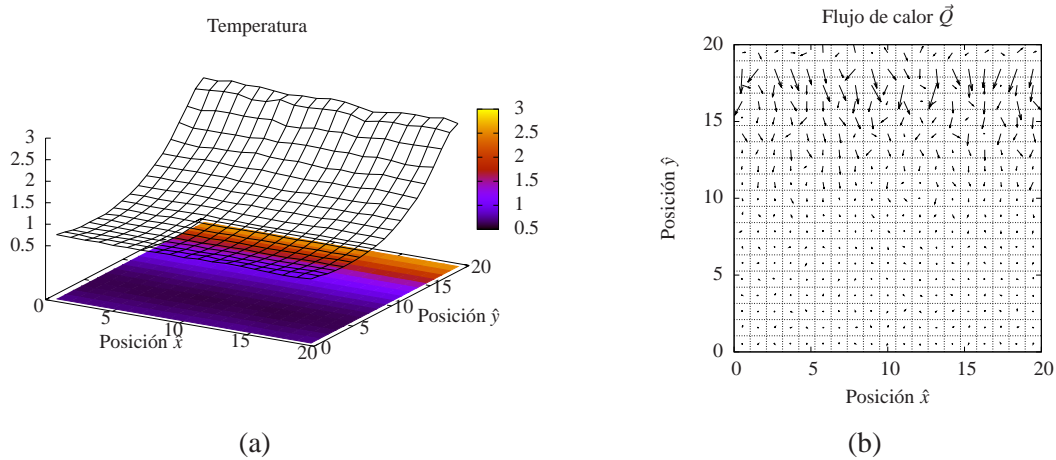


Figura 4.24: Medición del flujo de calor a partir de la definición (3.15). (a) Campo de temperatura local, como referencia. (b) Medición de ambas componentes del calor \vec{Q} promediadas por cada celda de medición, mostradas en forma vectorial.

En la figura 4.24 se puede observar que el flujo de calor sigue aproximadamente el gradiente de la temperatura observada en la figura (a). El flujo de calor observado es principalmente en la dirección \hat{y} y su mayor tamaño se encuentra junto a la pared más caliente, es decir la superior. Ambas características son esperables dada la simetría de traslación en la dirección \hat{x} y la diferencia de temperatura. Se observa también que junto a la pared fría el flujo de calor es pequeño pero alejándose de la pared, que se explica dado el hecho que la temperatura menor en el sistema no se encuentra junto a la pared inferior sino en las celdas cercanas a la posición $y = 5$. Algo similar ocurre cerca de la pared caliente, dada la dificultad de la medición en las celdas inmediatamente cercanas a ella por la baja densidad de granos.

Estas observaciones permiten afirmar que la medición directa del flujo de calor es posible, de modo de comprobar directamente, de forma local, si las relaciones constitutivas derivadas para el flujo de calor son válidas localmente en estos estados estacionarios fuera del equilibrio.

4.8. Tensor de presión

A partir de las definiciones de los tensores de presión colisional (3.7) y cinética (3.12) se pueden calcular por intervalos de tiempo cada elemento de cada tensor.

Dado que estas cantidades se han definido de una forma peculiar en este trabajo se presenta un gráfico representativo de la medición de la presión total \mathbb{P} para su componente xx para distintos tamaños de celda sobre el mismo sistema. Se presenta el valor medio del componente de la presión como se describe en las secciones 3.4.1 y 3.5.1, en particular en las definiciones para la presión colisional (3.10) y la presión cinética (3.12) respectivamente.

La medición se realizó en un sistema de tamaño $L_x = L_y = 20$ y con 300 discos, temperatura de las paredes es $T_1 = 1$ y $T_2 = 5$. El coeficiente de restitución es $q = 0$. Los resultados se presentan en la figura 4.25, y cada valor se ha asociado al centro geométrico de la celda.

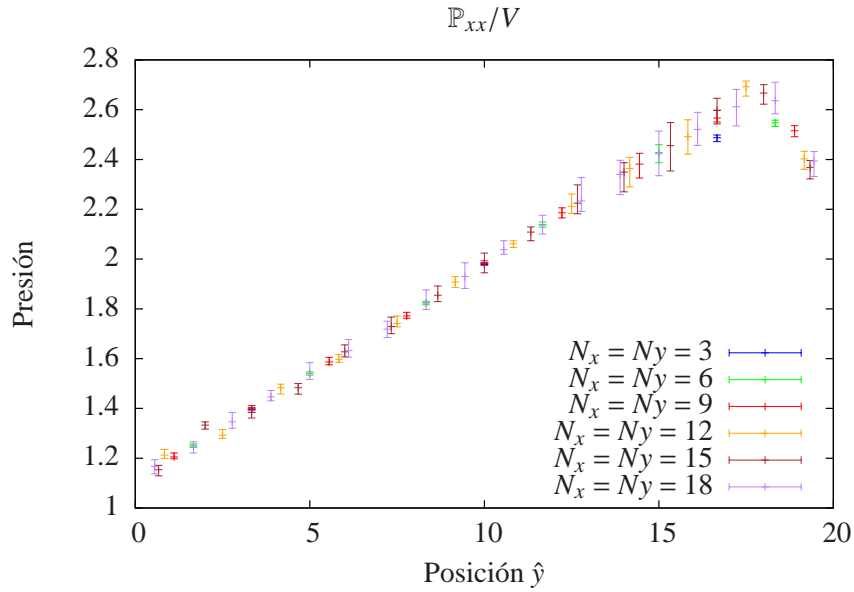


Figura 4.25: Promedio de \mathbb{P}_{xx} por celda, usando la definición (3.13), para distintos tamaños de celda en la misma instancia de simulación.

Se puede observar que los valores de la componente de la presión, a pesar de provenir de celdas con aristas de tamaños entre 6.67 ($N_x = N_y = 3$) y 1.11 ($N_x = N_y = 18$) parecen coincidir en una misma curva, que no es lineal y tiene una caída de sus valores junto a la pared superior, de temperatura mayor. La dispersión de los datos también aumenta con la temperatura, pero se mantienen similares para distintos tamaños de celda. Esta observación nos indica que el valor medio de la presión calculada es representativa de la presión dentro de la celda.

En lo sucesivo, se presentan las mediciones de los valores medios de los tensores de presión dentro de la celda de medición en un sistema con inelasticidad $q = 0.01$, temperatura de las paredes $T_1 = T_2 = 1$ sin cambiar el resto de los parámetros del sistema. Se muestran los valores con su promedio por cada altura de la celda, es decir, agrupando las celdas que tienen igual altura.

4.8.1. Tensores de presión colisional, cinético y total

Se ha medido el tensor de presión cinético junto al de presión colisional para describir el tensor de presión total. Se muestra en la figura 4.26 el resultado para los distintos componentes de ambos

tensores.

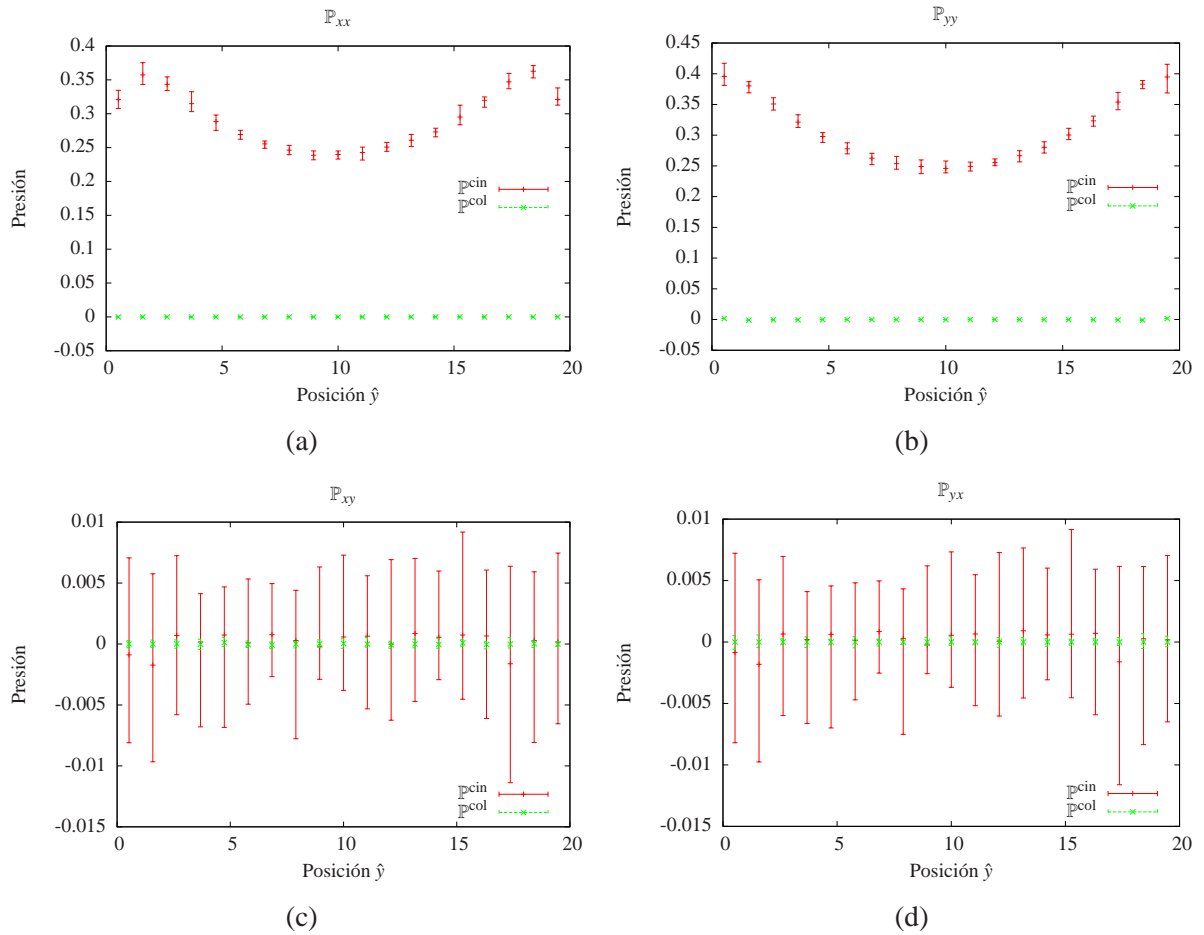


Figura 4.26: Promedio de medición de \mathbb{P}^{cin} y \mathbb{P}^{col} media dentro de celda. (a) Componente xx . (b) Componente xy . (c) Componente yx . (d) Componente yy .

En todos los gráficos se observa el tensor de presión colisional es menor en tamaño y rango al tensor de presión cinético. En particular, las componentes diagonales de este último muestran un comportamiento distinto a lo observado en las otras componentes: se puede distinguir una curva dependiente de la posición cuyos promedios son no nulos. La componente yy tiene un tamaño ligeramente superior a la componente xx . El resto de las componentes tiene promedio cercano a cero pero un rango de valores muy superior al compararlo con el tensor de presión colisional.

Se debe interpretar este resultado, pues las componentes diagonales del tensor de presión entregan mucha información del estado del sistema. Para ello se ha comparado con desarrollos teóricos previos aplicados a gases granulares (de baja densidad). Henderson [30] ha propuesto una ecuación de estado de la forma:

$$\frac{p}{nT} = H(\phi) , \quad (4.19)$$

donde n es la densidad de número local $n = N_{\text{Celda}}/V$, p es la presión escalar hidrodinámica usual que en sistemas granulares bidimensionales es $p = (\mathbb{P}_{xx} + \mathbb{P}_{yy})/2$ y H es el factor de compresibilidad

como función de la fracción de empaquetamiento o volumen ocupado por los granos:

$$H(\phi) = \frac{1 + a_H \phi^2}{(1 - \phi)^2}, \quad (4.20)$$

con $\phi = \pi n D^2 / 4$, $a_H \approx 1/8$ y D el diámetro de los granos en el sistema. Existen otras ecuaciones de estado para gases granulares, su comparación se presenta en [31], pero la ecuación de Henderson ha demostrado tener validez en gran rango de densidades de número n , incluso cercanas a la fracción de empaquetamiento [32]. Para todo el sistema la fracción de empaquetamiento es $\phi = 0.589$, pero puede ser mayor o menor localmente dependiendo del lugar observado.

Se muestra en la figura 4.27(a) el gráfico de la presión junto a $nT^{(2)}$. Se observa que ambas curvas tienen una forma similar a pesar de que la densidad de masa, y por ende de número, es distinta en cada altura. En la figura 4.27(b) se muestra la fracción $p/(nT^{(2)})$ junto a la función de Henderson $H(\phi)$ calculada a partir de la masa de cada celda.

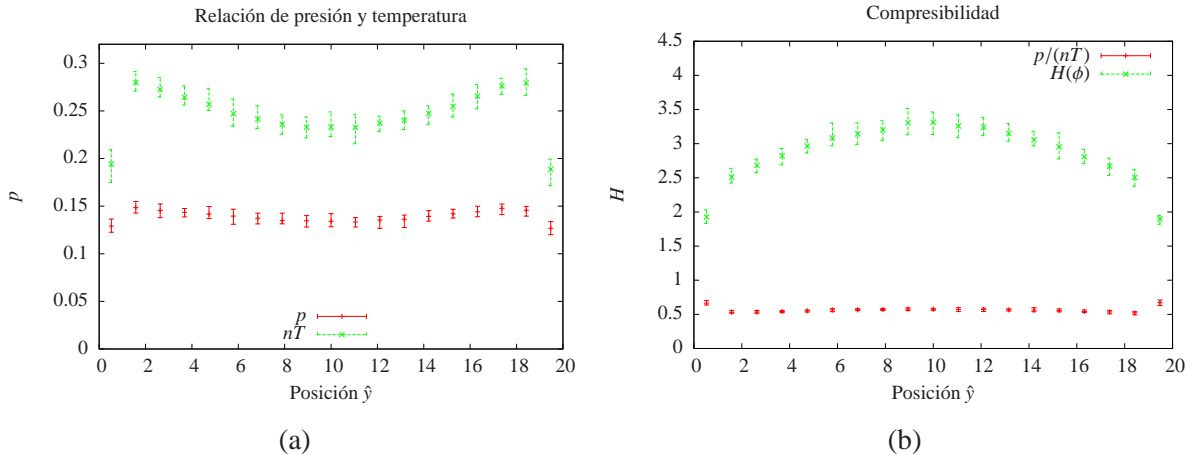


Figura 4.27: Comparación del resultado numérico de la presión con resultados teóricos previos. (a) Presión escalar numérica comparada con $nT^{(2)}$ medido en la simulación. (b) Fracción que compone el lado derecho de la ecuación de estado (4.19) predicha por Henderson y otros, medida numéricamente en la simulación y comparada con la función H , que compone el lado derecho de la ecuación de estado (4.19), y depende de la fracción de volumen local ϕ .

Este resultado sin duda parece extraño y la diferencia entre la teoría y la medición numérica presentada en este trabajo mostrada en la figura 4.27 es muy grande. Esta discrepancia podría tener múltiples fuentes. Se discutirán a fondo esta problemática en el capítulo 8.

Esta diferencia reafirma la necesidad de tener un formalismo sólido y medir de forma independiente cada una de las cantidades definidas para el sistema granular de modo de comparar las ideas surgidas de la teoría cinética y otras fuentes con sistemas lo más cercano a un medio granular real para comparar las ecuaciones de estado propuestas. Estos resultados deben ser observados con un mayor detalle del que ha permitido este trabajo para obtener conclusiones más profundas con respecto a los sistemas granulares.

4.8.2. Cálculo de la viscosidad de cizalle η

Se ha utilizado un sistema con temperatura de las paredes $T_1 = T_2 = 1$ y coeficiente de inelasticidad $q = 0.01$. En este trabajo fue calculada la viscosidad de cizalle de múltiples maneras. Se espera que esta sea una constante que podría en principio depender de factores como energía o densidad local. Por argumentos de simetría de traslación en la dirección \hat{x} , y dado que los promedios de las cantidades microscópicas son estables, dependería en este sistema de la posición \hat{y} . Se calcula la viscosidad según las definiciones η_{D_1} (3.23), η_{D_2} (3.24) y η_{GK} (3.29) explicitadas en el capítulo anterior en cada una de las celdas de medición de manera independiente, y se grafica cada resultado en función de la dirección vertical. Como definición de temperatura se utilizó $T^{(2)}$ (2.32).

Cada una de las definiciones mostradas se comporta bien numéricamente, es decir, al aumentar el número de intervalos de medición la dispersión de los valores de la viscosidad también disminuye, con lo que se asocia un error de cálculo numérico menor, y son consistentes en los valores promediados en la dirección \hat{x} que es cercano a cero en la mayoría de los casos. Esta observación será patente en las figuras siguientes. Para comparar la validez de cada definición se examina el mismo número de intervalos de tiempo comparados, promediados o integrados según cada caso, para luego ser graficados. En este caso se usaron 10000 intervalos de medición, con un paso temporal $\Delta t = 0.1$.

Usando las definiciones directas (3.23) y (3.24) se obtiene la figura 4.28 para el promedio temporal de esta medición, y donde los extremos de las barras de error corresponden a los valores máximos y mínimos de los promedios para cada altura y . Se observa que hay una gran rango dispersión de los datos.

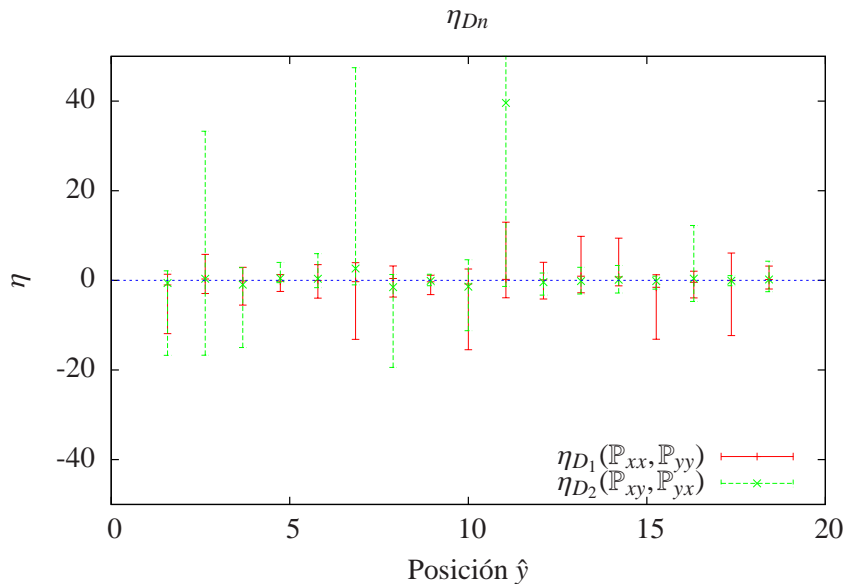


Figura 4.28: Medición de η_{D_1} y η_{D_2} utilizando el tensor de presión total \mathbb{P} promediados en el tiempo.

La primera reflexión inmediata es que para algunas celdas de medición el promedio de la viscosidad es negativo, aunque la definición de η es siempre no negativa. Esto no es un problema, pues

como se asegura que con un número mayor de intervalos de medición los promedios convergen, hay menos posibilidades de que sea negativo. El caso crítico ocurre si $\eta = 0$, entonces es esperable que la mitad de los datos sean negativos o positivos, teniendo una distribución alrededor del cero debido a errores numéricos. Si η es cercano a cero, este resultado podría dar paso a un número mínimo de intervalos de medición temporal a incluir de modo que la dispersión sea menor que el valor real de la viscosidad y por ende todos los valores por celda sean positivos. Por estas razones los valores locales negativos son aceptables en principio.

Otra observación a partir de la figura 4.28 es que ambas definiciones, a pesar de mostrar algunas diferencias entre los resultados de cada celda calculada no muestran gran diferencia. η_{D_1} parece marginalmente mejor que η_{D_2} , pero hay alturas donde esta observación se invierte, por lo que no es posible establecer una mejoría por usar una por sobre otra. En cualquier caso, parece ser que estas definiciones son las que peor se comportan en relación con la dispersión para todo el conjunto de instancias de la simulación estudiados.

En la figura 4.29 se grafica η_{GK} según la formulación sesgada (3.28) de Green-Kubo (3.29). Como la definición necesita de un componente no diagonal del tensor de presión, se calcula el mismo valor para las componentes del tensor de presión total \mathbb{P}_{xy} y \mathbb{P}_{yx} de forma independiente.

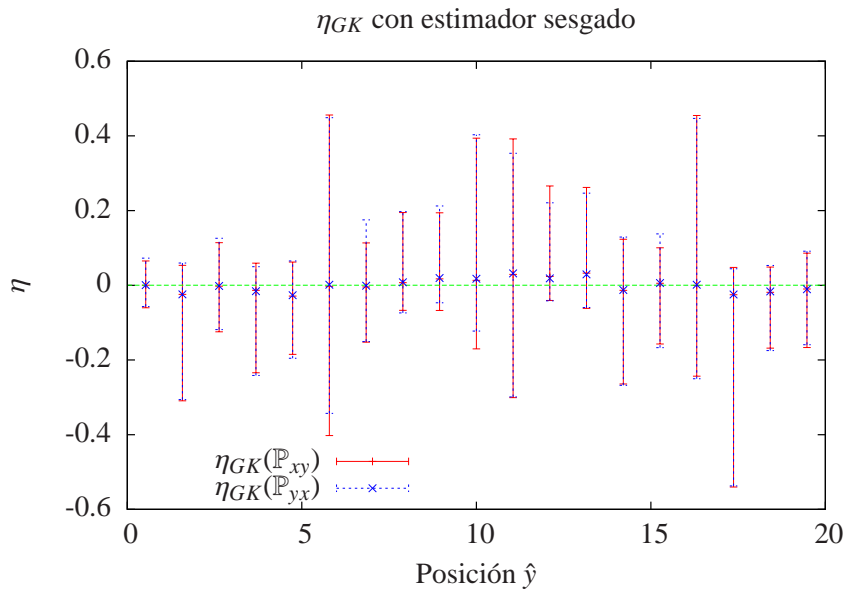


Figura 4.29: Medición de η_{GK} para el estimador sesgado (3.28) con los distintos componentes de \mathbb{P} .

Se puede observar que, en comparación con la figura 4.28, se mejoró la dispersión en varios órdenes de magnitud. Dada la naturaleza del cálculo se obtienen los valores para las celdas junto a las paredes superior e inferior, siendo no alcanzable para el caso de la figura anterior (dada la necesidad de calcular las derivadas de la velocidad al menos una serie de celdas no tendría valores de la derivada).

A pesar de que con los componentes yx y xy del tensor de presión tienen comportamientos similares, mostradas en la figuras B.2(b) y B.2(c), el coeficiente η_{GK} calculado a partir de ellas no es idéntico. Se observan diferencias no menores en los extremos del intervalo, por lo que no es posible poner una de ellas por sobre la otra, a pesar de que intuitivamente, dado que los gradientes de temperatura en el sistema se generan en la dirección \hat{y} por la diferencia en la temperatura de las paredes, la componente yx del tensor de presión podría tener mayor importancia en el cizalle de la celda.

La figura 4.30, muestra el comportamiento de la viscosidad calculada según la definición (3.29) usando el estimador insesgado (3.27).

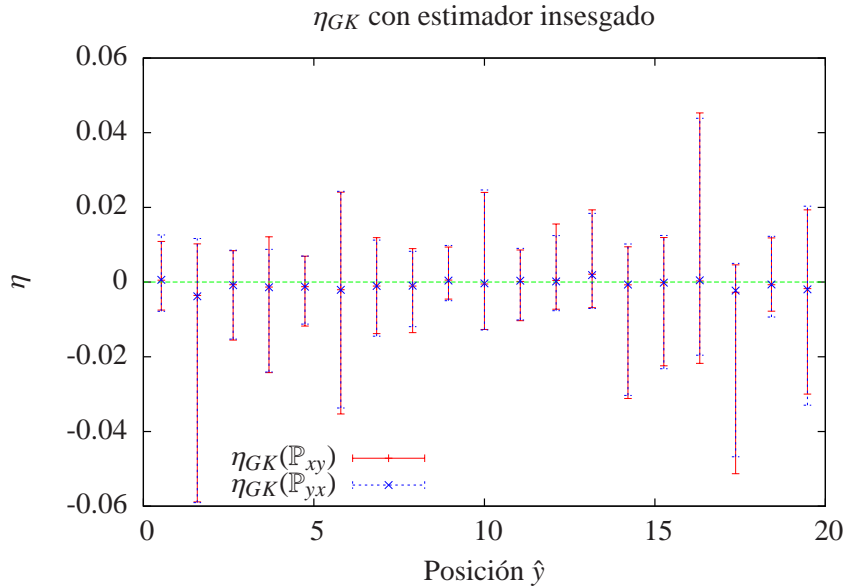


Figura 4.30: Medición de η_{GK} usando el estimador insesgado (3.27) y distintos componentes de \mathbb{P} .

Es evidente que se ha ganado un nuevo orden de magnitud en la dispersión de los datos, de modo que esta forma de medir en la simulación la viscosidad parece la más adecuada. Se destaca que el cálculo de η se hizo ‘a posteriori’, una vez se tienen todos los datos del tensor de presión. Hacerlo en conjunto con los procesos de la simulación obliga a ocupar un volumen no menor de memoria y a tener definido ‘a priori’ el tiempo de correlación máximo a incluir. En la práctica esto significa reemplazar en la ecuación (3.29) el término κN_t por un tiempo máximo t_{\max} como parámetro a la simulación.

Si bien la viscosidad de cizalle es definida positiva en las ecuaciones de Navier-Stokes, existen sistemas donde la viscosidad puede interpretarse como negativa [33]. No es el caso de estos sistemas granulares, y por tanto no son esperables los valores negativos desde el punto de vista físico. La razón de que se observen estos valores cercanos a cero son los valores pequeños observados para las componentes del tensor de presión fuera de la diagonal. Se discuten el origen de este resultado y posibles modificaciones en el capítulo 8.

Todos estos resultados se comparan entonces con la teoría. Se ha propuesto [34] que el coeficiente de viscosidad de cizalle para el caso de discos duros es:

$$\eta_{2D} = \frac{1}{2D} \sqrt{\frac{mT}{\pi}}. \quad (4.21)$$

Este valor calculado en el sistema con el valor local de la temperatura $T^{(2)}$ permite obtener la figura 4.31. Se espera entonces que la viscosidad tenga un valor no nulo y de un orden distinto al obtenido al calcular η_{GK} con el estimador insesgado. Esta diferencia puede deberse a que los valores del tensor de presión fuera de la diagonal son en promedio pequeños pero oscilan en una gran cantidad alrededor del cero. Esto genera una autocorrelación de estos componentes altamente fluctuante y la viscosidad generada es nula o muy pequeña.

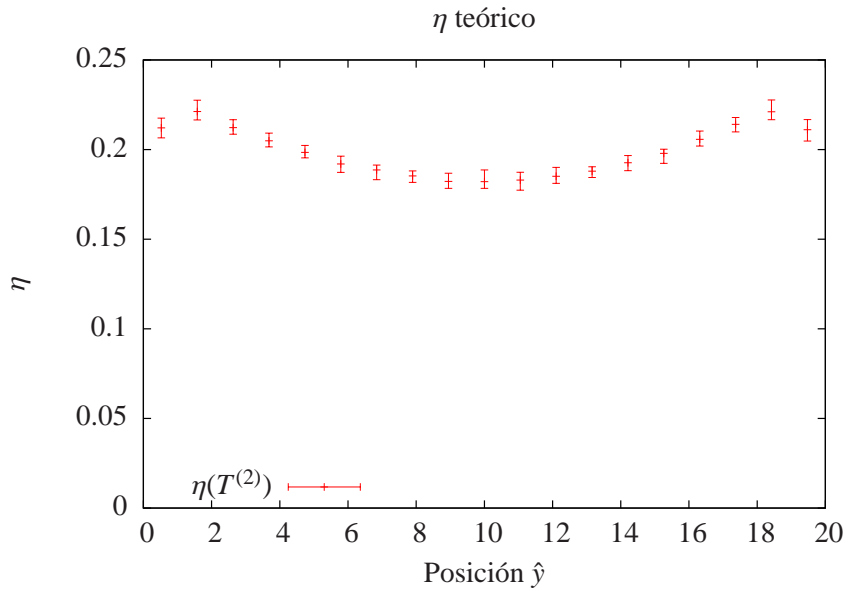


Figura 4.31: Estimación de η usando como referencia la temperatura local (4.21).

Se debe por tanto, mejorar la medición del tensor de presión, en especial del tensor de presión colisional. De esta forma se podría comparar el formalismo teórico con la metodología propuesta en este trabajo.

4.9. Resumen del capítulo

Se ha establecido la utilidad de la descripción de granos con volumen en el análisis del centro de masa en un sistema con condiciones de borde periódicas. Se ha mostrado la utilidad del estudio de los campos de densidad, momentum y energía en el sistema propuesto para obtener las características locales de estos campos, en particular se observó la inhomogeneidad en el campo de velocidades y la diferencia significativa en la desviación estándar para todos los campos locales medidos en el tiempo.

Se estudió la validez de las ecuaciones de balance para el sistema mostrado verificando la descripción separada de cada término para dar cuenta del cambio de cada cantidad estudiada en cada celda en todo momento junto al error numérico debido a la discretización temporal de Euler. Esto reafirma la idea de que las ecuaciones de balance están bien formuladas y son útiles para describir el sistema granular fluidizado.

Se ha mostrado la capacidad de medir la temperatura granular incluso cuando se observa dentro de celdas pequeñas. Las dos definiciones propuestas en el capítulo 2 demostraron tener comportamiento distinto, donde la definición $T^{(2)}$ ha probado mayor fiabilidad en la mayoría de los casos. Cuando el número de granos dentro de la celda es considerable, entonces ambas definiciones entregan resultados similares.

Finalmente se calculó e hizo uso de los tensores de presión para calcular el coeficiente de viscosidad de cizalle de modo de encontrar la mejor definición entre las propuestas en el capítulo 3. Se seleccionó como la mejor opción a la definición obtenida de la deducción de Green-Kubo para un estimador insesgado sobre el tensor de presión total \mathbb{P} . Se hace hincapié en la necesidad de mejorar las mediciones del tensor de presión colisional (3.7), pues la presión total escalar difiere en gran medida de la presión obtenida a través de la teoría cinética y otros resultados previos válidos. Para comprobar la validez de la formulación de Green-Kubo utilizando la presión definida es necesario un mayor número de pruebas. Esta discusión se extiende en el capítulo 8.

Capítulo 5

Sistema bidimensional con pocas partículas

5.1. Sumario

En este capítulo se utilizará el formalismo desarrollado en los capítulos 2 y 3 de este trabajo para analizar un sistema de tamaño muy reducido pero con condiciones de borde similares a las del capítulo anterior. No se utilizará la totalidad de las mediciones sino las que han sido mostradas como útiles hasta ahora, eliminando las redundancias de múltiples definiciones.

5.2. Introducción

El método desarrollado en los primeros capítulos no tiene como consideraciones aproximaciones en la cantidad de granos o el tamaño del sistema. Es por ello que se intentará llevar al extremo las definiciones de los campos hidrodinámicos y sus ecuaciones de balance para comprobar su utilidad cuando los cambios que ocurren dentro del sistema son rápidos y de gran tamaño.

El sistema es de tamaño tal que la energía solo necesitará un par de choques entre discos para trasladarse de un lado a otro del sistema. Esto a su vez implica que ambas paredes térmicas a diferente temperatura transmiten su energía con un menor número de colisiones entre granos y dentro del sistema no hay suficientes granos como para conformar la aglomeración de granos observada en el capítulo anterior a altura media.

5.3. El sistema a analizar

La caja que contiene los granos tiene como dimensiones $L_x = L_y = 4$ y en ella se pondrán 12 discos circulares de diámetro $2R = 1$. Las paredes verticales tienen condiciones de borde periódicas, la pared superior e inferior son térmicas con temperaturas $T_1 = 1$ y $T_2 = 2$, respectivamente. El espacio dentro de la caja se divide en 9 celdas de medición, mostradas en la figura 5.1 con líneas segmentadas. En la figura se incluye también una configuración del sistema con sus discos y la velocidad de cada uno.

Las mediciones se realizaron con intervalos de tiempo $dt = 0.01$ entre $t_i = 100$ y $t_f = 1100$. La razón de escoger un intervalo de tiempo menor al usado en el capítulo anterior responde a que al haber menos partículas en el sistema las transferencias de cantidades se realizan en un intervalo

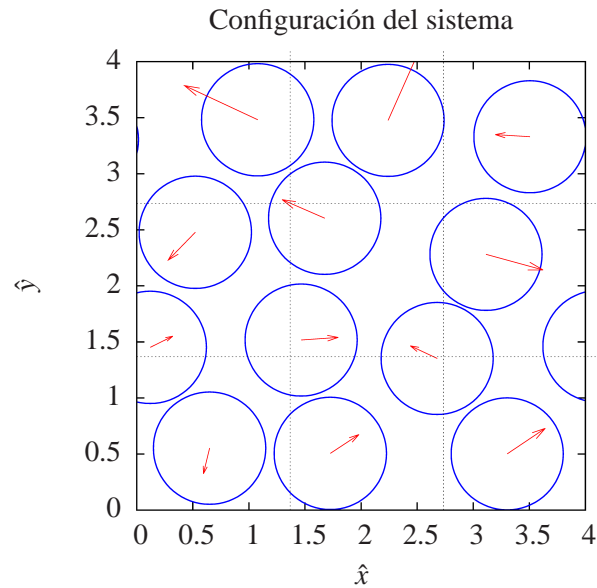


Figura 5.1: Configuración del sistema con pocas partículas en un tiempo t . El vector representa la velocidad de cada disco. Las líneas punteadas marcan los contornos de las celdas de medición.

menor de tiempo.

Otros datos del sistema:

- Fracción de volumen ocupada $\phi = 0.589$
- Coeficiente de inelasticidad $q_n = 0.01$ (coeficiente de restitución $\alpha = 0.98$)
- Gravedad nula $\vec{g} = 0$

No se discutirá en detalle cada uno de los gráficos mostrados en el capítulo anterior, pero se incluirá una muestra de la efectividad del método en sus partes más importantes.

5.3.1. Sobre los gráficos

En este capítulo se utilizan gráficos similares a los presentados en el capítulo anterior, con la salvedad de los gráficos de todo el sistema. En este caso, dado que el sistema tiene un número reducido de celdas, se presentan los datos de cada celda en el gráfico como un punto, aunque se mantiene la agrupación de ellos por su posición en la dirección \hat{y} .

5.4. Promedio de campos microscópicos

Los campos descritos por las ecuaciones (2.4), (2.5) y (2.6) se grafican en la figura 5.2 medidos en cada celda independientemente y promediados en el tiempo.

Es posible observar características similares a las vistas en caso de mayor dimensión donde, por ejemplo, la masa tiene un máximo en el centro de la celda y mínimos en sus extremos, siendo el

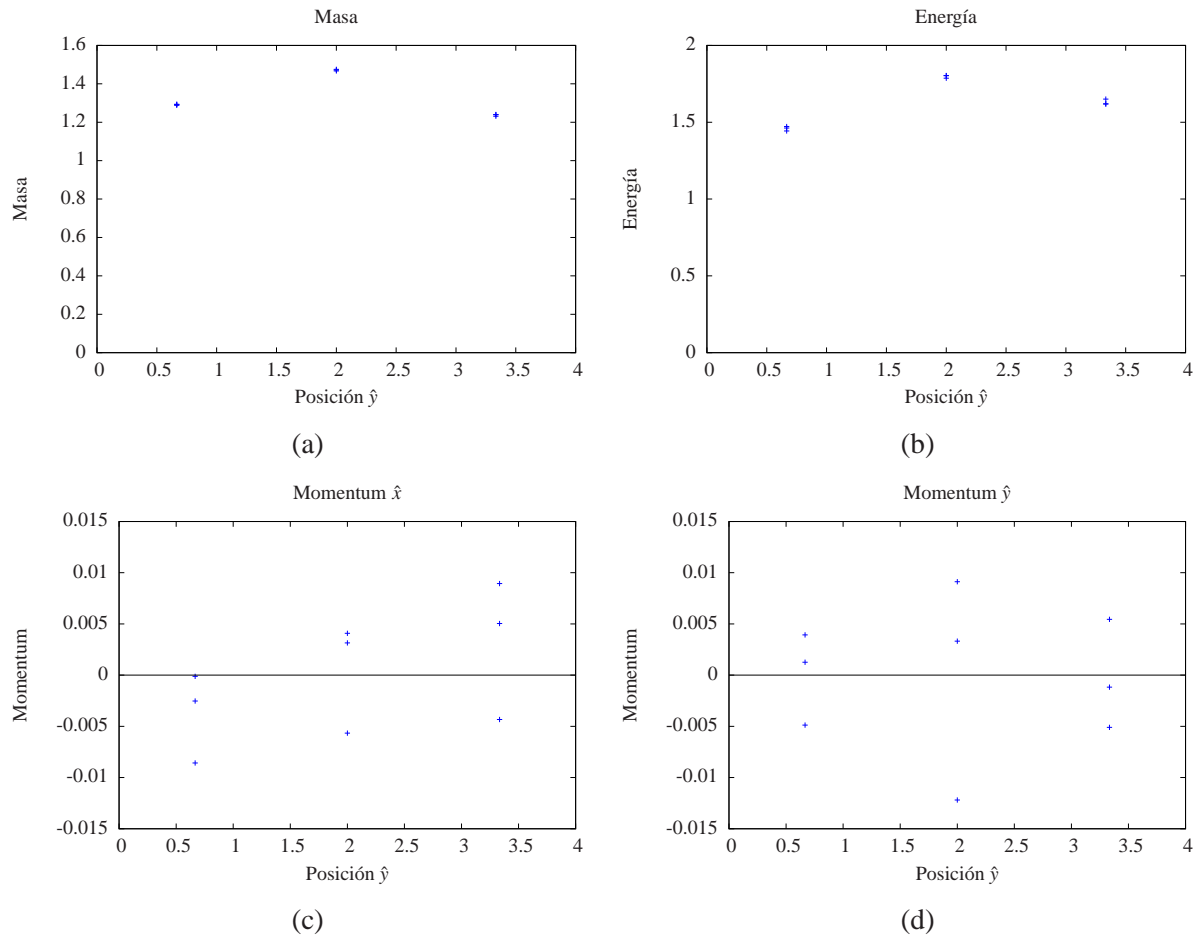


Figura 5.2: Campos medidos en cada celda y promediados en el tiempo. (a) Masa. (b) Energía. (c) Momentum \hat{x} . (d) Momentum \hat{y} .

extremo superior el que presenta menor masa comparado con el inferior. Es importante notar que en este caso la máxima masa alcanzable por una celda corresponde a $M_{\Delta} = 2.05$ dado que la celda tiene mayor tamaño, pero el valor promedio no se acerca a este número.

Con respecto a la energía cinética se destaca una diferencia sustancial con el capítulo anterior, donde presenta un máximo en el centro de la celda. Esto corresponde a que no hay suficientes granos para formar la aglomeración central y la celda de medición está junto a ambas paredes, de modo que no es posible diferenciar estos efectos a esta escala.

A su vez, el momentum en ambas direcciones presenta un tamaño pequeño y sus valores están distribuidos alrededor del cero. Un gráfico vectorial del campo de velocidad se adjunta en la figura siguiente, aunque no es posible obtener una mayor información de él acerca de posibles rollos convectivos.

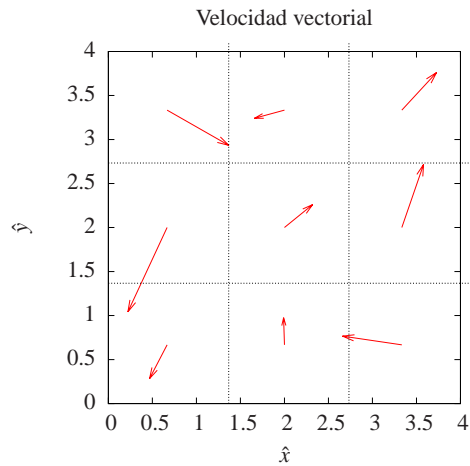


Figura 5.3: Campo de velocidad vectorial relacionado con cada celda de medición.

5.5. Ecuaciones de balance

Se presentan a continuación las ecuaciones de balance para masa, energía y momentum desglosadas según las definiciones (2.8), (2.24) y (2.16), respectivamente. Cada una de estas cantidades se midió en el tiempo $t \in [200 : 200.5]$ en la celda central del sistema. Se grafican en la figura 5.4.

En el gráfico 5.4(a) se observa que el término $-\vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{2D}$ es un buen predictor del cambio local de masa que experimenta la celda. Existe una gran concordancia entre ambas curvas para esta escala temporal de medición.

En el resto de las figuras se observan características comunes: los eventos de cambios importantes corresponden a choques, el término relacionado a la divergencia es de tamaño menor a los otros términos en general. Dado que los choques ocurren instantáneamente los máximos y mínimos locales de las curvas relacionadas con la derivada temporal son agudas.

Finalmente, las ecuaciones se sostienen en esta escala y en este sistema sin mayor problema. Se ha observado que el comportamiento del error sigue el mismo patrón observado en el capítulo anterior, es decir, el error disminuye proporcionalmente con el intervalo de tiempo de medición.

5.6. Temperatura granular

Se muestra en la figura 5.5 la medición de la temperatura granular $T^{(2)}$ (2.39) en cada celda. Se puede observar que la temperatura se encuentra entre los valores de las paredes, pero con valores más cercanos a la temperatura menor ($T_1 = 1$). Es esperable que este valor no corresponda de forma exacta a lo esperado, una tendencia lineal entre ambas paredes, dada la inelasticidad no nula en el sistema y la baja cantidad de granos dentro de la caja. En definitiva, es una buena medición dadas las condiciones del problema.

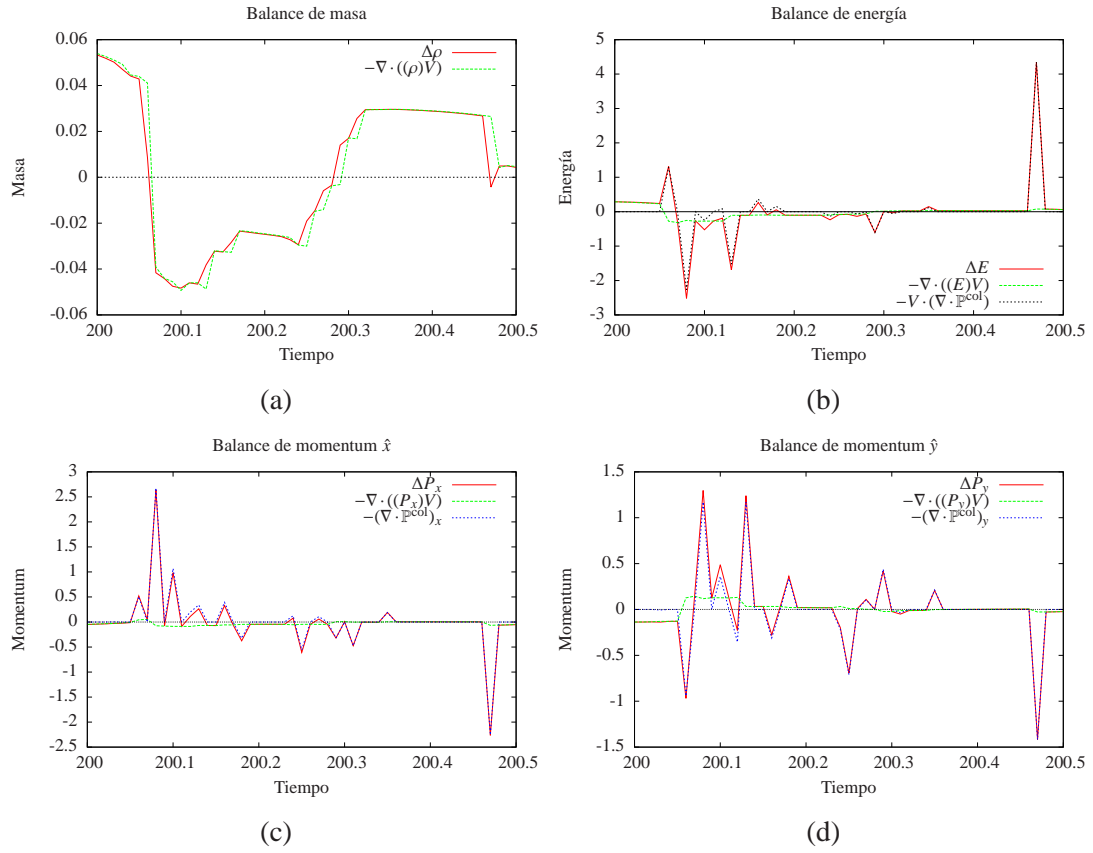


Figura 5.4: Ecuaciones de balance por término calculadas en una celda central a altura media. (a) Balance de masa. (b) Balance de energía. (c) Balance de momentum \hat{x} . (d) Balance de momentum \hat{y} .

5.7. Tensor de presión

Se muestra en la figura 5.6 el promedio de la medición de cada componente de los tensores colisional (3.5) y cinético (3.12) medido en el sistema antes señalado. Se observa nuevamente que las componentes cinéticas tienen una mayor importancia que las componentes colisionales, de modo que el tensor de presión total seguirá los valores del tensor de presión cinética.

Los componentes fuera de la diagonal muestran nuevamente un comportamiento cercano a cero, de modo que se espera un coeficiente de viscosidad de cizalle pequeño. Usando estos valores se ha comparado en la figura 5.7(a) a la presión escalar p con la temperatura granular $T^{(2)}$. Se puede observar que sus valores nuevamente son similares.

En la figura 5.7(b) se observa la fracción de sus valores junto al valor esperado por el formalismo de Henderson [30]. El valor teórico ha sido dividido por 100 dado que la densidad de número n está cerca del valor correspondiente a la fracción de empaquetamiento triangular y por ello el formalismo predice un comportamiento asintótico de $H(\phi)$ [31], por ende el valor es muy grande. Sin embargo la fracción $p/(nT)$ no presenta el mismo comportamiento.

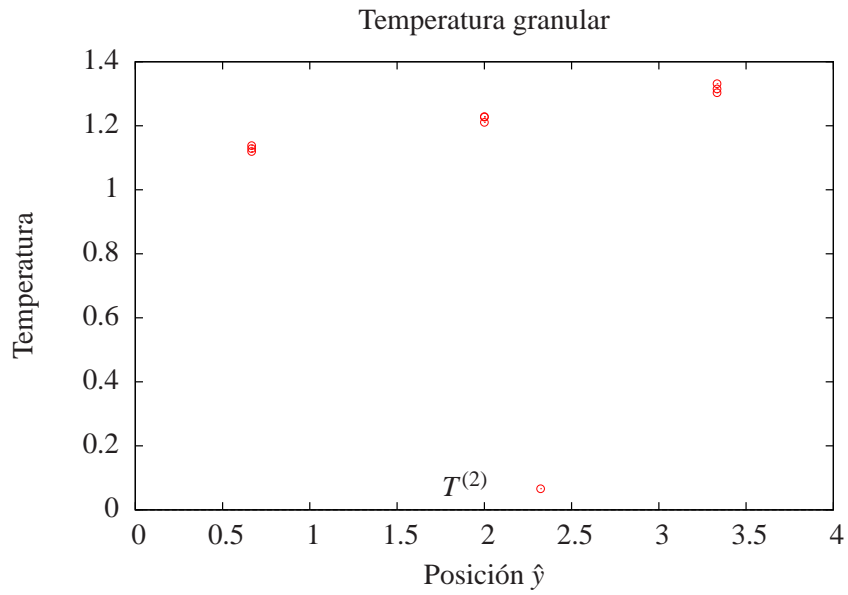


Figura 5.5: Medición de la temperatura granular por cada celda.

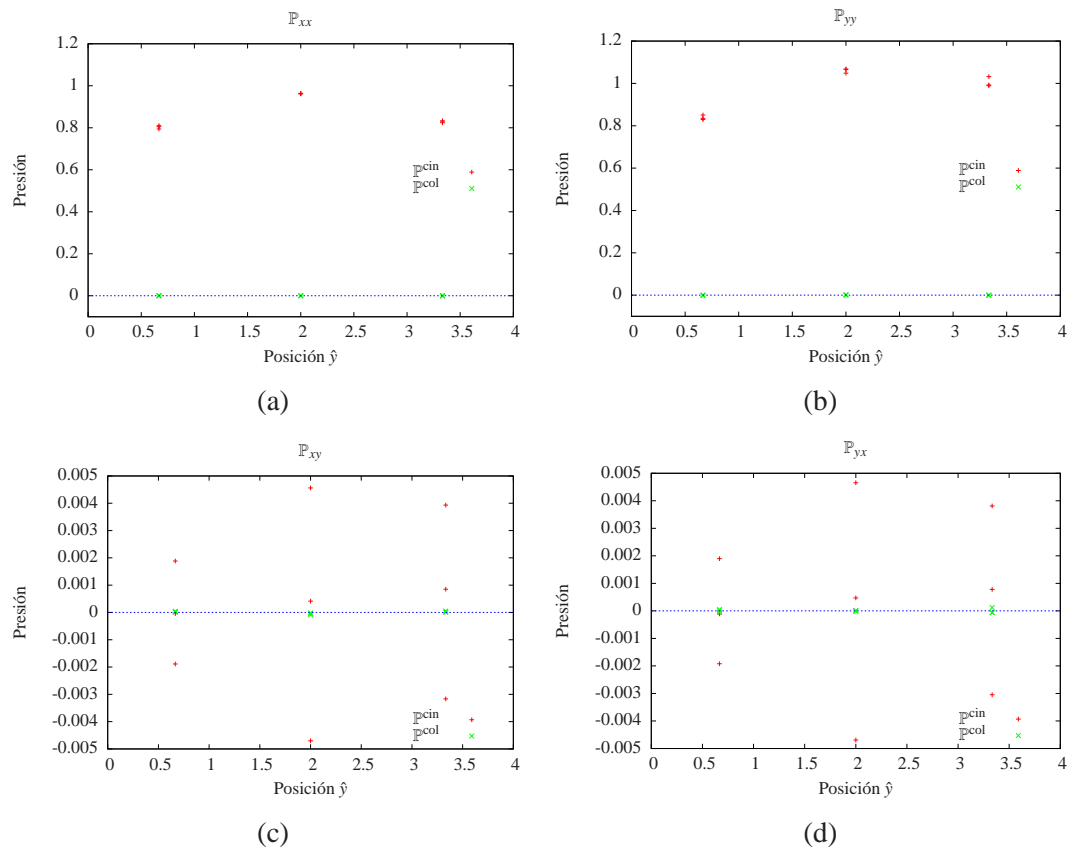


Figura 5.6: Promedio temporal de medición de P^{col} y P^{cin} por celda. (a) Componente xx . (b) Componente xy . (c) Componente yx . (d) Componente yy .

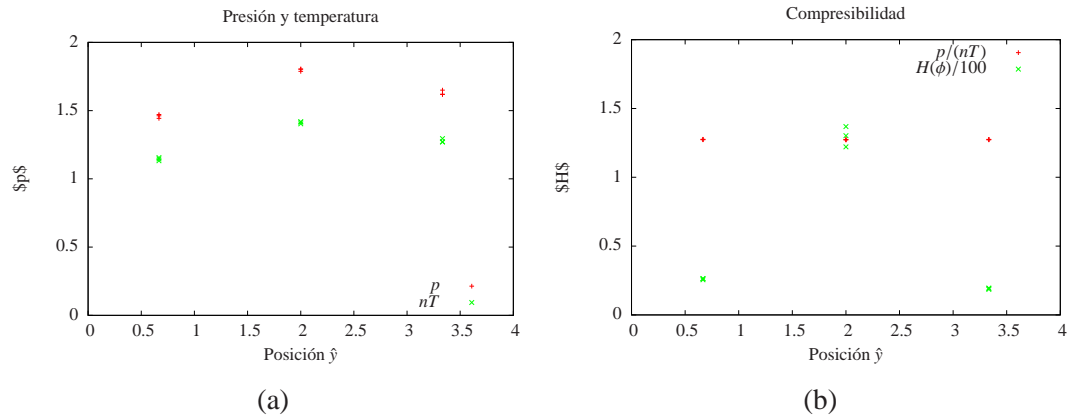


Figura 5.7: Comparaciones usando la presión escalar calculada por celda en la medición. (a) Comparación de las partes de la ecuación de estado p y nT . (b) Comparación entre la fracción de la presión y temperatura con la función H .

Estos resultados son muy similares a los observados para el sistema con 300 partículas en el capítulo anterior, donde la ecuación de estado no coincide con la medición obtenida para la presión escalar. Se discuten correcciones a estos resultados en el capítulo 8.

5.7.1. Viscosidad de cizalle

A partir de las distintas definiciones del tensor de presión, y usando el enfoque de Green-Kubo (3.29) con el estimador insesgado (3.27) se calcula y grafica el coeficiente de viscosidad. No se discuten las otras opciones para calcular estos valores dado que se determinó que esta es la opción óptima para minimizar la dispersión de los promedios locales comparados por altura y .

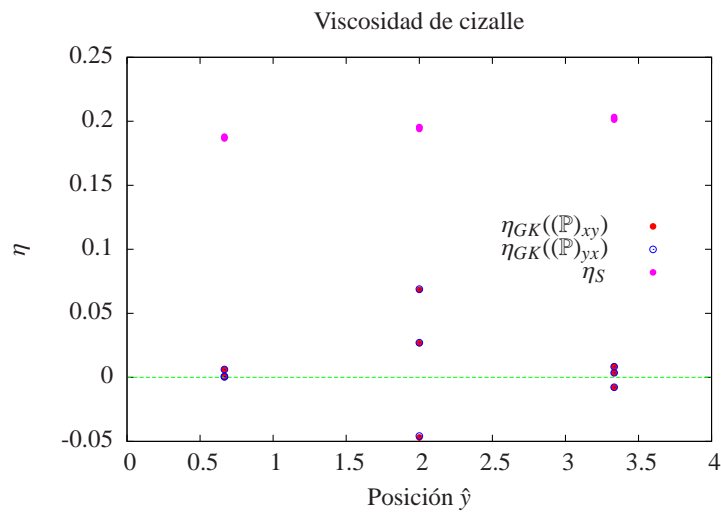


Figura 5.8: Medición de η_{GK} usando el estimador insesgado (3.27) y distintos componentes de \mathbb{P} junto a la predicción teórica η_S .

En este caso, se observa en la figura 5.8 que el coeficiente de viscosidad teórico η_S (4.21) alcanza valores más cercanos al promedio observado para cada celda, en especial a las celdas centrales. Sin embargo, los valores observados para η_{GK} son pequeños y se encuentran en torno a cero, resultado que nuevamente resulta poco intuitivo y requiere de mayor elaboración, no desarrollada en este trabajo.

5.8. Resumen del capítulo

Se ha comprobado la validez de las definiciones de los campos hidrodinámicos como sus ecuaciones de balance en el caso de un sistema muy reducido en número y tamaño. La capacidad de calcular el tensor de presión independientemente de los otros términos en todo momento permite en esta caso también construir un coeficiente de viscosidad de cizalle local que puede ayudar a entender este sistema. Se ha observado que el tensor de presión presenta los mismos problemas observados en el capítulo 4, lo que se refleja en el cálculo del coeficiente de viscosidad.

Capítulo 6

Campos microscópicos en un sistema 3D

6.1. Sumario

En este capítulo se utilizarán los conceptos desarrollados en los sistemas 2D para obtener sus equivalentes tridimensionales. Esto incluye campos microscópicos colectivos, ejemplos sencillos de aplicación, ecuaciones de balance de los campos de densidad de masa, momentum y energía, el tensor de presión cinético y colisional local y el cálculo del coeficiente de viscosidad de cizalle.

6.2. Introducción

El mismo tratamiento que se usó para construir los campos hidrodinámicos y las ecuaciones de balance en el caso bidimensional pueden extenderse al caso tridimensional siguiendo similares desarrollos.

Es relevante, sin embargo, estudiar una dirección vertical \hat{z} donde influya la gravedad para poder abarcar en el análisis el caso de la celda vibrada verticalmente. Así se tiene un sistema granular sencillo en principio (condiciones de borde sólidas inelásticas, vibración de la celda controlada) pero que presenta un conjunto de comportamientos diversos en función de las variables del sistema: densidad global, coeficiente de restitución de los granos, amplitud y frecuencia de vibración [4, 5, 27, 28].

En este sistema se impondrá que la dimensión de la caja vibrada en la dirección vertical es mucho menor que las otras dimensiones, pero debe ser mayor que el diámetro de las esferas dentro de ellas para generar comportamientos complejos, aunque menor que dos diámetros para evitar que una esfera pueda pasar por sobre otra, lo que genera en los experimentos reales dificultades en el seguimiento de cada grano. La amplitud podría ser mayor que el alto de la celda y la frecuencia puede ser relacionada con la aceleración de gravedad a través de sus dimensiones y unidades. A este sistema se le llamará pseudo-2D.

Estos sistemas se caracterizan por tener un comportamiento distinto en el plano comparado a la dirección vertical, y la evolución de las cantidades en sus últimos componentes es más rápido que en el resto del sistema, por lo que se analizan de forma independiente.

6.3. Definición de los campos en 3D

La distancia entre un punto arbitrario y el centro de una partícula queda definido por:

$$|\vec{r} - \vec{r}_i(t)| = \sqrt{(x - x_i(t))^2 + (y - y_i(t))^2 + (z - z_i(t))^2} , \quad (6.1)$$

y usando esto se define la densidad de masa en todo el espacio:

$$\rho_{3D}(\vec{r}, t) = \sum_i \rho_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] , \quad (6.2)$$

donde ρ_i corresponde a la densidad volumétrica uniforme de la esfera en el espacio, de modo que la integral sobre el espacio de una esfera obtiene la masa de esta, es decir:

$$\rho_i \equiv \frac{3m_i}{4\pi R_i^3} ,$$

con m_i la masa de la esfera i -ésima. Se define análogamente la densidad de momentum en el espacio:

$$\vec{P}_{3D}(\vec{r}, t) = \sum_i \rho_i \vec{v}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \quad (6.3)$$

y la densidad de energía cinética en el espacio:

$$K_{3D}(\vec{r}, t) = \sum_i \frac{\rho_i (\vec{v}_i)^2}{2} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] . \quad (6.4)$$

Todas estas definiciones tienen su análogo en el caso bidimensional. A estas definiciones se agrega la densidad de energía potencial gravitacional por unidad de masa

$$U_{3D}(\vec{r}, t) = \sum_i \rho_i g z \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] , \quad (6.5)$$

donde g es la aceleración de gravedad y z la posición en la dirección \hat{z} . Esta definición puede usarse para energías potenciales que deriven en fuerzas conservativas con densidad proporcionales a la masa. De este modo, la densidad de energía potencial debería ser definida como:

$$U_{\text{gen}}(\vec{r}, t) = \sum_i \rho_i \phi \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] .$$

Finalmente la suma de las densidades de distintas energías podrá dar paso a la densidad de energía total en el espacio.

6.4. Integración sobre una celda

Cuando se investiga la evolución de los campos descritos anteriormente se requiere, en la práctica, examinarlos dentro de celdas de medición. Como se mencionó en el caso 2D, es necesario expresar estos campos integrando las porciones de esfera que se incluyen dentro de cada celda.

Los campos antes definidos tienen la estructura:

$$\Lambda_{3D}(\vec{r}, t) = \sum_i \sigma_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] ,$$

donde σ_i no depende ni de la posición ni del tiempo (por ejemplo, para la densidad $\sigma_i = \rho_i$). Por tanto al integrar sobre una celda arbitraria se tiene:

$$\iiint_{\text{celda}} \Lambda_{3D} dx^3 = \sum_i \sigma_i \left(\iiint_{\text{celda}} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] dx^3 \right) = \sum_i \sigma_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) , \quad (6.6)$$

donde $\mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))$ corresponde al volumen de la esfera que está dentro de la celda. Esta definición es general y depende de la forma en que se divida el espacio.

En el caso de la caja pseudo-2D que se tendrá como ejemplo de este capítulo se impone que no hay divisiones en la dirección vertical, por lo que la distribución de celda es similar a la expresada para el caso bidimensional, mostrado en la figura 2.2, con la dirección \hat{z} perpendicular al plano de la hoja. Se usa la aproximación de que las dimensiones de la celda son mayores o iguales que el diámetro de las esferas que componen el medio. Usando los parámetros de la figura señalada se definen los siguientes valores para la $\mathbb{I}_{\text{celda}}$ (6.6) en el caso pseudo-2D:

$$\begin{aligned} \mathbb{I}_{2c}(d) &= \frac{\pi R_i^3}{3} \left(2 - \frac{d}{R_i} \right) \left(1 + \frac{d}{R_i} \right)^2 , \\ \mathbb{I}_{3c}(d_1, d_2) &= \frac{4}{3} \pi R_i^3 - \mathbb{I}_{2c}(d_1) - \mathbb{I}_{2c}(d_2) , \\ \mathbb{I}_{4c}(d_1, d_2) &: \text{Integral no-analítica, resuelta numéricamente .} \end{aligned}$$

A continuación se muestran ejemplos de utilización de estas cantidades. Son similares a los casos explicados en dos dimensiones con el tratamiento 3D propuesto. Se podría, con un poco de trabajo matemático, dividir la esfera en una mayor cantidad de partes para asignarlo a celdas pequeñas (menores en arista al diámetro de los granos) pero para el alcance de este trabajo el número de divisiones escogido fue suficiente.

6.4.1. Ejemplo de medición de masa en una celda 3D con una esfera moviéndose entre celdas

Se grafica la transición entre dos celdas de una esfera de radio R que viaja con velocidad constante perpendicular a la pared vertical divisoria entre celdas, mostrado en la figura 2.3. Se asume que la componente \hat{z} no cambia en el tiempo y la esfera permanece siempre entre ambas celdas exclusivamente.

Se muestra la esfera avanzando desde la celda uno con velocidad $\vec{v} = R/T \hat{x}$ donde T es la unidad de tiempo sin dimensiones unitaria. Se ajusta el tiempo de modo que el centro de la esfera atraviesa de una a celda a otra cuando $t = 0$. Se normaliza cada densidad por la masa total de la esfera.

Este sencillo ejemplo ayuda a comparar la similitud de comportamiento con el caso bidimensional, donde la transición es también suave y la forma general de las curvas es análoga, aunque la descripción en cada caso sea matemáticamente distinta. Se mantendrán así también las observaciones sobre la suavidad de la curva, comparada con la distribución de masa usando la delta de Dirac, y que potencialmente permite mayor precisión en la medición de las cantidades dentro de la celda.

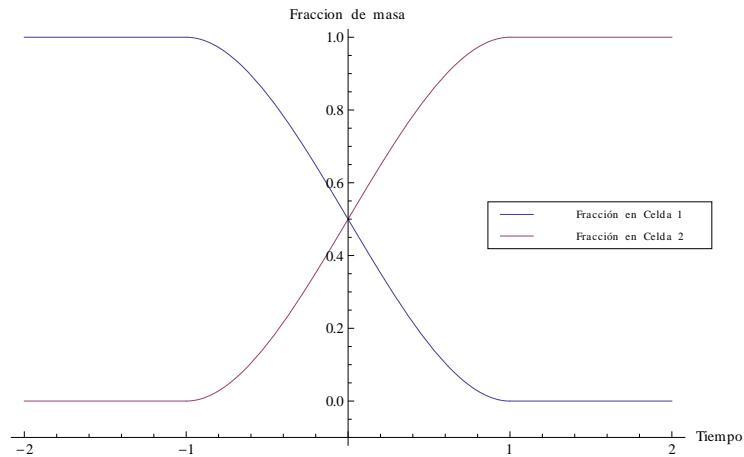


Figura 6.1: Se grafica la porción de esfera en cada celda en el tiempo, con el movimiento de la esfera ya descrito.

6.4.2. Ejemplo de paso entre múltiples celdas en 3D

Se grafica a continuación el paso de una esfera de radio R por distintas celdas según la trayectoria descrita en la figura 2.5 imponiendo que la componente \hat{z} de la posición se mantenga constante. De esta forma, inicia su movimiento contenida en la celda 3, parte de su masa durante el movimiento pasa por las celdas 1 y 4 pero termina su movimiento contenida en la celda 2. Se grafica a continuación la porción de masa de la esfera en cada celda:

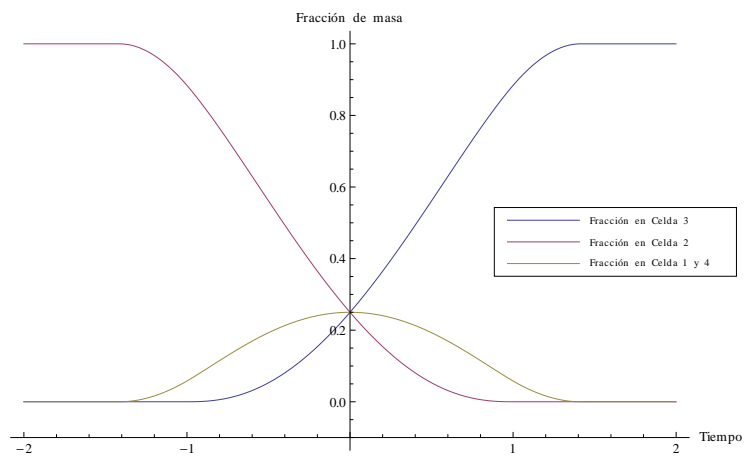


Figura 6.2: Paso de una esfera entre dos celdas. Se grafica la porción de esfera en cada celda en distintos tiempos. En $t = 0$ el centro pasa desde la celda 3 a la celda 2.

Se destaca el hecho de que el centro de la esfera pasa solamente por las celdas 2 y 3, de modo

que, tomando la distribución con la delta de Dirac solo tendría esas celdas como el depósito de la masa de la esfera. Las condiciones de suavidad de la esfera se mantienen para estos casos en comparación con el caso 2D, con las mismas características básicas: en $t = 0$ la masa está repartida por igual en todas las celdas, la masa empieza a ser repartida en la celda 1 y 4 antes que en la celda 2, y termina de pasar por la celda III antes de que pase completamente a la celda 2.

6.5. Ecuación de balance de la masa

La deducción de la ecuación es análoga al caso bidimensional y está incluida en el artículo de Goldhirsch [15]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{3D}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{3D} . \quad (6.7)$$

Para hacer uso de ella se integra sobre una celda 3D de medición arbitraria:

$$\begin{aligned} \iiint_{\text{celda}} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{3D} dx^3 &= - \iiint_{\text{celda}} \vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{3D} dx^3 , \\ \frac{\partial}{\partial t} \sum_i \rho_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) &= - \iiint_{\text{celda}} \vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{3D} dx^3 , \\ \frac{\partial}{\partial t} \sum_i \rho_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) &= \sum_i \iint_{\text{Sup. en celda}} \rho_i \vec{v}_i \cdot \hat{n} ds' = \sum_i \rho_i \vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) . \end{aligned}$$

Para llegar a esta última ecuación se usó un proceso similar al mostrado para 2D. Se tiene que la integral de superficie se realiza sobre la porción de la superficie de la esfera que está dentro de la celda. Se puede calcular esta integral analíticamente si la esfera está entre dos o tres celdas y numéricamente cuando está entre cuatro celdas distintas, según el esquema pseudo-2D como ejemplo.

Claramente $\vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i)$ depende de la orientación de la esfera con respecto a la pared vecina que la corta como de la distancia entre el centro y la pared de la celda.

$$\vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) = \iint_{\text{Sup. en celda}} \hat{n} ds' \quad (6.8)$$

Como reflexión, si la esfera está completamente en una celda esta integral es cero. Esto en la práctica implica que, por ejemplo, si la esfera es cortada por una sola pared entonces la integral a un lado de ella tiene signo contrario a la integral al otro lado.

Así también se tiene que, como las celdas tienen sus normales en el plano xy para el ejemplo pseudo-2D, por argumentos de simetría y paridad de las funciones la componente en \hat{z} de $\vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}$ es siempre nula.

Finalmente:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_i \rho_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) = \sum_i \rho_i \vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) \quad (6.9)$$

y ambos lados pueden ser calculados dentro de la simulación de manera independiente.

6.6. Ecuación de balance del momentum

Del artículo de Goldhirsch (ecuaciones (7), (8) y (15) [15]) se tiene el balance local de momentum:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{3D} &= - \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left[\rho_{3D} \vec{V}_{3D} (\vec{V}_{3D} \cdot \hat{e}_{\beta}) + \sum_i \rho_i \vec{v}'_i (\vec{v}'_i \cdot \hat{e}_{\beta}) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i|] \right] \\ &+ \sum_{ij} \vec{f}_{ij} (\Theta[R - |\vec{r} - \vec{r}'_i|]) + \sum_i \vec{f}_i (\Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i|]) , \end{aligned} \quad (6.10)$$

donde \hat{e}_{β} es el vector unitario en la dirección β , \vec{f}_{ij} es la fuerza que se ejercen las partículas entre ellas de forma binaria, \vec{f}_i la fuerza externa ejercida sobre cada unidad de volumen de la esfera i -ésima, y \vec{v}' sería la velocidad peculiar [11, 29] definida por:

$$\vec{v}'_i(\vec{r}, t) \equiv \vec{v}_i(t) - \vec{V}_{3D}(\vec{r}, t) . \quad (6.11)$$

Esta definición es la usada por Goldhirsch en sus deducciones [15] y es distinta a la descrita para la velocidad fluctuante (6.28), definida para el caso bidimensional en (2.29) y que se explicitará en la sección 6.8 de ‘Temperatura granular en 3D’. En este caso se utiliza como referencia la velocidad local y en el segundo la velocidad de referencia es la media dentro de la celda de medición. Por lo mismo ambas definiciones tienen propiedades distintas. Se ha utilizado esta definición porque permite una comparación directa con otros métodos y tiene propiedades útiles para la obtención de las ecuaciones de balance.

La velocidad por definición es:

$$\vec{V}_{3D}(\vec{r}, t) \equiv \frac{\vec{P}_{3D}(\vec{r}, t)}{\rho_{3D}(\vec{r}, t)} = \frac{\sum_i \rho_i \vec{v}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i|]}{\sum_i \rho_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i|]} ,$$

pero no hay traslape entre partículas ni deformaciones, entonces cuando se mira un punto del espacio solo se tienen dos opciones: pertenece al interior de una sola partícula o no pertenece a ninguna partícula. En ese caso se puede transformar la definición:

$$\vec{V}_{3D}(\vec{r}, t) = \sum_i \frac{\rho_i \vec{v}_i}{\rho_i} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i|] = \sum_i \vec{v}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i|] .$$

Y se puede analizar el término relacionado con la velocidad peculiar y, dado que las esferas no se traslapan, se tiene que:

$$\begin{aligned} \vec{v}'_i(\vec{r}, t) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i(t)|] &= \vec{v}_i(t) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i(t)|] \\ &- \sum_j \vec{v}_j(t) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_j(t)|] \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i(t)|] \\ &= \vec{v}_i(t) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i(t)|] - \sum_j \vec{v}_j(t) \delta_{i,j} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i(t)|] \\ &= \vec{v}_i(t) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i(t)|] - \vec{v}_i(t) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}'_i(t)|] = 0 , \end{aligned} \quad (6.12)$$

por lo que el segundo término de la ecuación de balance de momentum es a su vez nulo. Este desarrollo hace que la velocidad peculiar sea inútil para definir a la temperatura en este contexto.

Por otro lado, los choques entre partículas son instantáneos, por ende el cambio de momentum por choques se puede reducir a:

$$\vec{f}_{ij} \equiv \rho_i \Delta \vec{v}_{i,j} \delta(t - t^*) ,$$

donde se define

$$\Delta \vec{v}_{i,j} = \begin{cases} \vec{v}_i^+ - \vec{v}_i^0 & : \text{ Si la partícula } i\text{-ésima ha chocado con la } j\text{-ésima en el tiempo } t^* \\ 0 & : \text{ Si la partícula } i\text{-ésima y } j\text{-ésima no han chocado en } t^* \end{cases}$$

con \vec{v}_i^0 la velocidad que tenía inmediatamente antes del choque con j y \vec{v}_i^+ la velocidad que tenía inmediatamente después del choque con j . Si la partícula i -ésima no ha chocado en el intervalo con la partícula j -ésima entonces el valor que toma esta expresión es 0.

Finalmente, las fuerzas externas que afectan a cada esfera en este caso provienen de energías potenciales, de forma que:

$$\vec{f}_i = -\vec{\nabla}(\rho_i \phi(\vec{r}, t)) = -\rho_i g \hat{z} . \quad (6.13)$$

Con todo esto se reescribe la ecuación para el balance del momentum:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{3D} = \sum_{ij} \rho_i \Delta \vec{v}_{i,j} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) - \nabla \cdot ((\vec{P}_{3D}) \vec{V}_{3D}) - g \hat{z} \rho_{3D} . \quad (6.14)$$

Luego, al integrar sobre la celda se obtiene:

$$\begin{aligned} \iiint_{\text{celda}} \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{3D} dx^3 &= \iiint_{\text{celda}} \sum_{ij} \rho_i \Delta \vec{v}_{i,j} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) dx^3 \\ &\quad - \iiint_{\text{celda}} \nabla \cdot ((\vec{P}_{3D}) \vec{V}_{3D}) dx^3 - \iiint_{\text{celda}} g \hat{z} \rho_{3D} dx^3 , \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_i \rho_i \vec{v}_i \mathbb{I}_{\text{celda}} \right) &= \sum_{ij} \rho_i \Delta \vec{v}_{i,j} \delta(t - t^*) \mathbb{I}_{\text{celda}} + \sum_i \rho_i \vec{v}_i \left(\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) \right) - g \hat{z} \sum_i \rho_i \mathbb{I}_{\text{celda}} . \end{aligned} \quad (6.15)$$

Con lo que finalmente se tiene la ecuación de balance de momentum dentro de una celda de medición. El primer término de la mano derecha corresponde al cambio de momentum producto de los choques ocurridos dentro o en los límites de la celda, el segundo a la salida de momentum junto con las partículas por las paredes y el último término corresponde a la aceleración ejercida por la gravedad sobre la masa dentro de la celda. Cabe destacar que un choque íntegramente dentro de la celda no producirá un cambio de momentum en ella porque los choques conservan el momentum.

En el caso de la caja vibrada verticalmente a los términos de la ecuación (6.14) se le agrega un cuarto, que corresponde al choque de las esferas con los límites de la caja. El caso ejemplificado incluye condiciones periódicas en las direcciones horizontales, de modo que solo hay pared superior e inferior con la que es posible chocar, y el rebote solo afecta a la dirección de la velocidad normal a la pared, de modo que ese término sería:

$$\Delta \vec{P}_p \equiv \sum_{i, \text{pared } p} \rho_i \Delta \vec{v}_{i,p} \delta(t - t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] , \quad (6.16)$$

donde $\Delta \vec{v}_{i,\text{pared } p}$ corresponde al cambio de velocidad vertical que experimenta la esfera i -ésima al chocar con la pared en el tiempo t^* . Esta cantidad depende del coeficiente de restitución grano-pared, de la velocidad de la pared y del grano en el instante del choque. Este término y el asociado a la gravedad solo afectan a la dirección \hat{z} de modo que la ecuación de balance en las otras direcciones es similar a (2.16).

De esto se deduce que la energía inyectada por la caja vibrada es transmitida a las direcciones x e y mediante los choques entre granos, de modo que es lógico pensar que si los granos rebotan verticalmente al unísono no habrá intercambio de momentum entre direcciones.

6.7. Ecuación de balance de energía

6.7.1. Energía cinética

Partiendo de la definición de la energía cinética y derivando en función del tiempo se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} K_{3D} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(\vec{P}_{3D})^2}{\rho_{3D}} \right) = \frac{\vec{P}_{3D}}{\rho_{3D}} \cdot \frac{\partial \vec{P}_{3D}}{\partial t} - \frac{(\vec{P}_{3D})^2}{2(\rho_{3D})^2} \frac{\partial \rho_{3D}}{\partial t}.$$

Usando lo ya calculado para $\frac{\partial}{\partial t} \rho_{3D}$ (ecuación 6.7) y $\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{3D}$ (ecuación 6.14) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(\vec{P}_{3D})^2}{\rho_{3D}} \right) &= \frac{\vec{P}_{3D}}{\rho_{3D}} \cdot \left(\sum_{ij} \rho_i \Delta \vec{v}_{i,j} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) - \nabla \cdot \left((\vec{P}_{3D}) \vec{V}_{3D} \right) - g \hat{z} \rho_{3D} \right) \\ &\quad + \frac{(\vec{P}_{3D})^2}{2(\rho_{3D})^2} (\nabla \cdot \vec{P}_{3D}). \end{aligned} \quad (6.17)$$

Es necesario analizar cada término por separado. Aplicando la no-superposición de las esferas y con un poco de álgebra, el primer término sería:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{P}_{3D}}{\rho_{3D}} \cdot \left(\sum_{ij} \rho_i \Delta \vec{v}_{i,j} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) \right) &= \sum_{ij} \rho_i (\vec{v}_i \cdot \Delta \vec{v}_{i,j}) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) \\ &= \sum_{ij} \rho_i \frac{1}{2} \Delta (\vec{v}_{i,j}^2) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*), \end{aligned} \quad (6.18)$$

donde se hizo uso del tratamiento explicado en el caso bidimensional para obtener (2.19). Este término representa el cambio de energía cinética producto de la colisión entre partículas. El segundo y el último término de la ecuación (6.17), al simplificarlos, se obtiene:

$$-\frac{\vec{P}_{3D}}{\rho_{3D}} \cdot (\nabla \cdot ((\vec{P}_{3D}) \vec{V}_{3D})) + \frac{(\vec{P}_{3D})^2}{2(\rho_{3D})^2} (\nabla \cdot \vec{P}_{3D}) = -\vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{3D}^2}{2\rho_{3D}} \right) \vec{V}_{3D} \right).$$

Y el último término de la ecuación (6.17) es:

$$-\frac{\vec{P}_{3D}}{\rho_{3D}} \cdot g \hat{z} \rho_{3D} = -g \vec{P}_{3D} \cdot \hat{z} = -(g \rho_{3D} \hat{z}) \cdot \vec{V}_{3D}.$$

Se tiene entonces la ecuación del cambio de la energía cinética en todo punto del espacio:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(\vec{P}_{3D})^2}{2\rho_{3D}} \right) = \sum_{ij} \Delta \left(\frac{\rho_i \vec{v}_{i,j}^2}{2} \right) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) - \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{3D}^2}{2\rho_{3D}} \right) \vec{V}_{3D} \right) - (g\rho_{3D} \hat{z}) \cdot \vec{V}_{3D} . \quad (6.19)$$

El último término corresponde a la energía potencial convertida en energía cinética por el movimiento vertical de las esferas en el espacio.

6.7.2. Energía potencial gravitacional

Usando la definición de la energía potencial se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} U_{3D} &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_i \rho_i g z \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] = - \sum_i \rho_i g z \vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \\ &= - \sum_i \rho_i g z \vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \\ &\quad - \sum_i \rho_i g \vec{v}_i (\vec{\nabla} z) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] + \sum_i \rho_i g \vec{v}_i \hat{z} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \\ &= - \vec{\nabla} \cdot \left(\sum_i (\rho_i g z) \vec{v}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \right) + \sum_i \rho_i g \vec{v}_i \hat{z} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \\ &= - \vec{\nabla} \cdot (U_{3D} \vec{V}_{3D}) + (g\rho_{3D} \hat{z}) \cdot \vec{V}_{3D} , \end{aligned} \quad (6.20)$$

donde se usó que $\hat{z} = \vec{\nabla} z$. El primer término del lado derecho corresponde al movimiento de la energía potencial que se mueve junto con el campo de velocidad del fluido y el último corresponde a la energía potencial ganada por el movimiento vertical de los granos. Como la energía se conserva fuera de las colisiones, esa energía ganada se pierde en la energía cinética, y el mismo término aparece al final de la ecuación (6.19).

6.7.3. Energía total e integración en la celda

Dado que la energía total es $E = K + U$ se tiene la ecuación de balance:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(\vec{P}_{3D})^2}{2\rho_{3D}} + U_{3D} \right) = \sum_{ij} \Delta \left(\frac{\rho_i \vec{v}_{i,j}^2}{2} \right) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) - \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{3D}^2}{2\rho_{3D}} + U_{3D} \right) \vec{V}_{3D} \right) . \quad (6.21)$$

Si se toman en cuenta las condiciones de borde hay que agregar algún término que permita en principio inyectar energía, en el caso de la celda vibrada esta se inyecta en forma de energía cinética al chocar las esferas con las paredes inferior y superior, y solo la velocidad vertical de los granos es afectada:

$$F_E \equiv \sum_{i, \text{pared } p} \rho_i \Delta \left(\frac{\vec{v}_{i,p}^2}{2} \right) \delta(t - t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] , \quad (6.22)$$

donde $\vec{v}_{i,p}^2$ solo tiene componente no nulo normal a la pared y F_E sigue la misma lógica que la inyección de momentum vista en la sección anterior. Estos términos son llamados inyectores, pero

los choques con las paredes pueden darse en condiciones en que se pierda momentum o energía. Sin embargo el promedio de choques debe aumentar estas cantidades en el tiempo, de otro modo el estado estacionario se transforma en el trivial donde todas las esferas están detenidas con respecto a la caja vibrada:

Integrando sobre la celda se tiene:

$$\begin{aligned} \iiint_{\text{celda}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{(\vec{P}_{3D})^2}{2\rho_{3D}} + U_{3D} \right) dx^3 &= \iiint_{\text{celda}} \left(\sum_{ij} \Delta \left(\frac{\rho_i \vec{v}_{i,j}^2}{2} \right) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) \right) dx^3 \\ &\quad - \iiint_{\text{celda}} \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{P_{3D}^2}{2\rho_{3D}} + U_{3D} \right) \vec{V}_{3D} \right) dx^3 . \end{aligned} \quad (6.23)$$

Se debe poner especial atención a las integrales sobre U dado que estas involucran a la posición local de la dirección \hat{z} . La primera de ellas es:

$$\begin{aligned} \iiint_{\text{celda}} (U_{3D}) dx^3 &= \iiint_{\text{celda}} \left(\sum_i \rho_i g z \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right) dx^3 \\ &\quad \text{c.v.: } \vec{r} - \vec{r}_i(t) = \vec{r}' \\ &= \iiint_{\text{celda}} \left(\sum_i \rho_i g (z' - z_i(t)) \Theta[R_i - r'] \right) dx'^3 \\ &= \sum_i \rho_i g \iiint_{\text{celda}} (z' \Theta[R_i - r']) dx'^3 + \sum_i \rho_i g z_i(t) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) . \end{aligned}$$

La primera integral es nula dado que la función $z' \Theta[R_i - r']$ es impar para z' y la integral en esta dirección se realiza sobre un intervalo alrededor del cero

$$z' \in \left[-\sqrt{R_i^2 - x'^2 - y'^2}, \sqrt{R_i^2 - x'^2 - y'^2} \right] .$$

De ese modo se obtiene que:

$$\iiint_{\text{celda}} (U_{3D}) dx^3 = \sum_i \rho_i g z_i(t) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) . \quad (6.24)$$

La segunda integral que involucra a U en (6.23) es:

$$\begin{aligned} - \iiint_{\text{celda}} \vec{\nabla} \cdot \left((U_{3D}) \vec{V}_{3D} \right) dx^3 &= - \iiint_{\text{celda}} \vec{\nabla} \cdot \left(\sum_i \rho_i g z \vec{v}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right) dx^3 \\ &= - \sum_i \iiint_{\text{celda}} \rho_i g (\vec{\nabla} z) \cdot \vec{v}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx^3 \\ &\quad - \sum_i \iiint_{\text{celda}} \rho_i g z \vec{v}_i \cdot (\vec{\nabla} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|]) dx^3 . \end{aligned} \quad (6.25)$$

Haciendo el cambio de variables para que el origen coincida con el centro de la esfera, es decir $\vec{r} - \vec{r}_i(t) = \vec{r}'$, se tiene:

$$\begin{aligned}
- \iiint_{\text{celda}} \vec{\nabla} \cdot ((U_{3D}) \vec{V}_{3D}) dx^3 &= - \sum_i \rho_i g(\vec{v}_i \cdot \hat{z}) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) \\
&\quad - \sum_i \rho_i g \iiint_{\text{celda}} (z' + z_i(t)) \vec{v}_i \cdot (\vec{\nabla} \Theta[R_i - r']) dr'^3 \\
&= - \sum_i \rho_i g(\vec{v}_i \cdot \hat{z}) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i) + \sum_i \rho_i g z_i(t) \vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) .
\end{aligned}$$

Se ha hecho uso de la misma condición para descartar la integral de la función $z' \vec{v}_i \cdot (\vec{\nabla} \Theta[R_i - r'])$ dada su imparidad y límites de integración.

De ese modo se tiene que:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_i \left(\frac{\rho_i v_i^2}{2} \right) \mathbb{I}_{\text{celda}} + \rho_i g z_i(t) \mathbb{I}_{\text{celda}} \right) &= \sum_{ij} \Delta \left(\frac{\rho_i v_{i,j}^2}{2} \right) \delta(t - t^*) \mathbb{I}_{\text{celda}} + \sum_i \frac{\rho_i (\vec{v}_i)^2}{2} (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}) \\
&\quad - \sum_i \rho_i g(\vec{v}_i \cdot \hat{z}) \mathbb{I}_{\text{celda}} + \sum_i \rho_i g z_i(t) \vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}} .
\end{aligned} \tag{6.26}$$

Se repite la estructura del momentum, donde los últimos tres términos del lado derecho corresponde a la fuga de energía por la salida de esferas de la celda, y el primero por cambios de energía debido a los choques que ocurren en la celda o en la vecindad de ella.

6.8. Temperatura granular en 3D

Se ha usado en el sistema bidimensional dos definiciones distintas de temperatura, pero utilizaremos la definición que ha sido exitosa en más casos. En el caso tridimensional usual, donde se usa la distribución delta de Dirac, se tiene que [11]:

$$T(\text{Celda}) = \frac{1}{3} \left\langle \frac{1}{N_{\text{Celda}}} \iiint_{\text{Celda}} \sum_i m_i v_i^2 \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) dx^3 \right\rangle_t - \frac{m}{3} \langle \mathbb{V}_{\text{Celda}} \rangle_t^2 , \tag{6.27}$$

donde N_{Celda} es el número de partículas dentro de la celda, $\mathbb{V}_{\text{Celda}}$ es la velocidad media por partícula dentro de la celda y el promedio $\langle \dots \rangle_t$ se realiza en cada celda por separado promediando las mediciones en distintos instantes. La velocidad fluctuante local \vec{C} definida por:

$$\vec{C}_i(\text{Celda}) = \vec{v}_i - \frac{1}{N_{\text{Celda}}} \iiint_{\text{Celda}} \sum_j v_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) dx^3 . \tag{6.28}$$

No se ha utilizado la velocidad peculiar (6.11) dado que los resultados obtenidos en el sistema bidimensional se replican en el caso 3D, es decir, es nula en todo punto del espacio.

A partir de estas ideas, y basado en la definición bidimensional, se define:

$$N_{3D}(\text{Celda}) = \iiint_{\text{Celda}} \sum_j \frac{3}{4\pi R_j^3} \Theta[R_j - |\vec{r} - \vec{r}_j|] dx^3, \quad (6.29)$$

$$\vec{V}_{\text{Celda}} = \frac{1}{N_{3D}(\text{Celda})} \iiint_{\text{Celda}} \sum_j \frac{3}{4\pi R_j^3} \vec{v}_j \Theta[R_j - |\vec{r} - \vec{r}_j|] dx^3, \quad (6.30)$$

$$T_{3D}^{(2)}(\text{Celda}) = \frac{1}{3} \left\langle \frac{1}{N_{3D}(\text{Celda})} \iiint_{\text{Celda}} \sum_i \rho_i v_i^2 \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx^3 \right\rangle - \frac{m}{3} \langle \vec{V}_{\text{Celda}} \rangle_t^2, \quad (6.31)$$

que corresponden al número de partículas o densidad de número, a la velocidad fluctuante y la temperatura, respectivamente, todas ellas usando la distribución de masa de Heaviside. Se hace hincapié en que N_{3D} no es interpretable directamente si existe una distribución de tamaños, dado que habría que comparar trozos de discos de distinto tamaño para asignarle a cada uno un número de grano que se está agregando a cada celda. En el caso de los medios bidispersos en tamaño se puede definir una densidad de número para cada tamaño. En caso de ser monodisperso en masa y tamaño, como se han hecho las simulaciones numéricas hasta ahora, la densidad de masa y de número están relacionadas por $\rho_{3D} = mN_{3D}$, donde m es la masa común de todos los granos.

6.8.1. Temperatura en el plano

Dado que en los sistemas pseudo-2D, como el caso de la caja baja vibrada verticalmente, la dirección \hat{z} juega un rol muy distinto a las que se encuentran en el plano perpendicular a esta dirección, se separa la temperatura en el plano para aislar el análisis de cada una. De este modo se tiene:

$$T_{xy} = \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{N_{3D}(\text{Celda})} \iiint_{\text{Celda}} \rho_i (v_{ix}^2 + v_{iy}^2) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx^3 \right\rangle - \frac{m}{2} \langle \vec{V}_{\text{Celda}} \cdot \hat{e}_x \rangle_t^2 - \frac{m}{2} \langle \vec{V}_{\text{Celda}} \cdot \hat{e}_y \rangle_t^2, \quad (6.32)$$

$$T_z = \left\langle \frac{1}{N_{3D}(\text{Celda})} \iiint_{\text{Celda}} \rho_i v_{iz}^2 \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx^3 \right\rangle - m \langle \vec{V}_{\text{Celda}} \cdot \hat{e}_z \rangle_t^2, \quad (6.33)$$

y por tanto se cumple la relación

$$T_{3D}^{(2)} = \frac{2}{3} T_{xy} + \frac{1}{3} T_z.$$

De esta forma se puede complementar el análisis potencial sobre las componentes del momentum, energía cinética y la presión sobre el plano con la temperatura sobre él, asociando también las condiciones de borde especiales que ocurren en este plano. Así también relacionar la temperatura en \hat{z} con las componentes del tensor de presión z_x y z_y de modo de dar cuenta de los cambios ocurridos en el momentum y energías cinética y potencial sobre esta componente.

6.9. Definición del tensor de presión en 3D

A partir de lo discutido anteriormente para la presión colisional en el caso bidimensional (3.7) y haciendo uso de que, para un sistema tridimensional:

$$\vec{V} \cdot \vec{f}_{3D} = \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \Rightarrow \vec{f}_{3D}(\vec{r}) \equiv \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{3} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] + u_{3D}, \quad (6.34)$$

donde se tiene un grado de libertad de “gauge” u_{3D} . Con esto se explicitan la definición del tensor de presión colisional \mathbb{P}^{col} tomado como supuesto que $u_{3D} \equiv 0$:

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}} = - \sum_{ij} \rho_i (\Delta \vec{v}_{i,j} \cdot \hat{e}_\alpha) \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{3} \cdot \hat{e}_\beta \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) . \quad (6.35)$$

Esta definición es análoga al caso bidimensional y se han tomado resguardos similares al derivar estas expresiones.

Se puede, a su vez, realizar el mismo análisis a la ecuación de balance de momentum (6.14) para encontrar el tensor de presión cinético, análogamente a lo desarrollado para el caso bidimensional:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot ((\vec{P}_{3D}) \vec{V}_{3D}) &= \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left(\sum_i \delta_i \vec{v}_i (\vec{v}_i \cdot \hat{e}_{\beta}) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \right) \\ &= \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \sum_i \delta_i (\vec{C}_i (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\beta})) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} (\vec{\nabla}_{\text{Celda}} (\vec{\nabla}_{\text{Celda}} \cdot \hat{e}_{\beta}) \rho_{3D}) \\ &\quad + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \vec{\nabla}_{\text{Celda}} \left(\sum_i \delta_i \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \cdot \hat{e}_{\beta} \right) \\ &\quad + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} (\vec{\nabla}_{\text{Celda}} \cdot \hat{e}_{\beta}) \sum_i \delta_i \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] . \end{aligned} \quad (6.36)$$

donde se puede identificar al tensor de presión colisional:

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{cin}} = \sum_i \delta_i (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\alpha}) (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\beta}) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] , \quad (6.37)$$

donde \vec{C}_i es la velocidad fluctuante para la partícula i -ésima en el tiempo t (6.28). Finalmente se construye el tensor de presión total \mathbb{P} :

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}(\vec{r}, t) = \mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{cin}}(\vec{r}, t) + \mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}}(\vec{r}, t) . \quad (6.38)$$

Estas definiciones permiten el cálculo dentro de la simulación de forma sencilla, teniendo el cuidado al realizar las integrales dentro de la celda de medición. Cuando se considera una celda de volumen V , al integrar la presión local se puede obtener una presión media dentro de la celda

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}}(\text{Celda}) = -\frac{1}{V} \sum_{ij} \rho_i (\Delta \vec{v}_{i,j} \cdot \hat{e}_{\alpha}) \delta(t - t^*) (\mathbb{K}(\vec{r}_i) \cdot \hat{e}_{\beta}) , \quad (6.39)$$

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{cin}}(\text{Celda}) = \frac{1}{V} \sum_i \delta_i (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\alpha}) (\vec{C}_i \cdot \hat{e}_{\beta}) \mathbb{I}_{\text{Celda}} , \quad (6.40)$$

donde

$$\mathbb{K}(\vec{r}_i) = \iiint_{\text{Celda}} \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{3} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] dx dy dz .$$

Se puede utilizar también el tensor de presión total \mathbb{P} dentro del contexto del cálculo del coeficiente de viscosidad de cizalle de la misma forma en que está descrito en la sección 3.7 a partir de

las componentes fuera de la diagonal.

De igual forma, aplicando la velocidad fluctuante \vec{C}_i sobre la ecuación de balance de energía se puede encontrar el análogo al flujo de calor:

$$\vec{Q} = \sum_i \frac{\delta_i C_i^2}{2} \vec{C}_i \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] , \quad (6.41)$$

6.10. Recapitulando las ecuaciones de balance en 3D

Incluyendo el término arbitrario de fuente en cada ecuación F_ρ , \vec{F}_P y F_E para masa, momentum y energía respectivamente), que debe ser explicitado para cada caso independientemente, e incluyendo las definiciones de la presión colisional (6.35), cinética (6.37) y flujo de calor \vec{Q} (6.41), se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{3D} = \vec{\nabla} \cdot \vec{P}_{3D} + F_\rho , \quad (6.42)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}_{3D} &= -\vec{\nabla} \cdot (\mathbb{P}^{\text{col}} + \mathbb{P}^{\text{cin}}) - \vec{\nabla} \cdot ((\vec{\nabla}) \rho_{3D} \vec{\nabla}) - \vec{\nabla} \cdot ((\vec{C}) \vec{\nabla}) - \vec{\nabla} \cdot ((\vec{\nabla}) \vec{C}) \\ &\quad - g \hat{z} \rho_{3D} + \vec{F}_P , \end{aligned} \quad (6.43)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{P_{3D}^2}{2\rho_{3D}} + U_{3D} \right) &= -\vec{\nabla} \cdot ((U_{3D}) \vec{V}_{3D}) - \vec{V}_{2D} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}}) - \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{cin}}) - \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\rho_{2D} \nabla^2}{2} \vec{\nabla} \right) - \vec{\nabla} \cdot (\vec{C}^2 \vec{\nabla}) \\ &\quad - \vec{\nabla} \cdot \vec{Q} - \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{C}}{2} \right) \vec{\nabla} \right) - \vec{\nabla} \cdot \left(\nabla^2 \frac{\vec{C}}{2} \right) + F_E . \end{aligned} \quad (6.44)$$

y corresponden a las ecuaciones de balance de masa, momentum y energía respectivamente.

6.11. Resumen del capítulo

Se ha definido para sistemas granulares tridimensionales los campos de densidad de masa, momentum y energía, junto la ecuación de balance para el cambio de cada uno de ellos. Se ha definido también la temperatura granular, la temperatura en el plano xy y en la dirección vertical \hat{z} .

Se ha hecho uso de las ecuaciones de balance para definir los tensores de presión colisional y cinética, que pueden utilizarse para encontrar el coeficiente de viscosidad de cizalle usando el método de Green-Kubo ya descrito en el capítulo 3.

Se dio como ejemplo el caso de la caja vibrada pseudo-2D con condiciones de borde periódica para incluir las modificaciones a las ecuaciones de balance y las posibles consideraciones con respecto a la temperatura en el plano xy o paralelo a la vibración.

Capítulo 7

Medición en un sistema tridimensional

7.1. Sumario

En este capítulo se hará uso de un sistema numérico simulado con el fin de calcular cada uno de los términos definidos en el capítulo anterior que son análogos a los medidos en el sistema bidimensional. Se comprobará la validez de las ecuaciones de balance, la utilidad de las definiciones del tensor de presión y se mostrará el resultado de usarlo para medir el coeficiente de viscosidad de cizalle. Se mostrará también la medición de temperatura tanto dentro como fuera del plano que define la caja vibrada.

7.2. Introducción

Dentro de los sistemas tridimensionales tiene especial interés el caso de la caja vibrada pseudo-bidimensional. En ella la dirección vertical es afectada por la gravedad y el movimiento de la caja donde están contenidos los granos. A pesar de lo sencillo del sistema puede desarrollar comportamientos diversos como coexistencia de fases sólida-gaseosa y explosiones espontáneas que desarman la fase sólida. [35]

La peculiaridad de este sistema recae en sus múltiples variables que afectan de distinta forma el comportamiento colectivo de los granos, por ejemplo la longitud vertical de la caja. En general se permite que esta sea mayor que un diámetro para que las partículas puedan moverse en esa dirección y menor que dos diámetros para que un grano no pueda pasar sobre otro. Dependiendo de la distancia elegida, al desarrollar las estructuras sólidas estas pueden tener estructuras cristalinas de distintos tipos, por ejemplo para algunas configuraciones de oscilación y densidad se logra que para $L_z \approx 1.7 - 1.8$ se forme una estructura con base cuadrada en la primera capa y con $L_z \approx 1.8 - 1.9$ se puede llegar a tener una estructura base tipo hexagonal [36, 37].

Para validar las ecuaciones descritas en el capítulo anterior se toma un sistema de este tipo, donde se miden durante la simulación las diversas variables locales y términos de las ecuaciones de balance. Se muestran los gráficos usando la misma estrategia del capítulo con los resultados bidimensionales aceptando sus conclusiones para descartar las definiciones redundantes de temperatura y coeficientes de viscosidad de cizalle, pues se han observado en diversas simulaciones numéricas comportamientos similares en el caso tridimensional.

7.3. El sistema a analizar

En una caja de base cuadrada de 20 diámetros de lado y altura 1.85 diámetros se introducen 400 granos de diámetro $2R = 1$. En el plano horizontal se generan condiciones de borde periódicas. Las esferas pueden moverse libremente dentro de la caja afectadas por la gravedad en la dirección \hat{z} , por choques con el suelo y techo de la caja como choques entre partículas. La figura 7.1 muestra un esquema de la caja.

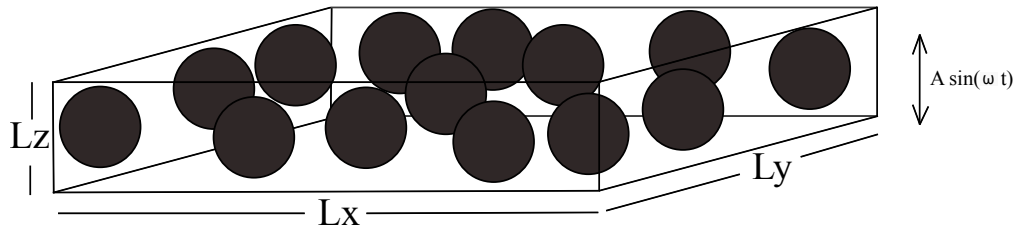


Figura 7.1: Ejemplo de caja pseudo-bidimensional baja vibrada verticalmente

Para realizar las mediciones locales se construyeron $19 \times 19 = 361$ celdas que dividen el plano horizontal. No se generan divisiones en la dirección \hat{z} dado que el sistema no presenta gradientes importantes en esta dirección. Un ejemplo de la configuración que se observa en la simulación se ve en la figura 7.2, donde en líneas punteadas se muestran las divisiones de las celdas.

En general se espera, dada las simetrías de traslación y reflexión en el plano, una densidad uniforme cuando no hayan quiebres de simetría espontáneos y no se desarrollen fases sólidas. Por lo mismo, los gradientes del campo de velocidad debiesen ser pequeños y la energía cinética constante. Dado que se tienen granos que concentran estas propiedades, es también esperable que en un determinado instante haya celdas que no contengan centros de esferas, y por tanto para la distribución usando la función delta de Dirac, estén vacías. Considerando que las esferas tienen volumen, es decir, usando la función de Heaviside utilizada en este trabajo, ello difícilmente ocurre.

Los rebotes en las paredes del suelo y techo de la caja generan la inyección de energía en la dirección \hat{z} que luego es transmitida al plano xy por choques entre partículas para luego ser disipada de esta misma forma.

Algunos otros datos del sistema:

- Fracción de volumen ocupado $\phi = 0.566$
- Coeficiente de inelasticidad $q_n = 0.02$ (coeficiente de restitución $\alpha_n = 0.96$)
- Coeficiente de inelasticidad con las paredes $q_p = 0.0$ (coeficiente de restitución $\alpha_p = 1$)
- Gravedad $\vec{g} = -1\hat{z}$
- Frecuencia de vibración $\omega = 10$
- Amplitud de vibración $A = 0.01$

Estado del sistema 3D

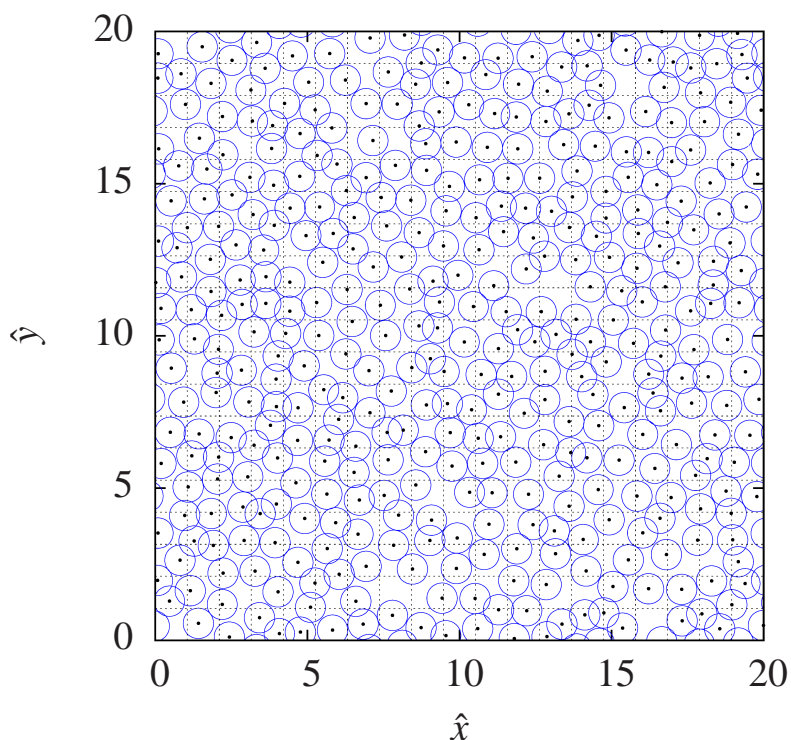


Figura 7.2: Sistema 3D con 400 discos en una caja semi-periódica en el plano xy . Se muestra el contorno de cada esfera junto a la posición de sus centros. En líneas punteadas, las divisiones para las celdas de medición.

Por argumentos de simetría se podrían comparar todas las celdas sin excepción, pero se elige graficar todas las cantidades agrupando la dirección \hat{x} por comodidad visual. Esta forma permite una comparación directa con los gráficos mostrados para el caso bidimensional, que a pesar de incluir una menor cantidad de granos tiene una fracción de volumen ocupado similar.

A menos que se explicite lo contrario, los gráficos son obtenidos a partir de mediciones de intervalos de tiempo de $dt = 0.1$ por 9999 intervalos una vez llegada al estado estacionario donde la energía cinética global tiene fluctuaciones alrededor de un valor de equilibrio.

7.3.1. Fuentes de momentum y energía

Los términos de fuente para las ecuaciones de balance, considerando la inyección de energía producto de la vibración de la caja en que están contenidas las esferas, serían:

$$\begin{aligned}
 F_\rho &= 0, \\
 F_{P_x} &= 0, \\
 F_{P_y} &= 0, \\
 F_{P_z} &= \sum_{i,\text{pared p}} \rho_i \Delta(\vec{v}_{i,p}) \cdot \hat{e}_z \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*), \\
 F_E &= \sum_{i,\text{pared p}} \frac{\rho_i}{2} \Delta(v_{i,p}^2) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*).
 \end{aligned}$$

Esto se debe a que los granos chocan con el techo y piso con coeficiente de restitución $\alpha_p = 1$, pero dado que están en constante movimiento la velocidad relativa genera que la velocidad de salida sea distinta en módulo de la velocidad de llegada. La dirección de la velocidad en el plano xy no se ve afectada en este choque dado que la normal de la pared es en la dirección perpendicular a ella y coincide con la normal del grano en el punto de contacto con la pared.

Se espera que en promedio la pared aporte energía cinética, pero puede haber instancias de choque que disminuyan esta cantidad. Esta realidad no es problema para el formalismo dado que la inclusión del término fuente permite dar cuenta de este cambio en la medición de la energía y momentum.

7.4. Campos microscópicos

En esta sección se muestra las cantidades medidas a partir de las ecuaciones de definición de los distintos campos. Se vuelve a mostrar la medición en el tiempo en varias celdas a distinta posición \hat{y} . Es esperable que estas presenten un comportamiento similar para todas las mediciones, aunque por instantes se encuentren en estados distintos.

Para efecto de comparar se presenta un gráfico del promedio y la desviación estándar en el tiempo. El promedio es realizado para mediciones entre los tiempos $t_0 = 100$ y $t_f = 1100$ con intervalos de medición $dt = 0.1$.

7.4.1. Masa

Se integra en la celda del campo densidad definido en (6.2). La integración se realiza en el instante de tiempo t conocidas todas las posiciones de los centros de los discos y sus velocidades instantáneas.

Cada celda tiene un volumen $v = 1.05 \times 1.05 \times 1.85 = 2.05$, donde hay como máximo de masa de $M_{\max} = 2.897$ que se lograría para una configuración compacta hexagonal para los centros de las esferas, con fracción de volumen $\phi = 0.74$ [8]. Es posible que en algún momento se logre una configuración dentro de la celda que alcance este número pero, a menos que se presente en una

estructura sólida, se modifica rápidamente.

Se presentan a continuación mediciones de masa dentro de celdas a distinta posición en el eje \hat{y} en las figuras 7.3.

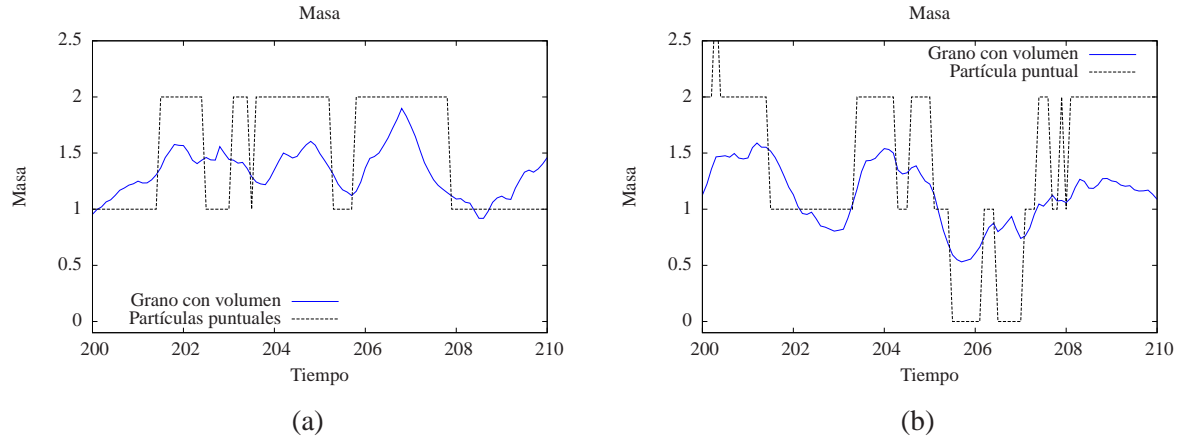


Figura 7.3: Medición de la masa dentro de cada celdas en el tiempo. (a) Masa en celda inferior. (b) Masa en celda altura media.

Estas figuras manifiestan las características esperadas: el cambio de la masa es suave, sus valores se mueven alrededor del promedio global sin acercarse demasiado a los extremos de celda vacía o totalmente compacta discutida (dado que ambos casos son poco probables bajo las condiciones del sistema). La forma en que cambia la masa si se consideran masas puntuales difiere en gran manera a la curva que considera la masa distribuida en todo el volumen del grano. Las celdas expuestas son similares en comportamiento, pero dado que se comparan para un mismo intervalo de tiempo estas no son idénticas en sus curvas.

Los promedios de cada celda son mostradas en la figura 7.4(a), donde se puede apreciar que los valores fluctúan alrededor de la masa promedio global $M_{\text{prom}} = 1.108$. Se puede apreciar una dispersión menor para los promedios obtenidos a partir del esquema que considera granos con volumen. Se puede observar a su vez que los valores de la desviación estándar por celda de la figura 7.4(b) son menores que el promedio local y los valores de la dispersión alcanzados por las partículas puntuales son consistentemente mayores al de la serie de masa considerando granos con volumen. Estos resultados son también observados en el caso bidimensional. Para un mayor número de intervalos de tiempo considerados en el cálculo se observa que los valores del promedio son más cercanos al valor esperado y la desviación disminuye para ambas series de datos.

7.4.2. Momentum \hat{x}

El momentum definido en (6.3) puede medirse por componentes, y ellas son mostradas en las siguientes secciones de forma independiente. En el caso de la dirección \hat{x} se muestra en la figura 7.5 para las tres celdas con posición \hat{y} diferentes.

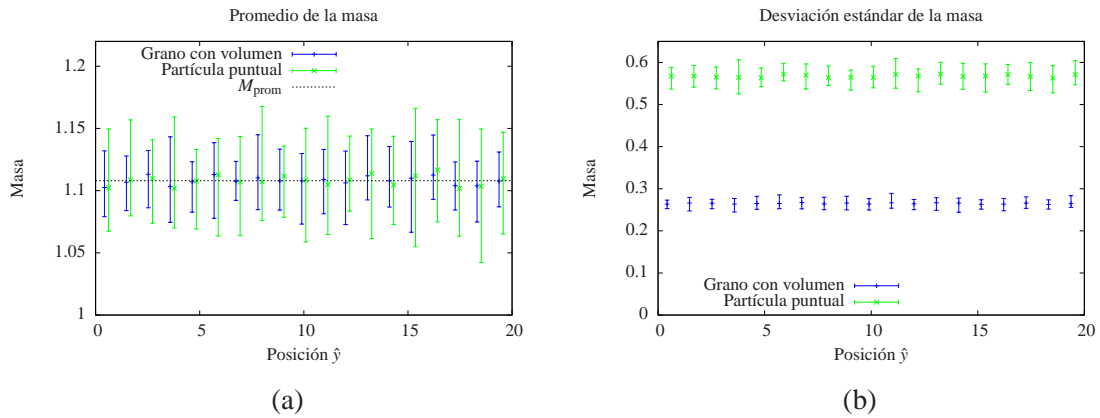


Figura 7.4: Estadísticos de la medición de masa por celda. (a) Promedio de masa. Los extremos de la barra de error marcan el promedio máximo y mínimo alcanzado por las celdas en la misma posición \hat{y} y el centro marca el promedio de los promedios de la masa para celdas que comparten coordenada y . Las barras están levemente desplazadas en el eje de la posición \hat{y} para permitir su comparación. La línea punteada marca el promedio global M_{prom} . (b) Desviación estándar por celda.

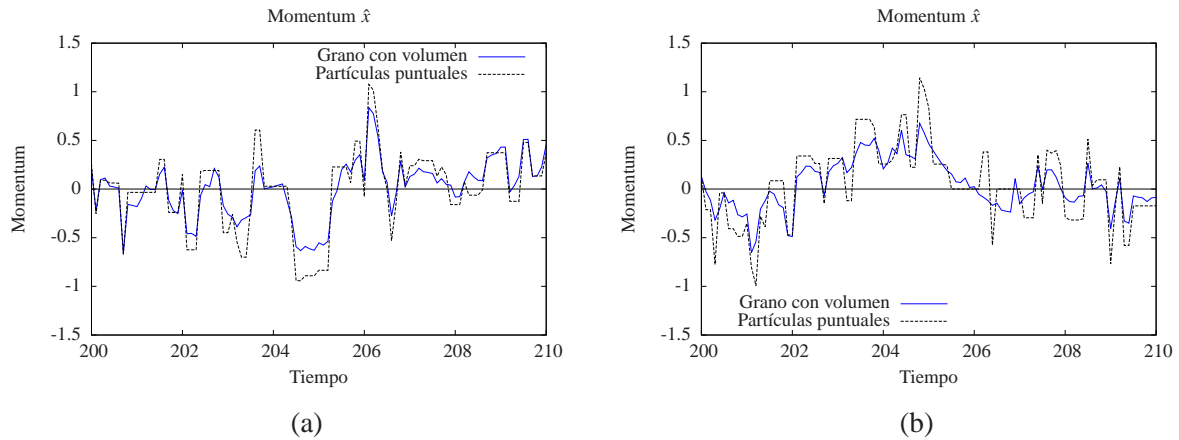


Figura 7.5: Momentum en la dirección \hat{x} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum \hat{x} en celda inferior. (b) Momentum \hat{x} en celda central.

En este sistema se imponen unas condiciones iniciales donde la suma del momento en el plano xy sea nula, y dado que los choques conservan el momento este se mantendrá nulo durante la simulación. Esto nos da a suponer que los valores locales deberían fluctuar alrededor del cero, lo que es observado en la figura 7.5.

Se observa en la figura 7.6 el gráfico del promedio por celda, cuyos valores son pequeños y cercanos a cero, como la desviación estándar, cuyos valores tienen un promedio global estable que disminuye al incorporar más intervalos de medición. La diferencia entre las partículas puntuales y los granos con volumen son solo apreciables para la desviación estándar, donde los menores valores son alcanzados por el segundo. En la observación de estas cantidades se ha reafirmado las

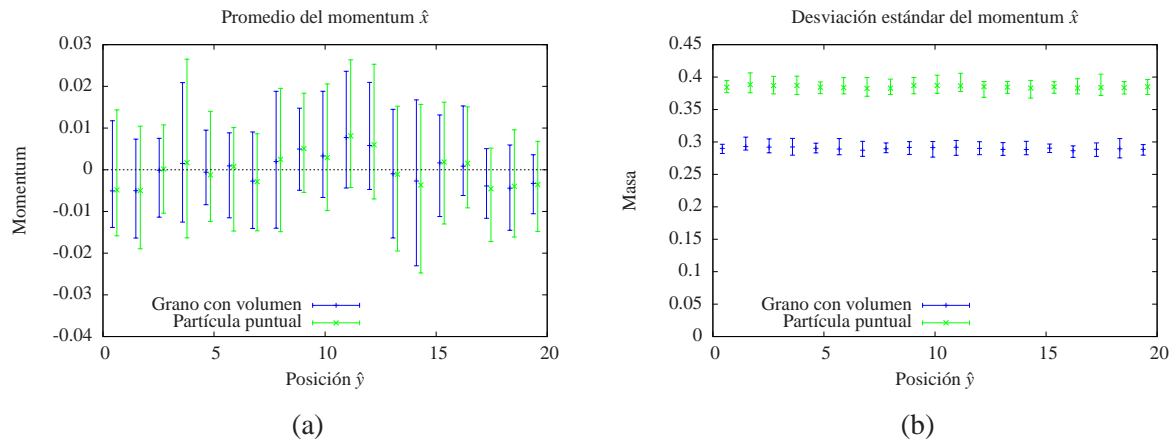


Figura 7.6: Estadísticos del momentum en la dirección \hat{x} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{x} por celda. (b) Desviación estándar del momentum \hat{x} por celda.

predicciones previas a la medición.

7.4.3. Momentum \hat{y}

A partir de la simetría de rotación en el plano xy para los promedios es razonable pensar que los valores del momentum en la dirección \hat{y} tendrán similar comportamiento al momentum ya descrito en la sección anterior. Se observa este comportamiento en la figura 7.7 donde se mide el momentum dentro de las mismas celdas ya mencionadas. Si bien las curvas no tienen coincidencias con las mostradas en la figura 7.5 esto es esperable ya que los valores de las velocidades de los granos involucrados no tienen razón de estar relacionados. Sin embargo, se puede observar que el rango de los valores alcanzados por ambos momentos es similar.

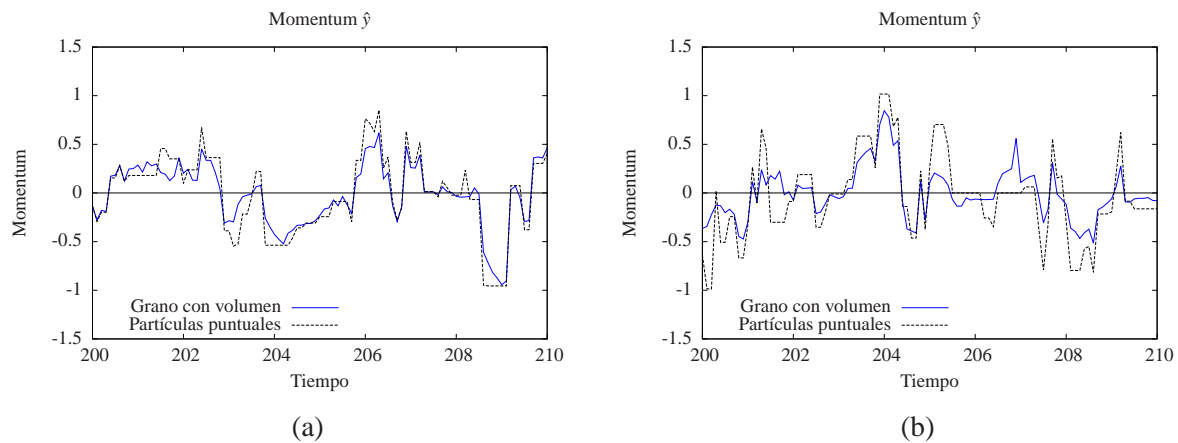


Figura 7.7: Momentum en la dirección \hat{y} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum \hat{y} en celda inferior. (b) Momentum \hat{y} en celda central.

Estas predicciones se extienden también para el promedio y la desviación estándar mostradas en la figura 7.8. En ambos casos es confirmada la idea de la simetría $x \rightleftharpoons y$. Estos valores tienen también un comportamiento similar al caso \hat{x} cuando se aumenta el número de intervalos de tiempo de medición.

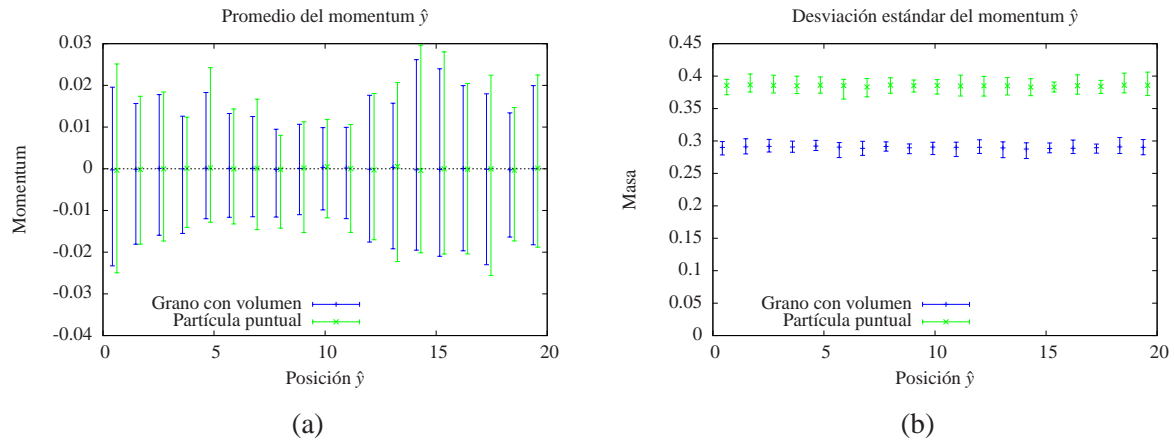


Figura 7.8: Estadísticos del momentum en la dirección \hat{y} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{y} por celda. (b) Desviación estándar del momentum \hat{y} por celda.

7.4.4. Momentum \hat{z}

Dada la constante interacción de los granos con la caja vibrada, tanto en su piso como en el techo, esta dirección de movimiento debería tener un comportamiento muy distinto al momentum las direcciones en el plano xy . Es posible que la frecuencia de vibración de la caja no se manifieste directamente, pero es posible que para algunos granos ambos movimientos se acoplen. La medición del momentum \hat{z} en las tres celdas se muestra en la figura 7.9.

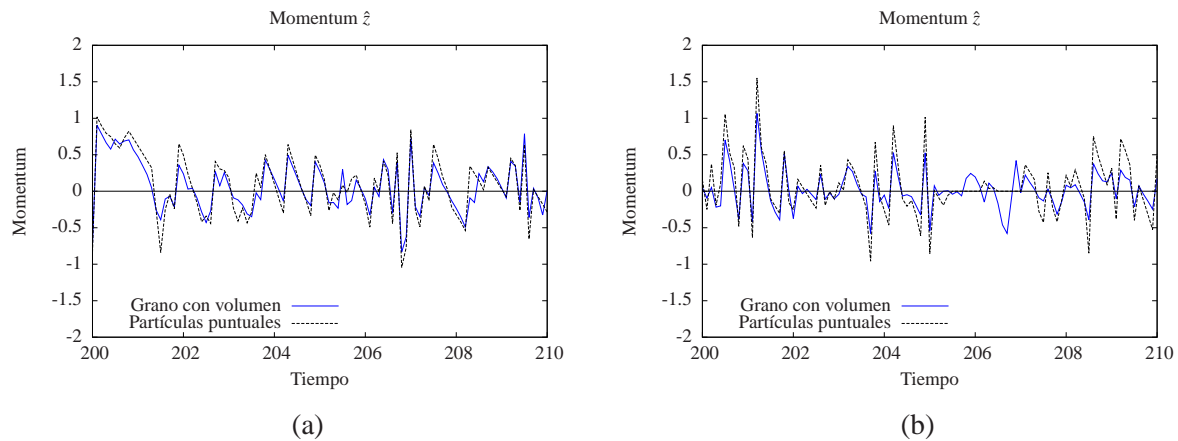


Figura 7.9: Momentum en la dirección \hat{z} medido dentro de cada celda en el tiempo. (a) Momentum \hat{z} en celda inferior. (b) Momentum \hat{z} en celda central.

Localmente se observa un comportamiento similar, con rango de datos levemente menor, a las otras direcciones pero al observar el promedio en la figura 7.10(a) se observa que los valores son menores que los obtenidos para el caso en el plano xy para ambas series de datos. Esto se debe a que una esfera no puede desarrollar una velocidad significativa sin chocar con la pared o el techo de la caja, siendo inmediatamente reflejada con una velocidad similar a la inyectada, cancelándose en promedio. La desviación estándar mostrada en la figura 7.10(b) tiene a su vez valores similares a los mostrados en las secciones anteriores.

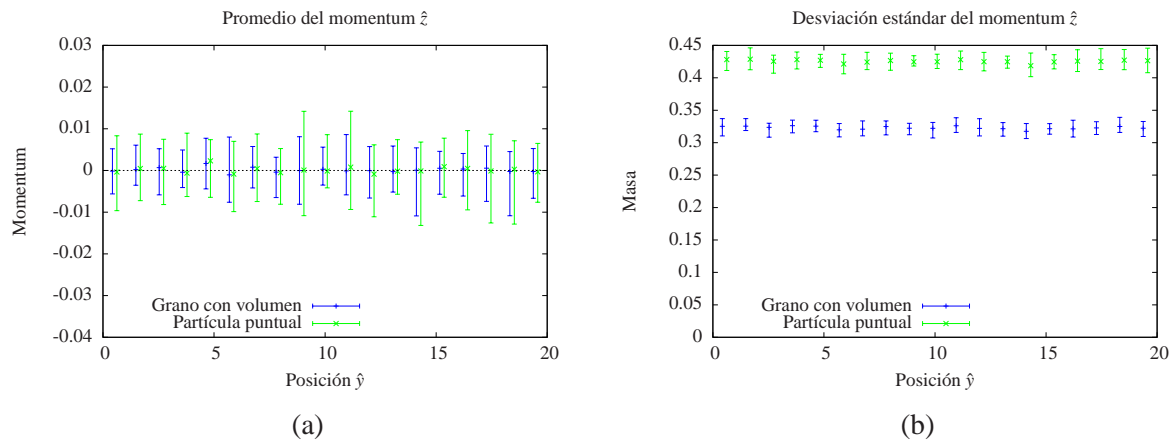


Figura 7.10: Estadísticos del momentum en la dirección \hat{z} medido por celda. (a) Promedio del momentum \hat{z} por celda. (b) Desviación estándar del momentum \hat{z} por celda.

Es necesario por tanto analizar de forma distinta esta última dirección con respecto a las otras. El alcance de esta diferencia está dado naturalmente por la geometría y condiciones de borde, pero a su vez es posible que al buscar los promedios globales del sistema se comporten de manera similar, de modo de posibilitar el uso de algún teorema de equipartición más adelante.

7.4.5. Campo de velocidad vectorial en el plano xy

Se adjunta un gráfico vectorial del campo promediado de momentum y velocidad. A pesar de las simetrías del sistema por la naturaleza propia de los sistemas granulares, se esperan quiebres de simetría y la formación de inhomogeneidades en el plano xy .

Se observa la presencia de inhomogeneidades en distintas regiones de la caja. Estas tienen valores de velocidad pequeños, y las diferencias entre regiones se desvanecen aun más cuando se considera una mayor cantidad de intervalos al promediar. Este comportamiento colectivo restringido en el tiempo no es posible de ser predicho por las ecuaciones de balance ‘a priori’ dado que en el plano no existe una asimetría o gradiente involucrado. Es posible, sin embargo, medirlo con precisión con el método desarrollado en el capítulo anterior.

7.4.6. Energía cinética

Es posible, a partir de la definición (6.4), medir la energía cinética dentro de cada celda en cada instante de tiempo. Esta cantidad es mostrada en la figura 7.12 para las dos celdas elegidas.

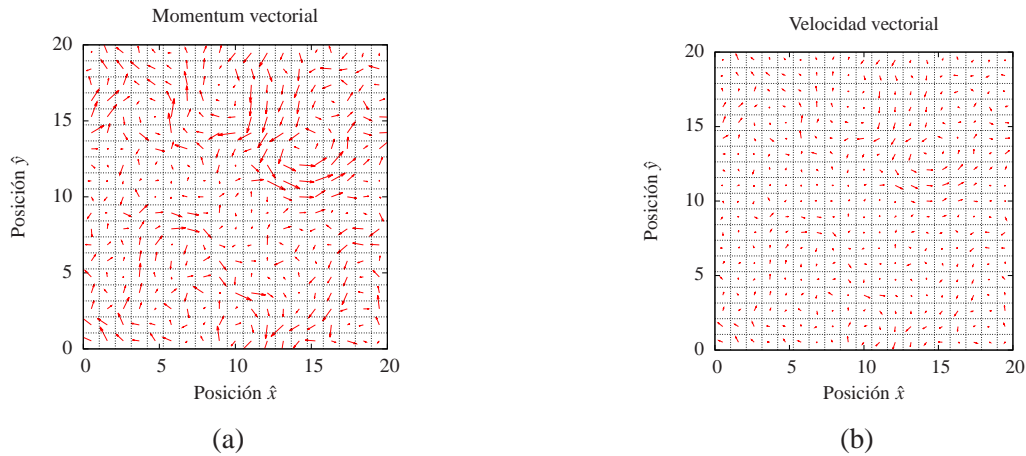


Figura 7.11: Campos vectoriales en el plano xy promediados en el tiempo dentro de cada celda para el sistema de caja baja vibrada verticalmente. (a) Campo de momentum en el plano xy . (b) Campo de velocidad en el plano xy .

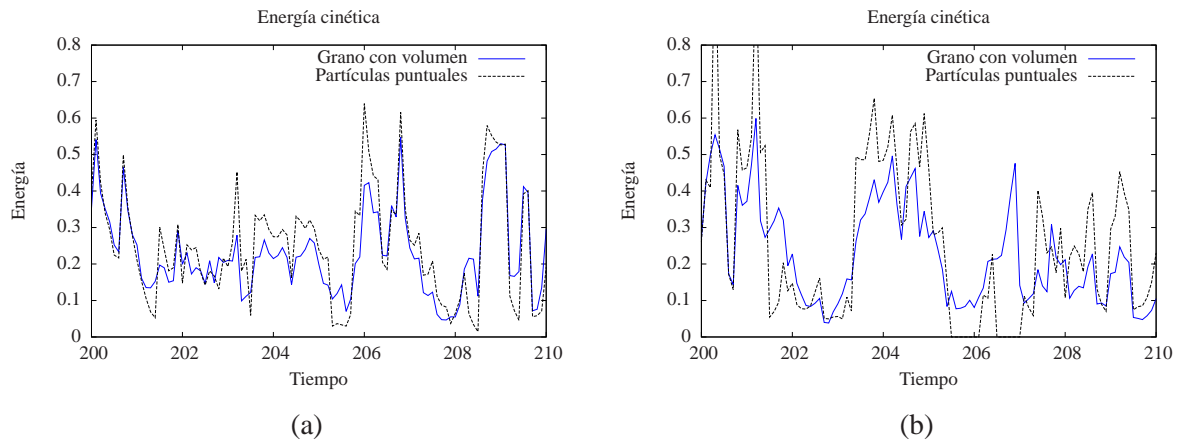


Figura 7.12: Energía cinética medida dentro de cada celda en el tiempo. (a) K_{3D} en celda inferior. (b) K_{3D} en celda central.

Se observan curvas que pueden cambiar rápidamente, esto es debido a que las colisiones ocurren en un intervalo infinitesimal de tiempo. A pesar de ello es posible observar que la energía no llega a ser nula, dado que para ello es necesario que la celda esté completamente vacía, o se dé la casualidad de que los granos sobre ellas tengan velocidad nula.

El límite superior de la energía cinética, si bien teóricamente no existe dado que se puede concentrar la energía de un sistema en un punto en un caso muy poco probable, es aproximadamente $K_m \approx 1.8$ para ambas series de datos. Este valor es raramente alcanzado, y el promedio mostrado en la figura 7.13(a) es bajo comparado con él. La desviación estándar apoya esta idea, dado que su valor es menor al promedio para ambas series y por ende los valores alcanzados están por lo general cerca del promedio. Estas ideas apuntan ciertamente a un sistema estable en un estado estacionario.

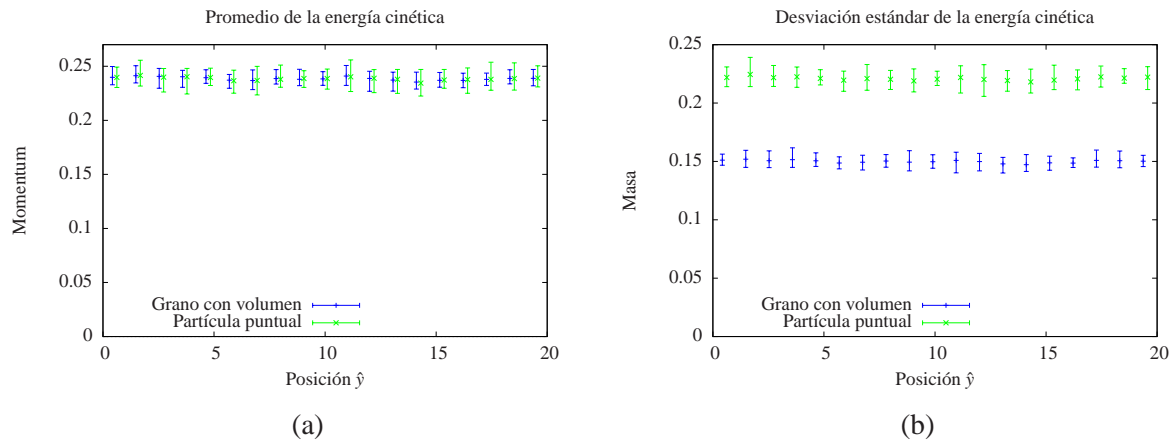


Figura 7.13: Estadísticos de la energía cinética medida por celda. (a) Promedio de K_{3D} por celda. (b) Desviación estándar de K_{3D} por celda.

La diferencia en la desviación estándar entre los granos con volumen y las partículas puntuales es similar a los casos ya observados.

7.4.7. Energía potencial

La energía potencial gravitacional presente en el sistema y definida en (6.5) se mide también en la simulación de forma independiente a la cinética. Dado que esta no cambia al ocurrir un choque entre granos o de uno de ellos con el techo o pared, se puede observar en la figura 7.14 que al medirla en el tiempo dentro de una celda se observa un cambio gradual dentro de la celda.

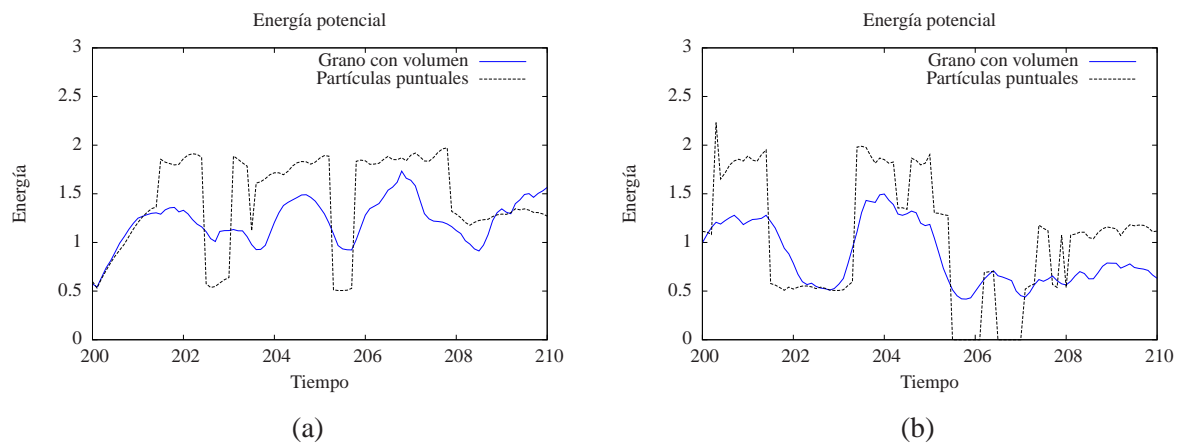


Figura 7.14: Energía potencial medida dentro de cada celda en el tiempo. (a) U_{3D} en celda inferior. (b) U_{3D} en celda central.

Este tipo de energía sí tiene un máximo, en caso que todos los granos estén pegados al techo. Ese caso es extraño, pero posible dada la geometría de la caja. Este hecho, sin embargo, no nos permite afirmar que el promedio de cada celda será similar en toda la caja. Esto se puede observar en la figura 7.15(a) donde el rango de valores está bien acotado. La desviación estándar, de tamaño

menor al promedio, reafirma esta idea y nos indica que los valores por lo general se encuentran cerca del promedio. Las comparaciones entre series en el mismo gráfico son idénticas a todos los campos observados anteriormente.

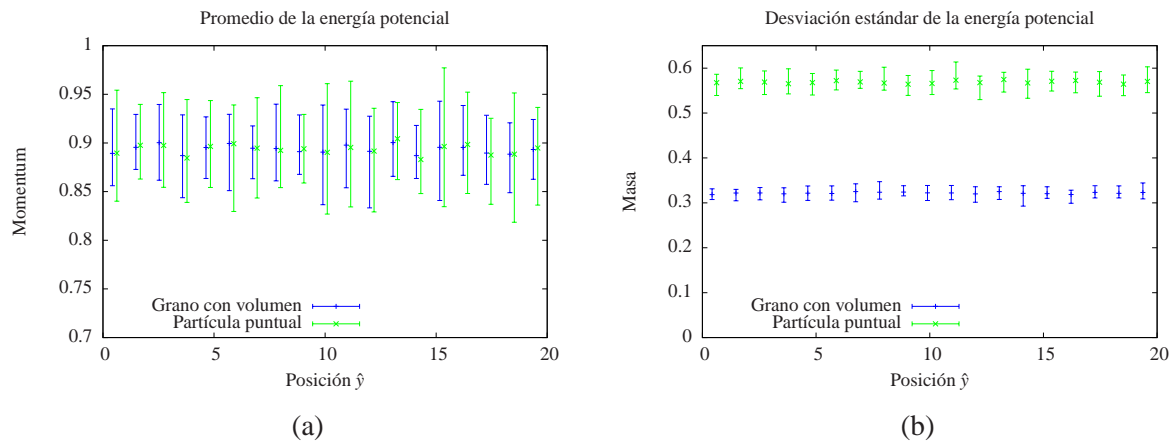


Figura 7.15: Estadísticos de la energía potencial medida por celda. (a) Promedio de U_{3D} por celda. (b) Desviación estándar de U_{3D} por celda.

7.4.8. Comentarios generales de los campos hidrodinámicos

Los campos mostrados hasta ahora se presentan de forma que es posible observar que estos permiten describir el estado del sistema a través de los valores locales de ellos. Es importante destacar que un promedio temporal local no tiene en principio que coincidir con un promedio global temporal, dado que es natural que de estos sistemas disipativos surjan espontáneamente inhomogeneidades.

A su vez, el hecho de poder separar las dos energías y calcular sus valores de forma independiente permite separar las causas del cambio de energía total y nos ayudan a entender de qué forma ocurren los cambios durante los choques sin haber analizado aún las ecuaciones de balance que rigen estos movimientos.

La diferencia entre la descripción propuesta en este trabajo (granos con volumen) y la usualmente usada (partículas puntuales) es evidente y, dado que no aumenta en demasía el tiempo de cálculo de la simulación, parece evidente que es una mejora de la descripción local del estado de cada campo microscópico.

7.5. Temperatura en el sistema

La temperatura granular definida en (6.33) basada en la velocidad fluctuante se ha medido en las simulaciones tomando el promedio local de la velocidad dentro de cada celda. De esta forma se obtiene una medición de la temperatura por cada celda. Esta se muestra en la figura 7.16.

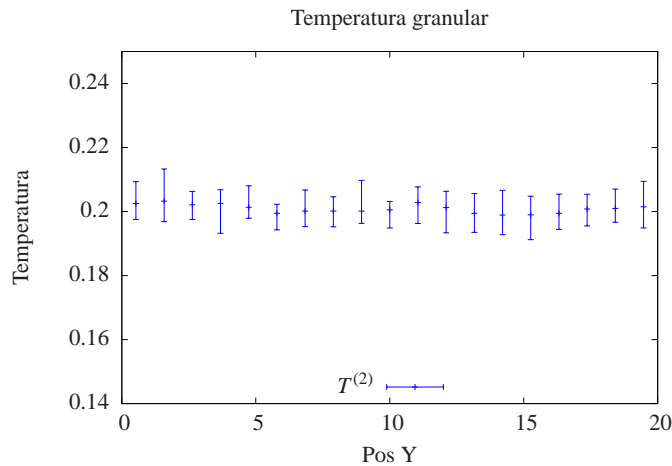


Figura 7.16: Temperatura total por cada celda calculada promediando en el tiempo.

En ella se puede observar que en promedio los valores se encuentran alrededor de 0.2. Es esperable, y observable, que al extender la medición a un tiempo mayor la dispersión de los datos disminuya pero el promedio de ellos no cambie significativamente, esto dado que el sistema se encuentra en un estado estacionario en promedio homogéneo.

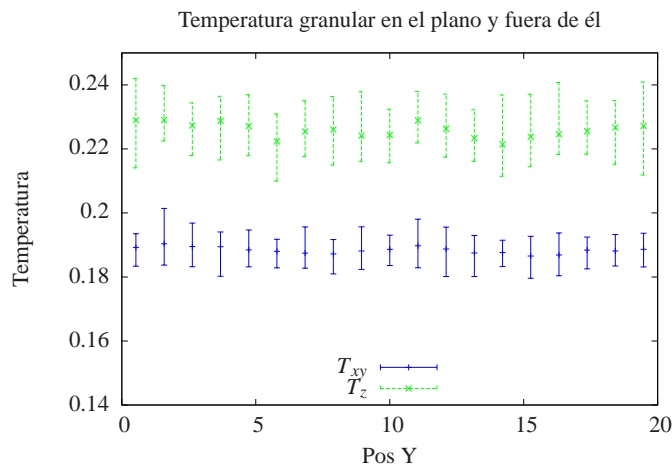


Figura 7.17: Temperatura mostrada en el plano horizontal y la dirección vertical medidas independientemente.

Se ha calculado, de la misma manera, la temperatura definida en el plano xy y la temperatura vertical, mostradas en la figura 7.17. En ambas series de datos se observa la misma estabilidad de los valores promediados, aunque tengan un valor del promedio global distinto. Se observa que la temperatura en la dirección \hat{z} es mayor a la observada en el plano horizontal, y esto puede tener relación con la frecuencia de vibración de la caja. Es esperable que ambas temperaturas respondan de distinto modo a los parámetros del sistema y por ello esta herramienta ayuda a describir cada dirección de forma independiente y observar la influencia de las simetrías del sistema y de cada método de inyección de energía.

7.6. Ecuaciones de balance

Cada una de las ecuaciones de balance de masa (6.7), momentum (6.14) y energía (6.21) serán analizadas por cada uno de sus componentes independientemente medidos en una de las celdas del espacio. Para ilustrar la validez de estas ecuaciones se ha elegido una celda a altura media, pero esta no tiene ninguna característica especial que la distinga del resto dada la simetría de traslación en el plano xy .

Es esperable que los términos de la mano derecha sean equivalentes a la suma de los términos de la izquierda con un error numérico asociado. No se ha desglosado el término inelástico, pues se ha observado que tiene valores pequeños, de modo que estas ecuaciones son expresadas en función de \mathbb{P}^{col} .

7.6.1. Balance de masa

Se define en la ecuación de balance de masa dos partes

$$\Delta\rho = \sum_i \rho_i \mathbb{I}_{celda}(\vec{r}_i(t)) - \sum_i \rho_i \mathbb{I}_{celda}(\vec{r}_i(t-dt)) ,$$

$$-\nabla \cdot ((\rho)V) = dt \sum_i \rho_i \vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{celda}(\vec{r}_i(t)) .$$

De esta forma ambos elementos tienen unidades de masa. Para obtener esta versión final se ha considerado que las mediciones están separadas por un tiempo dt de modo que la derivada temporal queda discretizada sin la posibilidad de un cálculo más exacto, sino disminuyendo este tiempo. Los resultados se ven en la figura 7.18.

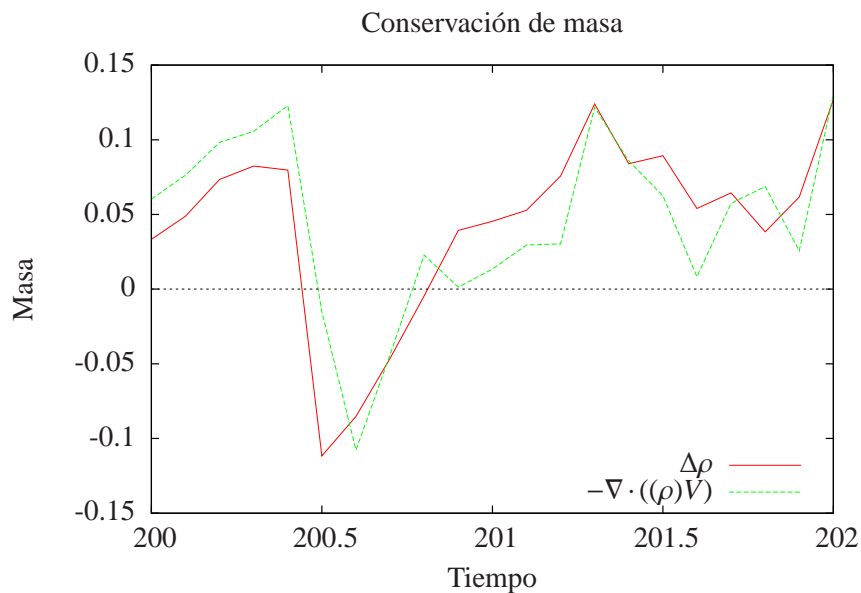


Figura 7.18: Balance de masa desglosado por término

A partir de este gráfico se puede afirmar que ambas curvas tienen una forma general similar, y hay instantes donde coinciden de manera precisa, pero no es cierto para la totalidad de los puntos. En la mayoría de los casos existe un error asociado a la curva del término del lado derecho. Esto se debe a que este hace una predicción del cambio a partir de la condición del sistema en el instante de tiempo t , pero entre $t - dt$ y t pueden ocurrir una serie de choques que cambien la condición anterior de manera significativa (por ejemplo, cambiando la velocidad completamente).

A pesar de ello, si se refina el tiempo disminuyendo dt se logra acercar ambas curvas lo suficiente para afirmar que coinciden numéricamente de forma similar a lo observado para el caso bidimensional.

7.6.2. Balance de momentum

La ecuación de balance de momentum se analiza por cada componente por separado. Para ello se define:

$$\begin{aligned}\Delta P_\alpha &= \sum_i \rho_i v_{i,\alpha} \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) - \sum_i \rho_i v_{i,\alpha} \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t-dt)) , \\ -\nabla \cdot ((P_\alpha)V) &= dt \sum_i \rho_i v_{i,\alpha} (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))) , \\ -(\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}})_\alpha &= \sum_{ij} \rho_i (\Delta \vec{v}_{i,j} \cdot \hat{e}_\alpha) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t^*)) , \\ F_g \hat{z} &= -\hat{z} g dt \sum_i \rho_i \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) .\end{aligned}$$

Es claro que este último solo aparecerá en la ecuación de la dirección \hat{z} junto al término fuente F_{P_z} . El tercer término es medido en el momento en que ocurre el choque, pues en el tiempo t^* está bien definido el término $\Delta \vec{v}_{i,j}$.

El resultado de esta medición para la dirección \hat{x} se muestra en la figura 7.19, donde se puede apreciar que el cambio dentro de la celda tiene es principalmente debido a los choques (relacionado con $-(\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}})_x$). El término predictor del cambio debido al movimiento de los granos dentro de la celda $-\nabla \cdot ((P_x)V)$ es de menor tamaño en general con respecto a los otros dos. Estas diferencias permiten observar que ellos explican el cambio de momentum en todo momento.

Estas características de cada elemento de la ecuación de balance son extensivos a la dirección \hat{y} , pero esto no es una sorpresa ya que reafirma las simetrías presentes en el plano xy , y la medición de cada componente de la ecuación de balance se observa en la figura 7.20.

Se ha graficado en la figura 7.21 todos los términos de la ecuación de balance de momentum \hat{z} . Para analizar la dirección vertical es necesario incorporar a la fuerza de gravedad. Esta está presente en todo momento pero depende directamente de la masa, que cambia por el movimiento en el plano horizontal, de modo que no es posible separar del todo esta dirección de las otras en el plano. Esta fuerza F_g tiene valores negativos de módulo mayor al que se observa para el término dependiente del movimiento $-\nabla \cdot ((P_z)V)$, lo que se observa en la figura 7.21(b). En este caso los términos de choque, tanto con las paredes F_{P_z} (figura 7.21(b)) como entre granos $-(\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}})_z$ (figura 7.21(a)), explican gran parte del cambio de momentum dentro de la celda. Ambos términos fluctúan entre

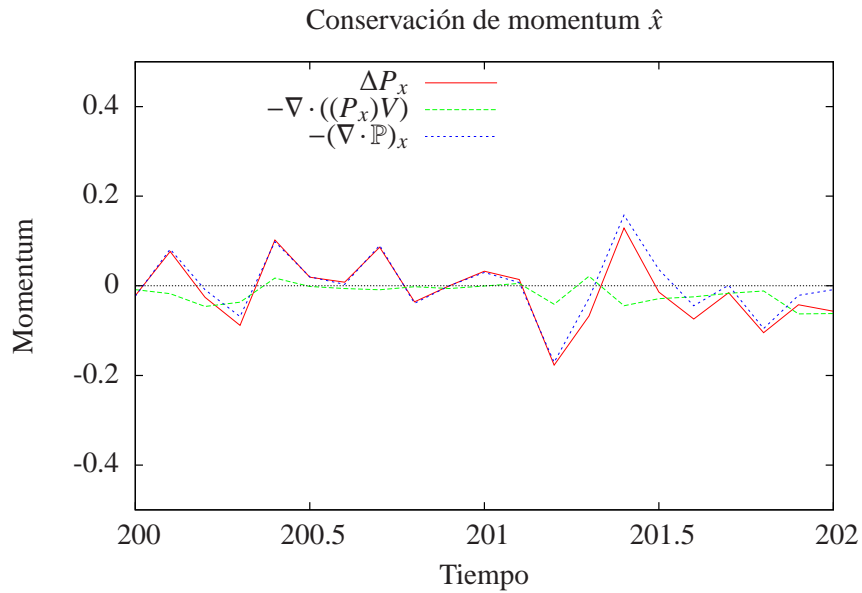


Figura 7.19: Balance de momentum en la dirección \hat{x} desglosado por término

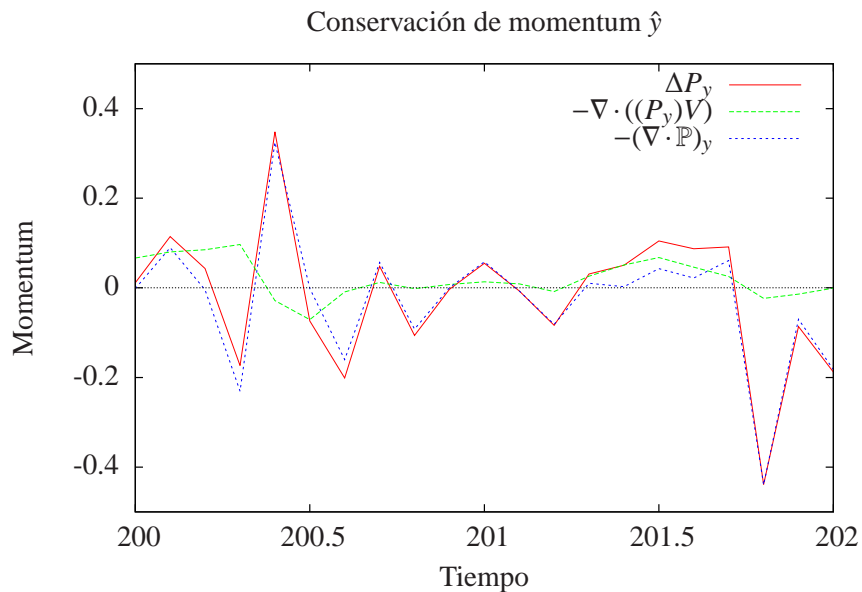


Figura 7.20: Balance de momentum en la dirección \hat{y} desglosado por término

valores positivos y negativos, y no hay una relación directa aparente entre ellos.

En definitiva, se ha observado cómo la ecuación de balance de momentum, en sus distintas direcciones, logra predecir, con un error numérico asociado a la discretización temporal, las causas del cambio local de momentum. La principal causa observada, dado que el sistema es denso y ocurre una gran cantidad de choques, es el choque de los granos entre ellos y con las paredes no periódicas.

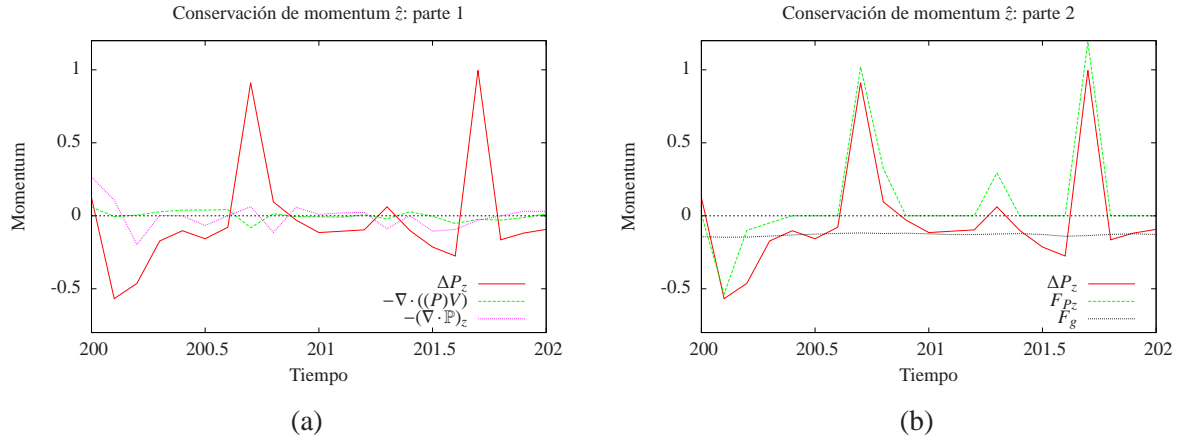


Figura 7.21: Elementos de la ecuación de balance de momentum \hat{z} . Se presentan en dos gráficos para observar independientemente cada curva, manteniendo el término del lado izquierdo ΔP_z como referencia en ambos casos. (a) Términos de colisiones entre granos $-(\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}})_z$ y de transporte de momentum por el fluido $-\nabla \cdot ((P_z)V)$ comparados con el término de mano izquierda ΔP_z del cambio de momentum \hat{z} . (b) Términos fuente por colisiones con las paredes F_{P_z} y fuerza de gravedad F_g comparados con el cambio de momentum \hat{z} .

7.6.3. Balance de energía

La ecuación de balance de energía es la más compleja de este conjunto de ecuaciones ya que involucra la incorporación de la energía potencial gravitacional a la cinética, con sus respectivos términos debido al campo de velocidad local. El término de cambio debido a choques entre granos solo involucra cambio en la velocidad de la esfera, por lo que solo afecta a la energía cinética. Cada término está definido a partir de la ecuación 6.26 como sigue:

$$\begin{aligned} \Delta K &= \sum_i \left(\frac{\rho_i v_i^2}{2} \right) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) - \sum_i \left(\frac{\rho_i v_i^2}{2} \right) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t-dt)) , \\ \Delta U &= \sum_i g \rho_i z_i(t) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) - \sum_i g \rho_i z_i(t) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t-dt)) , \\ -\nabla \cdot ((K)V) &= dt \sum_i \frac{\rho_i (\vec{v}_i)^2}{2} (\vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))) , \\ -\nabla \cdot ((U)V) &= dt \sum_i \rho_i g (z_i(t) \vec{v}_i \cdot \vec{\mathbb{H}}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t)) - (\vec{v}_i \cdot \hat{z}) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t))) , \\ -V \cdot (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^a) &= \sum_{ij} \Delta \left(\frac{\rho_i \vec{v}_{i,j}^2}{2} \right) \mathbb{I}_{\text{celda}}(\vec{r}_i(t^*)) . \end{aligned}$$

En la figura 7.22 se muestra cada término medido dentro de la celda. En la primera figura se muestran las curvas relacionadas con la energía cinética junto a los choques entre granos y en la segunda los términos dependientes de la energía potencial y la fuente de energía producto de los choques con las paredes de la caja oscilante. Se ha evaluado el término de choques en el instante en que ocurren por las razones expuestas para el balance de momentum.

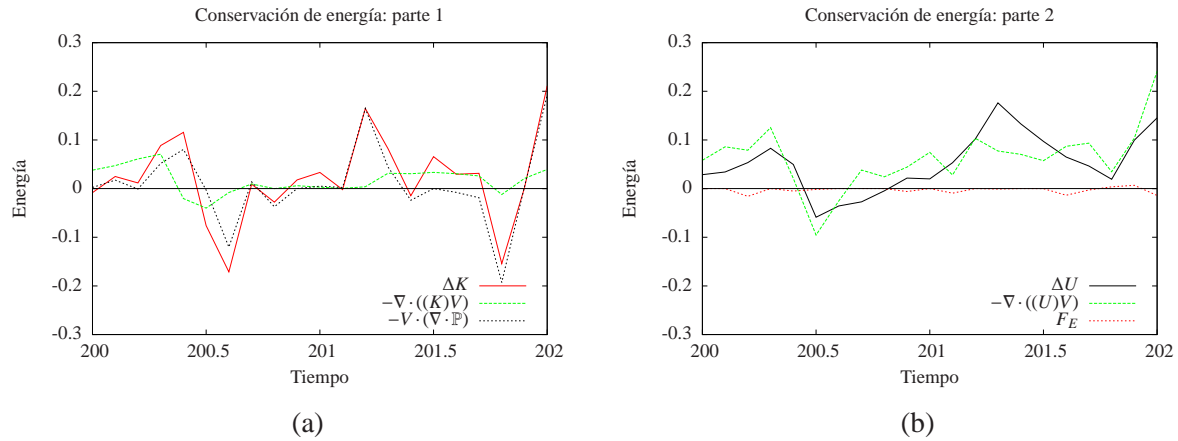


Figura 7.22: Términos de la ecuación de balance de energía medidos en una celda en el tiempo. (a) Términos relacionados a la energía cinética y los choques entre granos. (b) Términos dependientes de la energía potencial y los choques con las paredes.

Se puede observar de la figura 7.22(a) que la curva ΔK sigue, en principio, la forma que toma el término de choques $-V \cdot (\vec{V} \cdot \mathbb{P}^{col})$. Las diferencias aparecen cuando el término de transporte de energía cinética por la velocidad local $-\nabla \cdot ((K)V)$ son importantes, pero no explica todos los cambios, pues la ecuación de balance de energía cinética (6.19) cuenta con un término en común con la energía potencial.

Observando la figura 7.22(a) se observan las curvas relacionadas con U . Ambas curvas parecen tener una forma similar en general, aunque no coinciden todos sus picos. Existen instantes donde $-\nabla \cdot ((U)V)$ supera en tamaño a ΔU y momentos donde ocurre lo contrario, pero es natural pensado en que el término de intercambio entre ambos tipos de energía $+(g\rho_{3D}\hat{z}) \cdot \vec{V}_{3D}$ no es explicitado en este caso. La diferencia ciertamente apunta a que este último tiene valores no nulos y significativos.

Se ha observado que el cambio la energía total puede explicarse por cada uno de los términos de la ecuación de balance y que la diferencia entre el lado izquierdo y el lado derecho disminuye con la discretización temporal.

En definitiva, ambos cambios de energía pueden ser explicados mediante sus términos individuales, de modo que se ha podido identificar claramente la fuente de este en todo momento.

7.7. Tensor de presión

Dentro del formalismo de han definido distintos tensores de presión: la presión colisional (6.35), cinética (6.37) y total (6.38). Se han medido cada uno de ellos de forma independiente y se muestran los resultados.

Se presentan en las figuras de esta sección solo el promedio del promedio temporal de cada componente para las celdas de la misma altura. Se incluye como extremos de la barra de error los valores máximos y mínimos observados en los promedios de cada componente.

7.7.1. Tensores de presión colisional, cinética y total

El tensor de presión cinético tiene en todas sus componentes mediciones no nulas. Se han agrupado algunas componentes similares, dada la simetría en el plano xy observada en la sección anterior y que se replica para estos tensores. De la misma forma en que se observó en el caso bidimensional, el tensor de presión cinética es mucho más grande que la presión colisional, de modo que se muestran ambas y la presión total coincidirá en mayor medida con el tensor de presión cinética.

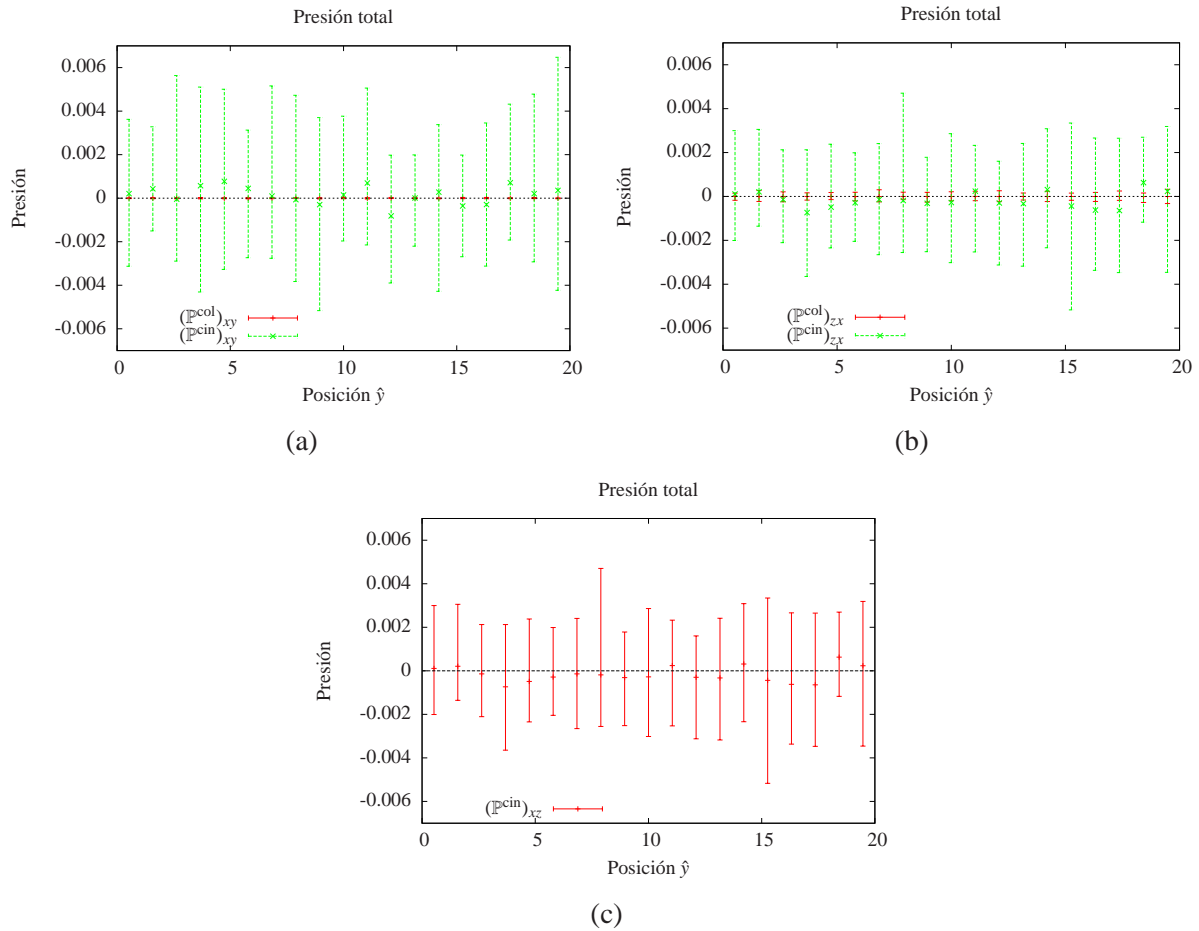


Figura 7.23: Promedio por altura de medición de la presión colisional \mathbb{P}^{col} y cinética \mathbb{P}^{cin} para las componentes fuera de la diagonal. (a) Componente xy (similar a yx). (b) Componente zx (similar a zy). (c) Componente xz (similar a yz).

Se observa en la figura 7.23 que los valores y las dispersiones son muy similares para las componentes de ambos tensores. Por simetría en la definición del tensor de presión cinética (6.37) las componentes xz y zx son idénticas.

Para las componentes diagonales de estos tensores se construye la figura 7.24. Se observa claramente la diferencia del promedio para las componentes en el plano y la componente zz . Esta observación se explica porque el mecanismo de inyección de energía afecta solo a la última componente. El valor en si puede diferir si se cambian los parámetros de la vibración de la caja y podría

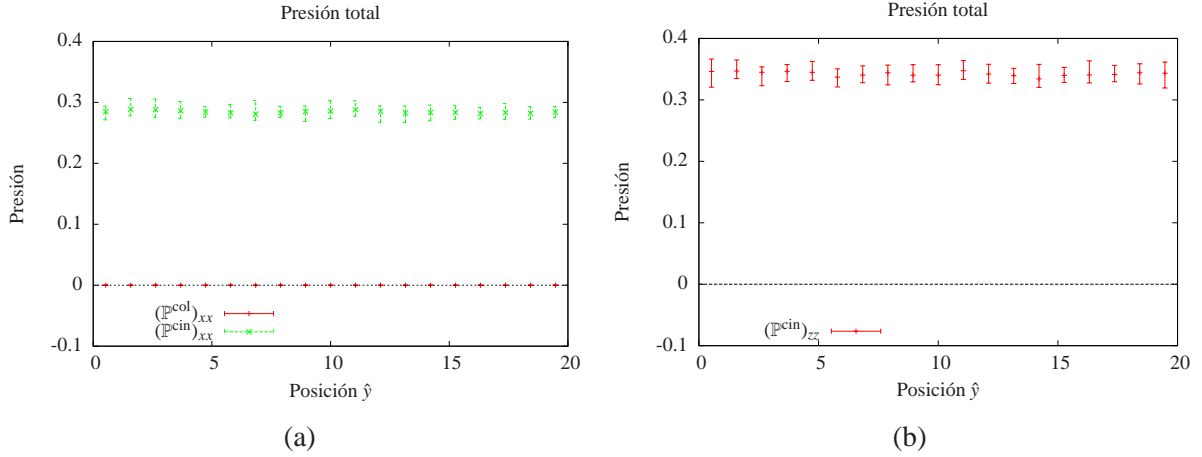


Figura 7.24: Promedio por altura de medición de la presión colisional \mathbb{P}^{col} y cinética \mathbb{P}^{cin} para las componentes en la diagonal. (a) Componente xx (similar a yy). (b) Componente zz .

darse el caso en que la componente en el plano sea mayor a la vertical.

En definitiva, se ha descompuesto el momentum en sus diversas partes colisional y cinética, se ha medido de forma independiente y estos valores ayudan a identificar la fuente de la presión en el sistema.

A partir de estos resultados se puede medir la presión escalar hidrodinámica:

$$p = \frac{1}{3} \text{Tr}(\mathbb{P}) = \frac{1}{3} (\mathbb{P}_{xx} + \mathbb{P}_{yy} + \mathbb{P}_{zz}) , \quad (7.1)$$

cuya medición se muestra en la figura 7.25, junto a $nT^{(2)}$. Este gráfico es una motivación para encontrar una ecuación de estado, que no se puede comparar directamente con la usada en el caso bidimensional. Estas ideas sugieren que se requiere de mayor estudio sobre la medición de la presión colisional en el sistema y otros mecanismos de inyección de energía, pero las herramientas descritas en este trabajo son auspiciosas.

7.7.2. Cálculo de la viscosidad de cizalle η

Se ha medido el coeficiente de viscosidad usando la estrategia de Green-Kubo explicitado en (3.29) con el estimador insesgado (3.27) definido en el capítulo 3. Estas definiciones son extensivas a tres dimensiones sin cambios. Se ha hecho uso de las componentes fuera de la diagonal del tensor de presión total \mathbb{P} .

En la figura 7.26 se ha graficado η para cada componente no diagonal del tensor de presión, divididas en dos grupos. Se ha desplazado levemente de forma horizontal los valores para ayudar a la comparación. Se observa la misma tendencia observada en las simulaciones bidimensionales: el tensor \mathbb{P} propicia valores cercanos a cero y en algunos casos de valor negativo. Esta consecuencia es natural dadas los valores del tensor utilizado, dado que los valores fuera de la diagonal fluctúan en torno a cero y tienen promedio muy cercano a cero.

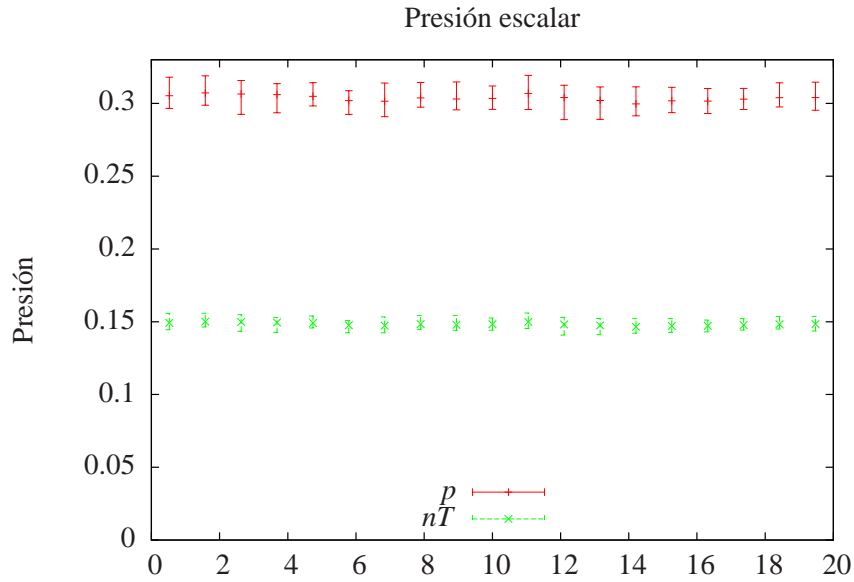


Figura 7.25: Medición de la presión escalar comparada con los otros componentes de la ecuación de estado usual.

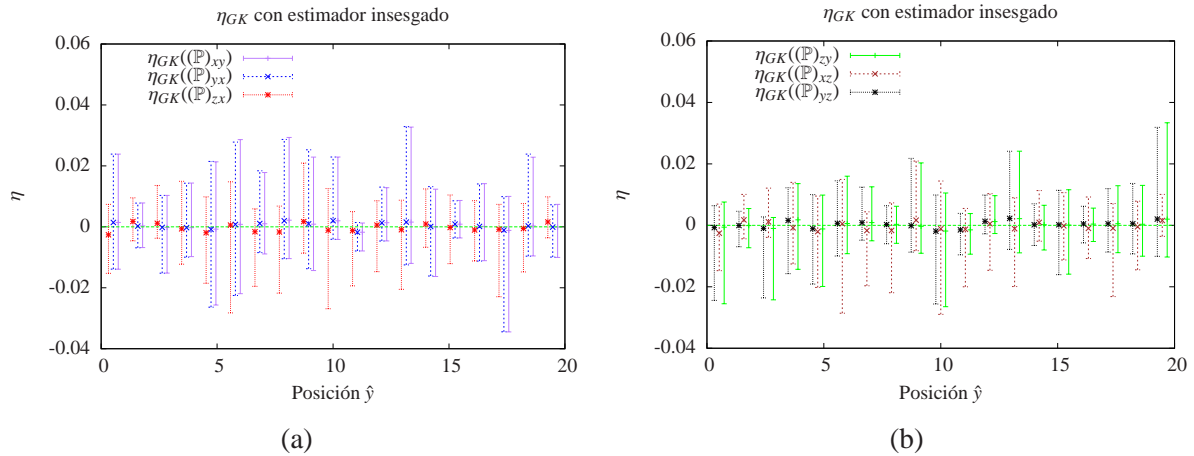


Figura 7.26: Cálculo del coeficiente de viscosidad de cizalle para distintos componentes del tensor de presión total. Se desplazan leve y horizontalmente las componentes primera y tercera de cada gráfico para ayudar a la comparación. (a) Medición de η con estimado incesgado y componentes xy , yx y zx . (b) Medición de η con estimado incesgado y componentes zy , xz e yz .

El gráfico anterior tiene su análogo en el sistema bidimensional, pero en el caso tridimensional se agregan los componentes zx , xz , zy y yz . Ellos permiten el cálculo de sus respectivos η .

Existe la sospecha fundada de que la medición del tensor de presión colisional no es fidedigno con la medición y por lo tanto se afecta directamente el cálculo del coeficiente de viscosidad de cizalle η . Este problema se discutirá en detalle en el capítulo 8.

7.8. Resumen del capítulo

Se han medido dentro de simulaciones numéricas llevadas por eventos (Event Driven) los campos microscópicos locales definidos en el capítulo 7 para un sistema tridimensional. Se ha observado que se comportan de manera razonable bajo las condiciones de colisiones instantáneas y conservación de momentum en los choques. Se detallaron las mediciones y su cambio temporal suave en comparación a la distribución delta de Dirac para partículas puntuales. Se ha observado a su vez un promedio local en ambas mediciones similar, con un menor rango de dispersión para el promedio y un menor valor en general para el caso de granos con volumen.

Se ha medido cada término definido dentro de las ecuaciones de balance por separado y comparado los resultados para la masa, momentum y energía, tanto cinética como potencial. Se constató que el comportamiento del sistema para este esquema valida las ecuaciones y es útil su aplicación para comprender el cambio temporal de cada campo definido dentro de las celdas de medición.

Se midieron las matrices de presión colisional (6.35), cinética (6.37) y total (6.38). Se estableció una jerarquía de tamaños entre ellas y se utilizó el tensor de presión total para medir el coeficiente de viscosidad de cizalle. El valor de este coeficiente no coincide con la expectativa teórica, análogamente al caso bidimensional, y es necesario proponer mejoras en la medición de este valor para que el tensor de presión fuera de la diagonal no oscile en torno a cero y pueda reproducir resultados previos respecto a la ecuación de estado.

Capítulo 8

Explorando ideas sobre la presión

8.1. Introducción

Se ha observado, en los capítulos 4, 5 y 7, que el tensor de presión definido para dos y tres dimensiones es insuficiente para, al sumarlo con la presión cinética, dar cuenta de la presión escalar en el sistema. En este capítulo se explorará un ejemplo sencillo donde la definición entregada en este trabajo no permite coincidir con las fuerzas aplicadas sobre el sistema a través de las paredes y se propone una modificación que tiene la potencialidad de solucionar el problema, pero que tiene dificultades analíticas y físicas.

8.2. El problema de la presión

Se ha comprobado en los capítulos 4.8, 5.7 y 7.7 que la definición de la presión no logra una coincidencia con resultados conocidos teóricos y experimentales al observar la presión escalar en la ecuación de estado. Esta diferencia se presenta en todos los casos como una subestimación del tensor de presión, y en particular, de su parte colisional.

Esta subestimación de la presión, identificable en las figuras 4.27, 5.7 y 7.25, afecta directamente al cálculo de los coeficientes de viscosidad de cizalle η y volumen ζ , por lo que sería de gran utilidad poder resolverlos y llegar a describir al sistema de granos en movimiento no solo como un fluido sino también conocer su ecuación de estado, dependencias y propiedades análogas a un fluido newtoniano.

8.3. Presión sobre un pistón

Para entender el problema de la presión se elegirá el siguiente ejemplo bidimensional: Se tiene una caja cuadrada en un ambiente sin gravedad y que contiene n granos de igual tamaño y masa. Tres de las paredes son térmicas con la misma temperatura T . La cuarta pared será reemplazada por un pistón, que en la práctica no se moverá pero que permitirá medir la presión que afecta a esa pared a través de la fuerza $\vec{F}(t)$ necesaria para mantener al pistón en su lugar. Esta idea se muestra en la figura 8.1. En principio el coeficiente de restitución de los choques entre granos será $\alpha \leq 1$ y de granos con la pared será $\alpha_p = 1$.

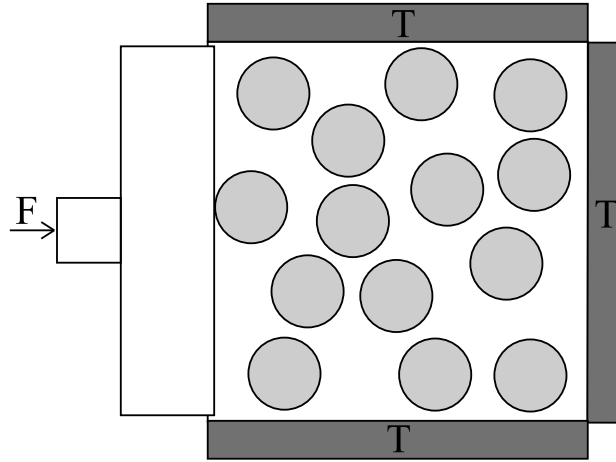


Figura 8.1: Sistema con un pistón y tres paredes térmicas.

Si se analiza el choque de un solo grano contra el pistón, se puede identificar la fuerza que ejerce el grano al chocar, pues es la misma que experimenta al cambiar de momentum en su trayectoria. Se podría simplemente calcular la presión que genera este choque al considerar el área total del pistón. Si se quiere medir una presión local en las distintas regiones del pistón, se podría dividir la extensión de este y asociar cada choque a una de estas secciones ponderando la cantidad de masa en cada región.

Se podría pensar en caracterizar los choques entre el pistón y los granos de una forma menos directa: usando una idea análoga al método de las imágenes de electrodinámica. Es posible imaginar que el pistón no es una barrera física que no permite atravesar a los granos, sino que del otro lado del pistón existen granos de igual masa y tamaño que, al chocar con los granos reales, no permiten al grano real atravesar el límite que marca el pistón. Esta idea se muestra en la figura 8.2. De esta forma, el cambio de momentum experimentado por el grano virtual puede ayudar a calcular el tensor de presión asociando un lugar del pistón donde la presión está siendo ejercida. Si se utilizase la definición para la presión colisional (3.8) propuesta en este trabajo en su componente perpendicular a la pared se tendría un valor siempre nulo, dado que el disco virtual siempre está contenido en el pistón y no sufre de ninguna división por parte de una pared vertical, siempre que el tamaño de la celda de medición pueda contener al menos un disco completamente.

Esta última deducción, $\mathbb{P}_{x\beta}^{col} = 0$ dentro de la celda virtual, es una contradicción directa con la idea de que el choque de la partícula con el pistón transmite una fuerza, y por ende existe una presión no nula sobre la pared. Es por esta razón que todo el problema de la diferencia entre teoría y experimento numérico para el caso de la presión escalar y el coeficiente de roce de cizalle recae sobre este tensor, que sería subestimado en todos los casos.

8.4. Posible solución y sus implicancias

Si bien es necesario que la presión pueda dar respuesta al problema del pistón, a su vez es importante que cualquier solución planteada pueda cumplir con ecuación de balance de momentum en dos dimensiones (2.16), y en particular se tiene que cumplir la relación (3.5). Esto implica que

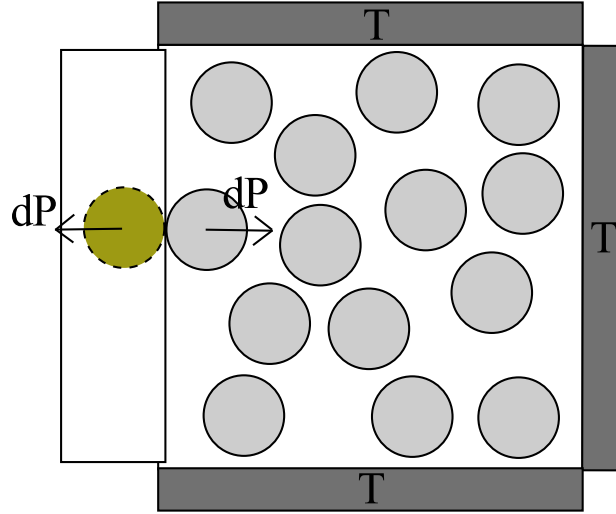


Figura 8.2: Visualización de un grano virtual al chocar contra el pistón.

la única forma de modificar consistentemente la definición recae en el grado de libertad \vec{u}_α para cada $\alpha \in \{x, y\}$, pero siempre debe cumplir que $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_\alpha = 0$.

De este modo, se debe tener, para este caso:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_x = 0, \quad (8.1)$$

$$\iint_{Piston} \vec{u}_x dx dy = - \sum_i \frac{m_i \Delta \vec{v}_{ip}}{L} \delta(t - t^*), \quad (8.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_y = 0, \quad (8.3)$$

$$\iint_{Piston} \vec{u}_y dx dy = 0, \quad (8.4)$$

donde L es el tamaño del pistón si se considera una presión sobre la totalidad, o el tamaño vertical de la celda de medición local que encierra todo el grano y t^* es el instante de tiempo donde el grano i -ésimo choca contra el pistón.

Este sistema de ecuaciones puede tener múltiples soluciones. Por ejemplo, si se aplica la idea de este trabajo de distribuir las propiedades de forma uniforme sobre los granos, se puede resolver teniendo:

$$u_{\alpha x} = - \sum_i \frac{\delta_i}{L} (\Delta \vec{v}_{ip} \cdot \hat{e}_\alpha) \delta(t - t^*) \Theta [R - |\vec{r} - (\vec{r}_i - (\vec{r}_i \cdot \hat{e}_x) \hat{e}_x)|], \quad (8.5)$$

$$u_{\alpha y} = 0. \quad (8.6)$$

Esta solución cumple con las características pedidas, excepto en los bordes del grano donde la derivada de la función $u_{x,\beta}$ es una delta de Dirac. Esto en principio invalidaría la ecuación (8.1), pero si se integra sobre la celda de medición (del lado del pistón) se tiene:

$$\iint_{celda} \frac{\partial}{\partial x} u_{xx} + \frac{\partial}{\partial y} u_{xy} dx dy = \sum_i \frac{\delta_i}{L} \delta(t - t^*) (\Delta \vec{v}_{ip} \cdot \vec{\mathbb{H}}(\vec{r}_i - (\vec{r}_i \cdot \hat{e}_x) \hat{e}_x)), \quad (8.7)$$

donde $\vec{\mathbb{H}}$ está definido por (2.11) y es nulo si la partícula está completamente dentro de la celda de medición, que corresponde al caso de que se considere la presión sobre todo el pistón.

Esta idea podría extenderse a todas los choques entre esferas reales. Para ello es necesario incorporar un término que de cuenta de la orientación de los discos al chocar, pues el término $u_{\alpha,\beta}$ discutido solo considera una pared que sea perpendicular a la línea que une los centros de los granos. Este término deberá entonces considerar el vector $\vec{r}_j - \vec{r}_i$ que une ambos granos, pues da cuenta de la orientación de esta pared virtual entre ambos granos. Se muestra esta idea en la figura 8.3. Y por tanto el tensor de presión colisional propuesto como definición es:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{col}} = & - \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i (\Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \cdot \hat{e}_\alpha) \delta(t-t^*) \frac{(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \cdot \hat{e}_\beta}{2} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} \\ & + \sum_{i,j=1}^N \frac{\delta_i}{L} (\Delta \vec{v}_{ij}^{2D} \cdot \hat{e}_\alpha) \delta(t-t^*) \left(\frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \cdot \hat{e}_\beta \right) \Theta[R - |\vec{r} - \vec{r}_i|] + u'_{\alpha,\beta}, \end{aligned} \quad (8.8)$$

donde $u'_{\alpha,\beta}$ es un nuevo grado de libertad o “gauge”.

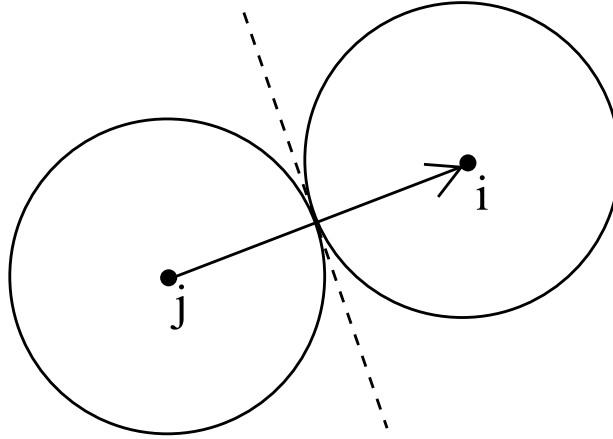


Figura 8.3: Visualización de un grano virtual al chocar contra el pistón. La línea segmentada marca la pared virtual y el vector indica $\vec{r}_j - \vec{r}_i$.

Existe una gran coincidencia en la segunda parte de la definición propuesta (8.8) con las expresiones obtenidas a través de la mecánica estadística para la presión, particularmente usando el teorema del virial [38, 39], si se utiliza para esas definiciones el tratamiento para los granos con volumen de este trabajo. Es conocido, sin embargo, que estas definiciones tienen algunas complicaciones cuando el número de partículas utilizadas para medir la presión es reducida [40], por lo que obligaría a usar celdas de mayor tamaño al utilizado en este trabajo para la medición de la presión. Este tamaño mínimo podría modificar lo observado en el gráfico 4.25 donde se comparan distintos tamaños de celda.

El punto de interpretación complejo surge de la distancia L (o área en el caso tridimensional), pues cuando se tiene un choque cualquiera entre granos, no existe una única distancia se pueda considerar como la longitud de la superficie (línea en 2D) donde está repartida la presión. Las alternativas directas serían el diámetro de los granos o el tamaño de la celda, pero no son únicas y

deben ser exploradas individualmente.

Esta definición (8.8), sin embargo, contradice la idea [20] de que al agregar un campo a la presión que tenga divergencia nula no afectará a la medición de la presión sobre una superficie, es decir, la fuerza que ejerce el medio sobre ella a través de la presión. Este conflicto aparente no ha sido resuelto por este trabajo, y no se ha medido este nuevo tensor de presión (8.8) para afirmar que es una mejora frente al tensor definido en los capítulos 3 y 6 para sistemas bidimensionales y tridimensionales respectivamente.

Existen algunas otras dificultades a considerar: en la mayoría de los casos, los granos involucrados en dos choques no están entre dos celdas exclusivamente, de modo que se necesita que, al dividir a la presión en la celda respectiva la medición de este tensor pueda ser interpretado físicamente como la presión sobre cada una de las celdas. Este punto debe discutirse con ejemplos y mediciones, pero por su extensión escapa al alcance de este trabajo.

Finalmente, puede también definirse la presión que ejerce una pared:

$$\mathbb{P}_{\text{pared}} = -\delta_{\alpha, n_p} \sum_i \frac{\delta_i}{L} (\Delta \vec{v}_{ip} \cdot \hat{n}_p) \delta(t - t^*) \Theta [R - |\vec{r} - \vec{r}_{\text{im}-i}|] , \quad (8.9)$$

donde \hat{n}_p es la dirección normal a la pared, n_p es el índice de la dirección normal a la pared, la delta δ_{α, n_p} es una delta de Kronecker, $\vec{r}_{\text{im}-i}$ es la posición del centro de la imagen del grano i -ésimo con respecto a la pared y $\Delta \vec{v}_{ip}$ es el cambio de velocidad que experimenta el grano i -ésimo al chocar contra la pared. Esta definición permitiría localizar el efecto que tiene el choque de un grano sobre un segmento de la pared de forma de, por ejemplo, comparar con sensores locales en un experimento real.

8.5. Resumen del capítulo

Se ha propuesto una modificación al tensor de presión colisional \mathbb{P}^{col} que le permita, al integrarlo, dar cuenta del momentum transmitido en el choque de los granos con una pared y tenga un análogo con una fuerza aplicada sobre un pistón por la agitación del medio granular. Se extendió esta definición para abarcar al caso de choques entre granos.

Se ha hecho notar que esta modificación no está libre de dificultades que deben ser exploradas en detalle. Entre ellas la ambigüedad de la distancia L y al interpretación del grado de libertad o “gauge” en el cálculo de la presión, pero no pertenecen al alcance de este trabajo, dado que deben ser exploradas en detalle.

Capítulo 9

Conclusiones

9.1. Teoría desarrollada

Durante este trabajo se ha demostrado la utilidad del enfoque de Goldhirsch, Zhang y Berringer [15] para la descripción de un sistema granular, en este caso usando la función de distribución de Heaviside y bajo el esquema de un sistema fluidizado de discos (esferas) duras. Esta idea de las propiedades distribuidas en todo el grano da paso a campos bien definidos sin ambigüedad en todo el espacio y tiempo.

Se han obtenido a partir de las definiciones de estos campos ecuaciones para el balance de masa (o número si $m_i = 1$), momentum y se ha extendido el trabajo de Goldhirsch para obtener una nueva ecuación de balance: el balance de energía. Su validez ha sido apoyada con ejemplos de descripción continua en el tiempo tanto para dos como para tres dimensiones. Se ha definido la temperatura granular de dos formas distintas, y en el caso del sistema tridimensional, su extensión que permite describir una temperatura sobre el plano perpendicular a la vertical y la temperatura sobre esta dirección.

Se ha podido, a partir de estos resultados, obtener una descripción sin ambigüedades del tensor de presión en cada punto cuyas propiedades, una vez integradas sobre una celda de medición, deberían comparar con una presión hidrodinámica usual. Se ha observado en la práctica que los resultados previos de este tensor no coinciden con los obtenidos en este trabajo. Se ha utilizado esta definición para calcular el coeficiente de viscosidad de cizalle, que no es cercano al esperado.

Se ha propuesto una idea que puede dar luces sobre una solución al problema del tensor de presión, y se ha propuesto una corrección, que no está exenta de problemas de interpretación física y debe ser discutida a profundidad con ejemplos en trabajos futuros.

9.2. Simulaciones numéricas

Se han llevado estos elementos definidos a simulaciones bidimensionales con distintos números de discos, un sistema con 300 discos y uno con 12 de ellos, pero con similar fracción de volumen ocupado. Se han utilizado celdas de medición que superan por poco el tamaño de los discos y que como máximo dividen el disco entre cuatro celdas.

Se ha podido observar en los casos estudiados evoluciones suaves de los campos dentro de las celdas de medición, promedios estables y desviaciones estándares consistentes. Estas características se observan a su vez en una de las temperaturas granulares definidas, $T^{(2)}$, que coincide con el comportamiento esperado para la temperatura cuando el coeficiente de inelasticidad q es nulo.

Se ha observado que la simulación numérica permite estudiar cada componente de las ecuaciones de balance y se ha observado que los resultados se encuentran dentro de los errores numéricos asociados a la discretización temporal, de modo que es posible establecer el origen del cambio de cada cantidad medida (masa, momentum, energía) en el tiempo.

Se midió cada componente de la presión colisional y cinética dentro de cada celda para ambos sistemas. Se identificó que la primera de ellas tiene valores muy pequeños con respecto a la segunda. Estos resultados generaron que la presión escalar, calculada como la traza del tensor de presión total, no permitiera obtener mediciones comparables con resultados previos en la literatura, en particular al medir la ecuación de estado para gases granulares.

Finalmente, se ha calculado la autocorrelación de los elementos del tensor presión fuera de la diagonal en cada simulación de forma de obtener el coeficiente de viscosidad de cizalle, se han comparado las distintas definiciones presentadas y se ha concluido que la expresión óptima para estudiar estos sistemas corresponde a la viscosidad calculada a partir de la formulación de Green-Kubo con un estimador insesgado. Estos resultados, sin embargo, no coinciden con los establecidos por la literatura y deben ser revisados cuando se replantee el tensor de presión colisional.

Se han extendido estas mediciones a un sistema tridimensional de caja baja vibrada, se han medido los campos hidrodinámicos, la temperatura en las distintas direcciones de la caja, las ecuaciones de balance definidas para masa, momentum y energía. Se establecieron los tensores de presión colisional, cinético y total con el fin de calcular el coeficiente de viscosidad de cizalle en las direcciones dentro y fuera del plano de vibración. Los resultados son los esperados luego de analizar el sistema bidimensional.

Con todo ello se puede concluir que el formalismo presentado en este trabajo es consistente incluso cuando se tiene un número reducido de partículas dentro del sistema o en la celda de medición. Este permite obtener perfiles de los promedios consistentes con las condiciones de borde del sistema y puede reproducir fenómenos complejos como los rollos convectivos.

9.3. Trabajo futuro

A partir de estos resultados es posible llevar a cabo un grupo no menor de mejoras en el formalismo para abarcar una mayor cantidad de casos y ser de mayor utilidad.

- **Otros sistemas:** se deben considerar otros sistemas que tengan un forzamiento de cizalle para comparar por distintos medios el valor del coeficiente de viscosidad de cizalle. Esta comparación puede ser crucial para validar el método de Green-Kubo aplicado al formalismo presentado en este trabajo.
- **Rotación:** considerar que los discos o esferas del sistema puedan rotar libremente, de modo que es necesario incluir en el formalismo estos grados de libertad. Es posible que la rotación

afecte fuertemente a la definición del tensor de presión y por ello también afecten el valor que toma la viscosidad de cizalle, pues sin la rotación es muy limitada la respuesta que puede realizar localmente los granos al ser forzados a través de un cizalle en las paredes del sistema.

Con este fin se debe considerar que el momentum local estaría definido por

$$\vec{P}_r(\vec{r}, t) = \sum_i \rho_i (\vec{v}_i(t) + (\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \times \vec{\omega}_i(t)) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] , \quad (9.1)$$

donde $\vec{\omega}_i(t)$ sería la velocidad angular de rotación de la esfera i -ésima en el instante t . Este término extra obligaría a introducir nuevos elementos en las ecuaciones de balance de momentum y energía, y si se extiende la definición de presión se requeriría conocer la regla de choque y cómo esta afecta a la velocidad angular, con sus coeficientes de restitución (o inelasticidad) tangenciales asociados.

- **Otros coeficientes de transporte:** el estudio de las relaciones de Green-Kubo arroja otras propiedades del sistema que son factibles de estudiar a partir de los campos locales obtenidos, junto al tensor de presión. Por ejemplo, el coeficiente de viscosidad de cuerpo (bulk viscosity):

$$\zeta = \frac{V}{kT} \int_{0, \infty} \langle \delta p(t), \delta p(0) \rangle dt , \quad (9.2)$$

donde δp corresponde a la desviación de la presión hidrodinámica escalar con respecto al promedio global. El coeficiente de transmisión de calor y la tasa de enfriamiento (cooling rate) podrían agregarse a esta lista. Esta propuesta de coeficientes puede ser comparada con métodos indirectos para estos coeficientes de modo de validar el formalismo presentado en este trabajo, pues permite mediciones locales.

- **Vorticidad:** A partir de las definiciones dadas es posible calcular la vorticidad $\vec{\Omega}$ como la divergencia de la velocidad en todo punto del espacio

$$\vec{\Omega} = \vec{\nabla} \times \vec{V}_{3D} = \vec{\nabla} \times \left(\frac{\vec{P}_{3D}}{\rho_{3D}} \right) . \quad (9.3)$$

A través de ella se pueden encontrar ecuaciones de balance a partir de las aquí presentadas. Estas pueden ayudar a entender el fenómeno de la vorticidad y los efectos de un forzamiento tipo cizalle.

Todo esto espera ser un aporte a la búsqueda de relaciones constitutivas y ecuaciones de estado para los medios granulares en general y un paso más hacia la hidrodinámica granular completa.

Bibliografía

- [1] E. Clement, L. Vanel, J. Rajchenbach, and J. Duran, *Pattern formation in a vibrated two-dimensional granular layer*, Physical Review E, Volume 53, 2972-2975, March 1996.
- [2] H. Jaeger, S. Nagel and P. Behringer, *Granular solids, liquids, and gases*, Reviews of Modern Physics, Volume 68, 1259-1273, 1996.
- [3] D. Risso and P. Cordero, *Dynamics of rarefied granular gases*, Physical Review E, Volume 65, 021304, January 2002.
- [4] J. A. C. Gallas, H. J. Herrmann, and S. Sokolowski, *Convection cells in vibrating granular media*, Physical Review Letters, Volume 69, 1371-1374, August 1992.
- [5] A. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz and R. H. Swendsen, *Why the Brazil nuts are on top: Size segregation of particulate matter by shaking*, Physical Review Letters, Volume 58, 1038-1040, March 1987.
- [6] E. L. Grossman, T. Zhou and E. Ben-Naim, *Towards granular hydrodynamics in two dimensions*, Physical Review E, Volume 55, 4200-4206, April 1997.
- [7] E. Clement, *Rheology of granular media*, Current Opinion in Colloid and Interface Science, Volume 4, 294–299, August 1999.
- [8] B. Andreotti, Y. Forterre and O. Pouliquen, *Granular media: between fluid and solid*, Cambridge University Press, July 2013.
- [9] N. V. Brilliantov and T. Pöschel, *Kinetic theory of granular gases*, Oxford University Press, 2004.
- [10] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim and A. Santos, *Hydrodynamics for granular flow at low density*, Physical Review E, Volume 58, 4638-4653, October 1998.
- [11] D. Gidaspow, *Multiphase flow and fluidization*, Academic Press, 1994.
- [12] H. van Beijeren and M. H. Ernst, *Kinetic theory of hard spheres*, Journal of Statistical Physics, Vol 21, 125-167, 1979.
- [13] A. Santos, J. M. Montanero, J. W. Dufty and J. J. Brey, *Kinetic model for the hard-sphere fluid and solid*, Physical Review E, Volume 57, 1644-1660, 1998.
- [14] V. Garzó, M. G. Chamorro and F. Vega, *Transport properties for driven granular fluids in situations close to homogeneous steady states*, Physical Review E, Volume 87, 032201, March 2013.

- [15] J. Zhang, R. P. Behringer and I. Goldhirsch, *Coarse-graining of a physical granular system*, Progress of Theoretical Physics Supplement No. 184, 16-30, January 2010.
- [16] B. J. Alder and T. E. Wainwright, *Phase transition for a hard sphere system*, Journal of Chemical Physics, Volume 27, 1208-1209, August 1957.
- [17] B. J. Alder and T. E. Wainwright, *Studies in molecular dynamics. I. General method*, Journal of Chemical Physics, Volume 31, 459-466, February 1959.
- [18] D. C. Rapaport, *The art of molecular dynamics simulation*, Cambridge University Press, 2004.
- [19] R. Brito, D. Risso and R. Soto, *Hydrodynamic modes in a confined granular fluid*, Physical Review E, Volume 87, 022209, February 2013.
- [20] J. H. Irving and J. Kirkwood, *The statistical mechanical theory of transport processes. IV. The equation of hydrodynamics*, Journal of Chemical Physics, Volume 18, 817-829, June 1950.
- [21] M. Mareschal and E. Kestemont, *Order and fluctuations in nonequilibrium molecular dynamics simulations of two-dimensional fluids*, Journal of Statistical Physics, Volume 48, 1187-1201, 1987.
- [22] J. Ortiz and J. V. Sengers, *Hydrodynamic fluctuations in fluids and fluid mixtures*, Elsevier, 2006.
- [23] M. S. Green, *Markoff random processes and the statistical mechanics of time-dependent phenomena. II. Irreversible processes in fluids*, The Journal of Chemical Physics, Volume 22, 398-413, 1954.
- [24] K. Kubo, *Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems*, Journal of the Physical Society of Japan, Volume 22, 570-586, 1957.
- [25] S. V. Lishchuk, *Role of three-body interactions in formation of bulk viscosity in liquid argon*, The Journal of Chemical Physics, Volume 136, 164501, 2012.
- [26] R. Ramírez, D. Risso, R. Soto and P. Cordero, *Hydrodynamic theory for granular gases*, Physical Review E, Volume 62, number 2, 2521-2530, August 2000.
- [27] J. J. Brey and N. Khalil, *Equilibration and symmetry breaking in vibrated granular systems*, Europhysics Letters, Volume 94, 14003, 2011.
- [28] J. J. Brey, M.J. Ruiz-Montero, F. Moreno, and R. García-Rojo, *Transversal inhomogeneities in dilute vibrofluidized granular fluids*, Physical Review E, Volume 65, 061302, June 2002.
- [29] S. Chapman and T. G. Cowling, *The mathematical theory of non-uniform gases*, 3rd Edition, Cambridge University Press, 1991.
- [30] J. A. Barker and D. Henderson, *What is "liquid"? Understanding the states of matter*, Reviews of Modern Physics, Volume 48, 587-671, October 1976.
- [31] A. Santos, M. Lopez de Haro and S. Bravo Yuste, *An accurate and simple equation of state for hard disks*, Journal of Chemical Physics, Volume 103, 4622-4625, September 1995.

- [32] D. Henderson, *A simple equation of state for hard discs*, Molecular Physics, Volume 30, 971-972, April 1975 .
- [33] V. Yakhot and G. Sivashinsky, *Negative-viscosity phenomena in three-dimensional flows*, Physical Review A, Volume 35, 815–820, January 1987.
- [34] A. Wiranata and M. Prakash, *Shear Viscosities from the Chapman-Enskog and the Relaxation Time Approaches*, Physical Review C, Volume 85, 054902, May 2012.
- [35] N. Rivas, P. Cordero, D. Risso, R. Soto, *Characterization of the energy bursts in vibrated shallow granular systems*, Granular Matter, Volume 14, 157-162, April 2012.
- [36] P. Melby, F. Vega Reyes, A. Prevost, R. Robertson, P. Kumar, D. A. Egolf and J. S. Urbach, *The dynamics of thin vibrated granular layers*, Journal of Physics: Condensed Matter, Volume 17, S2689, June 2005.
- [37] G. Castillo, N. Mujica, R. Soto, *Fluctuations and criticality of a granular solid-liquid-like phase transition*, Physical Review Letters, Volume 109, 095701, August 2012.
- [38] W. G. Hoover, *Lecture notes in physics: molecular dynamics*, 1st Edition, Springer-Verlag, 1986.
- [39] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer simulations of liquids*, 1st Edition, Clarendon Press, 1989.
- [40] W. G. Hoover, B. J. Alder, *Studies in molecular dynamics IV. Pressure, collision rate, and their number dependence for hard disks*, Journal of Chemical Physics, Volume 46, 686-691, January 1967.
- [41] M. Marin, D. Risso and P. Cordero, *Efficient Algorithms for Many-Body Hard Particle Molecular Dynamics*, Journal of Computational Physics, Volume 109, 306-317, December 1993.
- [42] Dino Risso, Tesis de Doctorado, *Convección en Sistemas Finitos*, Univesidad de Chile, Mayo 1994.
- [43] Jorge Ibsen, Rodrigo Soto and Patricio Cordero, *Free Thermal Convection Driven by Nonlocal Effects*, Physical Review E, Volume 52, 4533-4536, October 1995.
- [44] Juan Sebastián González, Tesis de Magíster, *Algoritmo Eficiente para Simulación de Medios Granulares Densos*, Univesidad de Chile, Diciembre 2008.

Apéndice A

Sobre las simulaciones numéricas

Existen múltiples maneras de construir una simulación numérica para un sistema granular. La más sencilla consiste en considerar las ecuaciones constitutivas de estos sistemas, obtenidas por ejemplo a través de la teoría cinética, para resolver numéricamente sus promedios mediante simulaciones probabilísticas tipo Montecarlo. Esta técnica describe de forma correcta los promedios temporales pero no logra capturar la evolución temporal de los distintos campos.

Si se requiere capturar el cambio en el tiempo se debe realizar una simulación de dinámica molecular, donde estén representados todos los granos y se estudie detalladamente la interacción entre ellos. Si el formalismo de Hertz para describir en las interacciones, mostrado en la figura 1.1, es el adecuado para el sistema, por ejemplo si los contactos entre las partículas ocurren en tiempos largos, lo más adecuado es estudiar las fuerzas de interacción entre partículas y desarrollar una simulación donde se integren estas fuerzas en el tiempo mediante un método tipo “Leap-frog”, donde el tiempo avanza en un paso temporal discreto constante [39]. El problema de este sistema es que calcular las interacciones tiene un costo del orden $\vartheta(N^2)$, con N la cantidad de partículas en el sistema, por cada paso temporal, es decir un costo total de orden $\vartheta(N^2T/dt)$, donde T es el tiempo simulado y dt es el paso temporal. Al mismo tiempo nos interesa acotar el error en la discretización temporal, por lo que es adecuado pensar en un paso temporal dt pequeño. Esta combinación torna a esta estrategia muy costosa pero es necesaria en caso de que las interacciones sean duraderas, como en sistemas densos con forzamiento tipo cizalle.

Si se tiene un sistema fluidizado, donde las colisiones ocurren pero no se mantienen los contactos entre partículas por tiempos largos, se puede aprovechar el formalismo de las esferas duras para construir una estrategia de simulación más eficiente, llegando a un esquema que no depende de un paso temporal y, con las debidas optimizaciones, no requiere de un número de operaciones de orden $\vartheta(N^2)$ para avanzar en el tiempo. Este tipo de simulaciones, las llevadas por eventos, han sido utilizadas en este trabajo.

A.1. Cantidades adimensionales

Dentro de la simulación numérica de dinámica molecular, las cantidades procesadas no tienen unidades físicas intrínsecas, y por lo tanto, para introducir parámetros comparables con el mundo real al resolver el movimiento de cada uno de los granos, es necesario transformar de una forma leve las cantidades reales involucradas y luego revertir el proceso para interpretarlas y poder com-

pararlas con un experimento físico.

Por ejemplo, si se observa que el diámetro de un disco dentro de la simulación 2D es la medida de distancia unitaria utilizada, es decir $2R = 1$. Si se quiere comparar un experimento real donde los discos tienen un diámetro de $d_r = 5mm$, entonces todas las distancias, partiendo por el diámetro de los discos y siguiendo con el tamaño de la caja, la amplitud de vibración u otra medida de longitud, se debe multiplicar por $5mm$ para comparar los cálculos de distancia de las simulaciones, por ejemplo distancia de vuelo media o anchos de regiones características observadas. Otra cantidad escalable directamente desde la simulación es la masa (relacionándola con $m_i = 1$).

El caso del tiempo es un problema si no se tiene una cantidad directamente comparable. En el experimento numérico tridimensional presentado en el capítulo 7 se considera una gravedad g . En la simulación se ajusta esta gravedad a $g = 1$, entonces se puede obtener un intervalo de tiempo característico en el experimento a partir de esta gravedad y del diámetro de los granos (u otra distancia característica):

$$\Delta t_{3D} = \sqrt{\frac{2R}{g}},$$

que puede compararse con el tiempo unitario en la simulación. De esta forma se puede vincular el tiempo de la simulación con un tiempo de medición de un experimento similar y relacionar la frecuencia de oscilación de la caja en la simulación con la impuesta en el experimento. Para el caso bidimensional es un poco más complicado: el parámetro de referencia es la temperatura de la pared térmica, cuyas unidades de medida son las de la energía. Las temperaturas de ambas paredes están relacionadas con una única escala de medida, entonces se puede relacionarlas con una temperatura unitaria $T = 1$. Esta temperatura es la que se puede relacionar con un intervalo de tiempo característico de la simulación, junto a la masa de cada grano m y su diámetro $2R$:

$$\Delta t_{2D} = 2R \sqrt{\frac{m}{2T}}.$$

En el caso de otras cantidades, velocidad, momentum, energía, pueden escalarse adecuadamente para comparar los resultados teóricos, experimentales y numéricos.

A.2. El simulador ‘Discos’

El programa de simulación de sistemas granulares llamado “Discos” ha sido desarrollado durante varios años por, entre otros, Mauricio Marín [41], Dino Risso [3, 19, 26, 41, 42], Rodrigo Soto [19, 26, 43], Jorge Ibsen [43], Patricio Cordero [3, 26, 41, 43], Rosa Ramirez [26] y Sebastián Gonzales [44]. Fue construido en el lenguaje de programación ‘C’ y tiene múltiples módulos para abarcar la mayor cantidad posible de condiciones de borde, propiedades de los granos y dinámica de las partículas.

El simulador tiene una versión bidimensional y una versión tridimensional que están construidas bajo el mismo principio: las simulaciones llevadas por eventos.

La estrategia tiene tres partes fundamentales: la predicción de colisiones, el avance temporal y el desarrollo de una colisión, y está mostrado en la figura A.1.

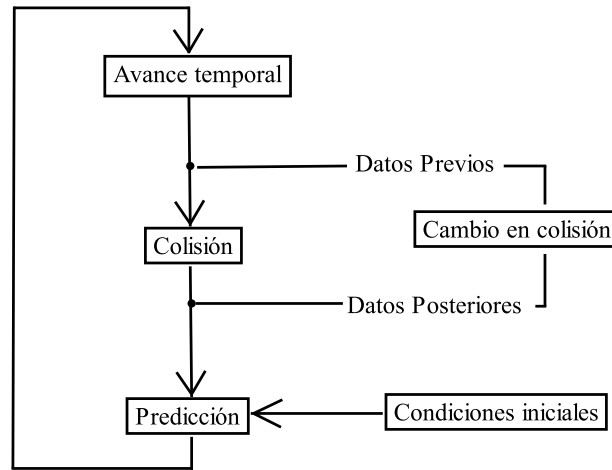


Figura A.1: Esquema de una simulación llevada por eventos (Event-driven)

La primera de ellas consiste en que, dado un conjunto de posiciones de centros de partículas junto a sus velocidades instantáneas se puede predecir la siguiente colisión de la partícula i -ésima con otro grano u otro objeto en la simulación, como una pared. Dado que una partícula, mientras no se encuentre con otra, está realizando un vuelo afectado solo por fuerzas externas, se puede calcular analíticamente su trayectoria. Este proceso tiene inicialmente un orden $\mathcal{O}(N^2)$ pero se puede reducir una buena cantidad considerando que las partículas que estén muy lejos de esta tienen una posibilidad muy baja de colisionar y por tanto es necesario solo verificar a las partículas cercanas. La forma de establecer la cercanía consiste en construir celdas (que son distintas a las celdas de medición) y llevar un registro de cuándo entra o sale una partícula de ella. Se verifica entonces las partículas de las celdas adyacentes o diagonales a la celda en donde está contenida la partícula i -ésima.

El segundo proceso, de avance temporal, consiste en modificar el estado del sistema avanzando todas las partículas, cada una en su trayectoria individual, un tiempo suficiente hasta el instante donde ocurra la siguiente colisión. Existe un proceso para evitar el avance de todas las partículas, ajustando las posiciones solo de las partículas involucradas en el choque y cercanas a ellas, dado que las lejanas al siguiente choque no tendrán un cambio en sus próximos choques. Para ello se debe llevar un registro de la última actualización temporal de la posición y velocidad, de modo de considerarla para la predicción siguiente.

Finalmente se realiza el choque siguiendo las reglas de choque que permite el modelo de esferas duras. Una vez concluye el choque se han calculado las velocidades de salida y por tanto es necesario volver al comienzo a calcular el siguiente choques de las partículas. Una última optimización consiste en mantener un registro de todos los posibles choques de cada partícula de modo de, en el momento en que se cambia la velocidad producto de una colisión, se actualiza el registro y no se calculan los posibles choques de las partículas que no estuvieron involucradas en este choque.

Los registros mencionados pueden ser de varios tipos, y en el programa Discos están implementadas las listas de nodos dinámicas y los árboles binarios para mejorar en cada caso la eficiencia.

A.3. Las mediciones en colisiones

Dentro de este trabajo se buscará sacar provecho de esta estrategia y se han definido diversas cantidades, algunas de ellas miden el cambio que ocurre en cada choque, por ejemplo el cambio de velocidad que experimenta la partícula i -ésima al chocar con la partícula j -ésima $\Delta\vec{v}_{ij}$. Para ello, como está mostrado en la figura A.1, se pide al simulador antes del choque toda la información de cada grano. Se contrasta con la información obtenida una vez el proceso del choque ha terminado.

Los datos obtenidos en cada choque son acumulados para ser entregados por medio de un archivo independiente en intervalos de tiempo regulares. Dada la utilidad de estas mediciones se ha utilizado el mismo intervalo de tiempo que se utiliza para las mediciones en intervalos de tiempo regulares, y la escritura de los archivos es proporcional al número de celdas de medición que se han considerado.

Estas mediciones son totalmente independientes de la evolución de cada choque y, dentro del programa, se ha construido un espacio de código donde se puede agregar una medición de un campo sin afectar la evolución del programa.

A.4. Las mediciones en intervalos de tiempo regulares

Si se extiende una línea temporal con los sucesos que resuelve el programa Discos, se tendría algo similar a lo mostrado por la figura A.2.

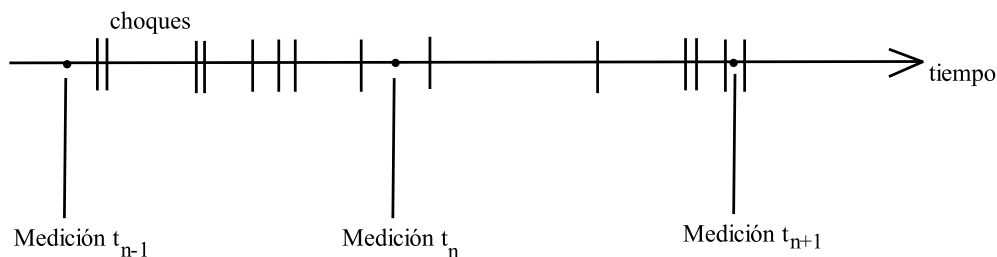


Figura A.2: Línea temporal de una simulación llevada por eventos (Event-driven). Las colisiones se representan por los segmentos verticales.

Se podría observar que las colisiones ocurren a tiempos desiguales y en distintas regiones del espacio. Por ello, si se consideran mediciones a intervalos regulares, por ejemplo la masa dentro de cada celda en el instante t_n , se habrá incluido un número indeterminado de choques. Se han implementado estas mediciones de forma que no afecten a las mediciones en colisiones.

Estas cantidades medidas están insertadas en trozos de código que aseguran que no se afectará la evolución del sistema o del programa.

A.5. Procesamiento de datos posterior

Una vez obtenidas las distintas mediciones se ha desarrollado un trabajo estadístico sobre cada una de ellas para asegurar su validez y consistencia. Por ejemplo, para calcular la viscosidad de

cizalle η con el método de Green-Kubo se debe primero construir la autocorrelación de presión, y para ello es conveniente (pero no estrictamente necesario) tener todas las mediciones de la presión antes de construir los valores de esta función.

Este proceso se realizó generando programas en lenguaje 'Perl' y se ha graficado los resultados en el software 'gnuplot'.

Todo el código generado ha sido adaptado al simulado bidimensional y tridimensional, y para la realización de este trabajo se han realizado aportes al programa Discos al automatizar la incorporación de nuevas simulaciones, y se han escrito más de 5000 líneas de código para lograr las distintas mediciones en los sistemas bidimensionales y tridimensionales.

Apéndice B

Sobre los choques inelásticos en el modelo de esferas duras

B.1. Introducción

En este trabajo se ha hecho uso del modelo de esferas duras que describe la interacción entre granos como choques instantáneos y define un coeficiente que cuantifica la pérdida de energía en la colisión: el coeficiente de restitución α . Se ha hecho uso directo de la primera parte, a través de $\delta(t - t^*)$ en (2.15) por ejemplo, pero no de la segunda.

La principal razón para ello ha sido que el coeficiente, para los choques descritos, es una constante y no cambia entre choques entre partículas del mismo tipo. Sin embargo, existen casos donde la aproximación no es suficientemente buena y se puede modelar α como dependiente de la velocidad, por ejemplo, o se tienen dos especies de partículas (de distinto tamaño, masa o material) que genera un valor para el coeficiente en función de las partículas involucradas en cada choque.

En estos casos las relaciones obtenidas en esta sección no serán directamente calculables a partir de otras cantidades y puede ser de interés cuantificar la influencia que tiene la restitución o pérdida de energía por choques en el sistema, si forma sus propias inhomogeneidades o si cuenta con propiedades especiales.

B.2. Término inelástico para un sistema 2D

La regla de choque inelástico en el modelo de esferas duras está dada por:

$$(\vec{v}_i^+ - \vec{v}_j^+) \cdot \hat{e}_r^{ij} = -\alpha \{ (\vec{v}_i^0 - \vec{v}_j^0) \cdot \hat{e}_r^{ij} \}, \quad (\text{B.1})$$

donde \hat{e}_r^{ij} corresponde la dirección unitaria que une el centro de la partícula i -ésima con el centro de la partícula j -ésima y la velocidad \vec{v}_i^+ es la que se observa después del choque para la partícula i -ésima.

Sumando esto a el balance de momentum total en el choque se obtiene explícitamente que:

$$\vec{v}_i^+ - \vec{v}_i^0 = \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} = \frac{1+\alpha}{2} ((\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \hat{e}_r^{ij} = \left(1 - \frac{1-\alpha}{2}\right) ((\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \hat{e}_r^{ij}, \quad (\text{B.2})$$

$$\vec{v}_j^+ - \vec{v}_j^0 = \Delta^{2D} \vec{v}_{ji} = \frac{1+\alpha}{2} ((\vec{v}_i^0 - \vec{v}_j^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \hat{e}_r^{ij} = \left(1 - \frac{1-\alpha}{2}\right) ((\vec{v}_i^0 - \vec{v}_j^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \hat{e}_r^{ij}. \quad (\text{B.3})$$

El término $(1-\alpha)/2$ tiene una interpretación especial. Se define [3] el coeficiente de inelasticidad como:

$$q = (1-\alpha)/2 \quad (\text{B.4})$$

y cuantifica qué tan inelástico es el sistema.

B.2.1. Ecuación de balance de momentum

Llevando este resultado a la ecuación de balance de momentum (2.16) se tiene:

$$\begin{aligned} -\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}} &= \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \Delta^{2D} \vec{v}_{ij} \delta(t-t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} \\ -\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}} &= \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \left(1 - \frac{1-\alpha}{2}\right) ((\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \hat{e}_r^{ij} \delta(t-t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\}, \\ -\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}} &= \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i ((\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \hat{e}_r^{ij} \delta(t-t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} \\ &\quad - \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i \left(\frac{1-\alpha}{2}\right) ((\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \hat{e}_r^{ij} \delta(t-t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\}. \end{aligned}$$

El primer término del lado derecho no depende de α explícitamente, y corresponde al intercambio de velocidades que ocurriría si los choques fuesen completamente elásticos. El segundo término es proporcional a q y, por ende, cuantifica la inelasticidad de los choques. Por ello, se identifican dos cantidades independientes:

$$-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{elas}} = \sum_{i,j=1}^N \left\{ \delta_i ((\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \hat{e}_r^{ij} \delta(t-t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\}, \quad (\text{B.5})$$

$$-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{inel}} = - \sum_{i,j=1}^N \left\{ q \delta_i ((\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \hat{e}_r^{ij} \delta(t-t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\}. \quad (\text{B.6})$$

Al primero de ellos se le denominará tensor de presión elástico y al segundo término tensor de presión inelástico. Es evidente entonces la relación entre los distintos tensores:

$$\mathbb{P}^{\text{col}} = \mathbb{P}^{\text{elas}} + \mathbb{P}^{\text{inel}}. \quad (\text{B.7})$$

La forma de medir ambas cantidades definidas no difiere de la utilizada para medir el tensor de presión colisional.

B.2.2. Ecuación de balance de energía

Es sabido que la pérdida total de energía global producto de cada choque entre discos es [8]

$$\Delta E_c = -\frac{1-\alpha^2}{4}m[(\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}]^2. \quad (\text{B.8})$$

Para el tratamiento localizado en cada grano se caracteriza el cambio de energía cinética de cada disco involucrado en el choque usando la misma regla de choque para esferas duras (B.1) :

$$\begin{aligned} \Delta^{2D} \left(\delta_i \frac{v_{ij}^2}{2} \right) &= \delta_i \frac{(v_i^+)^2 - (v_i^0)^2}{2} = \frac{\delta_i}{2} \left[(1+\alpha)(\vec{v}_i^0 \cdot \hat{e}_r^{ij})(\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij} + \frac{(1+\alpha)^2}{4}(\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij} \right] \\ &= \frac{\delta_i}{2} \left[(\vec{v}_j^0 \cdot \hat{e}_r^{ij})^2 - (\vec{v}_i^0 \cdot \hat{e}_r^{ij})^2 - \frac{1-\alpha}{2} (\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij} \left(\frac{3+\alpha}{2}(\vec{v}_j^0 \cdot \hat{e}_r^{ij}) + \frac{1-\alpha}{2}(\vec{v}_i^0 \cdot \hat{e}_r^{ij}) \right) \right]. \end{aligned}$$

Aplicando este resultado al término relacionado con Δ^{2D} en la ecuación (2.24) y usando la definición de q se tiene:

$$\begin{aligned} &\sum_{i,j=1}^N \left\{ \Delta^{2D} \left(\frac{\delta_i v_{ij}^2}{2} \right) \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} \\ &= \sum_{i,j=1}^N \left\{ \frac{\delta_i}{2} [(\vec{v}_j^0 \cdot \hat{e}_r^{ij})^2 - (\vec{v}_i^0 \cdot \hat{e}_r^{ij})^2] \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\} \\ &- \sum_{i,j=1}^N \left\{ q \frac{\delta_i}{2} [(\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}] \left[(2-q)(\vec{v}_j^0 \cdot \hat{e}_r^{ij}) + q(\vec{v}_i^0 \cdot \hat{e}_r^{ij}) \right] \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\}. \end{aligned}$$

Se puede identificar cada término obtenido de manera similar al caso anterior, de modo que se tiene:

$$-\frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{elas}}) = \sum_{i,j=1}^N \left\{ \frac{\delta_i}{2} [(\vec{v}_j^0 \cdot \hat{e}_r^{ij})^2 - (\vec{v}_i^0 \cdot \hat{e}_r^{ij})^2] \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\}, \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{aligned} &-\frac{\vec{P}_{2D}}{\rho_{2D}} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{inel}}) \\ &= -\sum_{i,j=1}^N \left\{ q \frac{\delta_i}{2} [(\vec{v}_j^0 - \vec{v}_i^0) \cdot \hat{e}_r^{ij}] \left[(2-q)(\vec{v}_j^0 \cdot \hat{e}_r^{ij}) + q(\vec{v}_i^0 \cdot \hat{e}_r^{ij}) \right] \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|_{2D}] \right\}. \quad (\text{B.10}) \end{aligned}$$

El primer término muestra el intercambio de energía que ocurriría si los choques fuesen completamente elásticos. El segundo muestra explícitamente la pérdida de energía en cada choque debido a la inelasticidad de cada disco en el sistema. Se debe notar que el coeficiente de inelasticidad q debe ser calculado en cada choque en función de las condiciones del choque. Para este trabajo, es una constante por tener en el sistema solo granos monodispersos en tamaño y masa.

B.2.3. Cálculo de términos inelásticos explícitos.

Para el caso de la disipación en el momentum ya fue calculado y mostrado que el término $-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}}$ influye activamente en el balance y evolución local del momentum, lo que se observa en

la interpretación de la ecuación de balance de momentum (2.16), la definición del tensor de presión colisional (3.7) y las figuras 4.14, 4.15 y 4.16. Para entender la forma en que el sistema está afectado por la inelasticidad se puede descomponer este término como se ha hecho en (B.7) para definir \mathbb{P}^{elas} y \mathbb{P}^{inel} .

Dado que la relación entre estos tensores (B.7) es exacta, por la forma en que fueron definidas estas cantidades, no es necesario mostrar que a través del tiempo se mantiene la relación, pues no dependen del intervalo de tiempo o celda de medición. Para calcular estos términos se desarrolla el mismo proceso de integración en el tiempo y el espacio utilizado para medir los campos microscópicos.

Para estudiar este problema se ha hecho uso de un sistema similar al utilizado en el capítulo 4 con temperaturas $T_1 = T_2 = 1$ y coeficiente de inelasticidad $q = 0.1$. Esta elección se fundamenta en que se busca observar el cambio debido a la inelasticidad y no a un gradiente de temperatura, y el coeficiente q es de un tamaño grande (de un máximo de $q = 0.5$ para choques totalmente inelásticos). Para muchos de los sistemas estudiados se observa que el promedio de $-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{inel}$ por celda es muy pequeño comparado tanto con el promedio de $-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{elas}$ como el promedio de $-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{col}$ en ambas direcciones \hat{x} e \hat{y} .

Si bien se puede asociar el tamaño del término dependiente de la inelasticidad \mathbb{P}^{inel} con el pequeño coeficiente de inelasticidad q , es también cierto que el estado del sistema depende fuertemente de la inelasticidad, y por lo tanto hay una dependencia implícita de esta cantidad en el término elástico \mathbb{P}^{elas} . Esto implica que ambos términos son mutuamente dependientes, pero se ha observado que el término elástico es mucho mayor al término inelástico, pero tienen un comportamiento general similar.

Donde la diferencia entre ellos se hace patente es al analizar la ecuación desarrollada para el balance de la energía, (B.9) y (B.9), mostrado en promedio en la figura B.1.

En ella se puede observar que el término relacionado con la inelasticidad es íntegramente negativo en todo el volumen y la diferencia entre los términos relacionados con \mathbb{P}^{col} y \mathbb{P}^{elas} se ha potenciado, de modo que el primero solo presenta valores negativos y el segundo, excepto en los bordes, presenta valores positivos en promedio por cada celda. Esta diferencia de comportamiento sugiere que son importantes para el análisis de estos sistemas disipativos.

Tensor de presión colisional

Se han medido \mathbb{P}^{col} (3.7), \mathbb{P}^{elas} (B.5) y \mathbb{P}^{inel} (B.6) dentro del sistema descrito. Se ha predicho que, dado que el coeficiente de inelasticidad es pequeño, el tensor de presión inelástico \mathbb{P}^{inel} tendrá valores pequeños y por ende ambos tensores restantes tendrán valores similares parecidos, lo que se observa en la figura B.2 donde se muestran los tensores de presión elástico e inelástico.

Es posible observar que todas las componentes de \mathbb{P}^{inel} tienen tamaño promedio menor en cada altura a las componentes correspondientes de \mathbb{P}^{elas} . Se puede notar, a su vez, que la componente yy tiene un comportamiento distinto a todas las otras componentes del tensor de presión inelástico. Esta diferencia se presenta principalmente junto a las paredes, donde los valores del tensor son considerablemente más grandes que en el centro y el rango de valores abarcado por las barras no

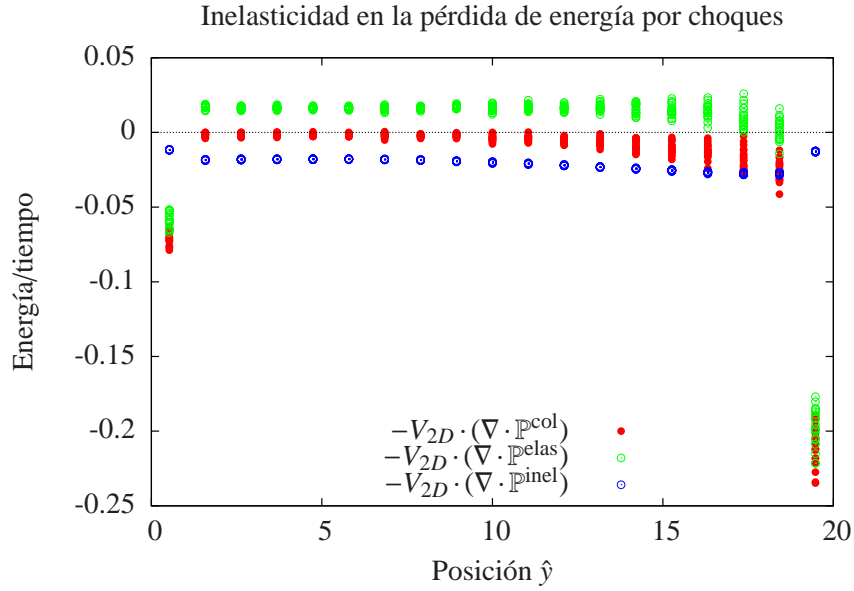


Figura B.1: Elementos del desglose del término sumidero de energía promediados en el tiempo

incluye al cero.

Esta distinción proviene del método de inyección de energía en este caso. Los choques que ocurren cerca de las paredes transportan la energía entregada por ellas, y esta solo modifica el momentum en la dirección \hat{y} , por lo que el momentum, y la energía, trasladado a través de las celdas en la dirección vertical es más importante que las otras componentes.

Finalmente, el tensor de presión colisional, en este caso, refleja lo ocurrido con el tensor de presión elástico, pero no es extraño pensar en sistemas donde el coeficiente de inelasticidad pueda ser mayor y el tensor de presión inelástico se vuelva relevante. Es posible, a través de el formalismo descrito en este trabajo, separar ambas influencias de forma individual de modo de estudiarlas por separado de ser necesario.

B.3. Inelasticidad en los sistemas tridimensionales

Se hace uso de las expresiones obtenidas en el caso bidimensional para formular un términos disipativos en el caso 3D. Para ello se parte de observar que, bajo la condición de que los choques entre discos siguen la regla de colisión, el cambio de velocidad producto de un choque entre la partícula i -ésima y la j -ésima es análogo al caso bidimensional (B.2), salvo que los vectores, como el vector unitario \hat{e}_r^{ij} que une los centros de las esferas, tienen componentes en las tres dimensiones.

Comparando las ecuaciones 6.14 y 3.3, aplicado a un fluido tridimensional, se puede descom-

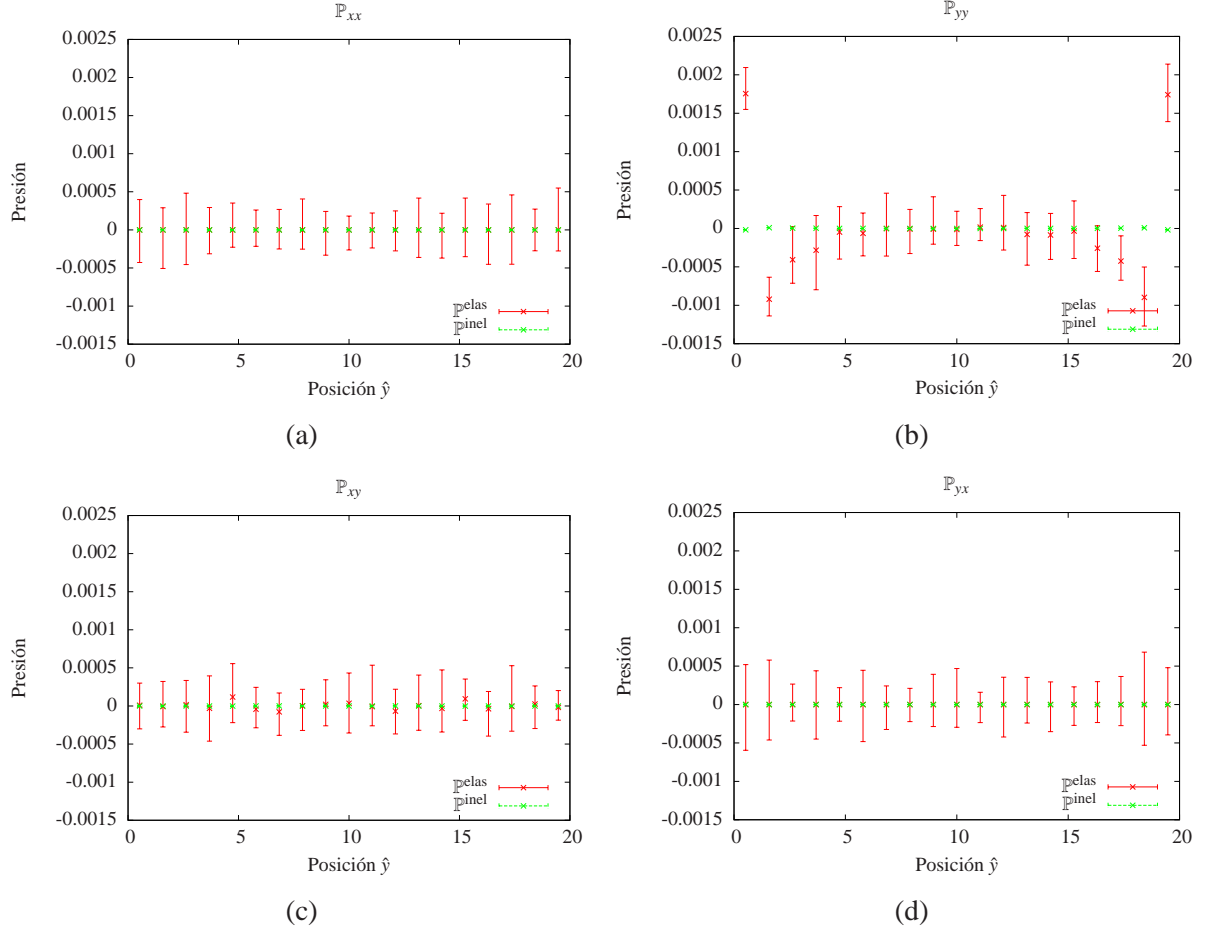


Figura B.2: Promedio de medición de los componentes de \mathbb{P}^{elas} y \mathbb{P}^{inel} por celda en un sistema con paredes térmicas de temperatura idéntica. (a) Componentes xx . (b) Componentes yy . (c) Componentes xy . (d) Componentes yx .

poner $\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}}$ como sigue:

$$\begin{aligned}
 -\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{col}} &= \sum_{ij} \rho_i \Delta \vec{v}_{i,j} \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i|] \delta(t - t^*) \\
 &= \sum_{i,j=1}^N \left\{ \rho_i \left((\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \hat{e}_r^{ij} \right) \hat{e}_r^{ij} \delta(t - t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \right\} \\
 &\quad - \sum_{i,j=1}^N \left\{ \rho_i \left(\frac{1 - \alpha}{2} \right) \left((\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \hat{e}_r^{ij} \right) \hat{e}_r^{ij} \delta(t - t^*) \Theta[R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \right\}.
 \end{aligned} \tag{B.11}$$

El primer término corresponde al intercambio de momentum que ocurriría en un choque si fuese completamente elástico, y el segundo cuantifica la pérdida de momentum, pues es proporcional al coeficiente de inelasticidad. De esta forma se definen los tensores de presión elástico \mathbb{P}^{elas} e

inelástico \mathbb{P}^{inel} :

$$-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{elas}} = \sum_{i,j=1}^N \left\{ \rho_i \left((\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \hat{e}_r^{ij} \right) \hat{e}_r^{ij} \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \right\}, \quad (\text{B.12})$$

$$-\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{inel}} = - \sum_{i,j=1}^N \left\{ q \rho_i \left((\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \hat{e}_r^{ij} \right) \hat{e}_r^{ij} \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \right\}. \quad (\text{B.13})$$

Estas definiciones son idénticas a las encontradas para el caso bidimensional, (B.5) y (B.6) respectivamente, y por lo tanto también cumplen la relación (B.7).

A partir de la regla de colisión para esferas duras utilizada en esta sección, y comparando la ecuación 3.4 para el caso tridimensional con 6.21 se extraen las definiciones:

$$-\frac{\vec{P}_{3D}}{\rho_{3D}} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{elas}}) = \sum_{i,j=1}^N \left\{ \frac{\rho_i}{2} \left[(\vec{v}_j \cdot \hat{e}_r^{ij})^2 - (\vec{v}_i \cdot \hat{e}_r^{ij})^2 \right] \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \right\}, \quad (\text{B.14})$$

$$-\frac{\vec{P}_{3D}}{\rho_{3D}} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{P}^{\text{inel}}) = - \sum_{i,j=1}^N \left\{ q \frac{\rho_i}{2} \left[((\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \hat{e}_r^{ij}) \left((2-q)(\vec{v}_j \cdot \hat{e}_r^{ij}) + q(\vec{v}_i \cdot \hat{e}_r^{ij}) \right) \right] \delta(t-t^*) \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|] \right\}, \quad (\text{B.15})$$

en donde la primera definición corresponde al intercambio de energía producto de diferencias de presión entre elementos vecinos y ocurre en paralelo al campo de velocidad. Luego está expresado el término que da cuenta de la pérdida de energía local y este depende explícitamente del coeficiente de inelasticidad en forma no lineal.

B.3.1. Presión inelástica

A partir de las ecuaciones (B.12) y (B.13), y usando (6.34), se puede encontrar que:

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{elas}} = - \sum_{i,j=1}^N \rho_i \left((\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \hat{e}_r^{ij} \right) (\hat{e}_r^{ij} \cdot \hat{e}_\alpha) \delta(t-t^*) \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{3} \cdot \hat{e}_\beta \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|], \quad (\text{B.16})$$

$$\mathbb{P}_{\alpha\beta}^{\text{inel}} = \sum_{i,j=1}^N q \rho_i \left((\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \hat{e}_r^{ij} \right) (\hat{e}_r^{ij} \cdot \hat{e}_\alpha) \delta(t-t^*) \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{3} \cdot \hat{e}_\beta \Theta [R_i - |\vec{r} - \vec{r}_i(t)|]. \quad (\text{B.17})$$

Estas ecuaciones son análogas a las obtenidas para el caso bidimensional Si las esferas son mono-dispersas en tamaño, masa y material, el coeficiente de inelasticidad q es constante y por lo tanto $\mathbb{P}^{\text{inel}} = -q \mathbb{P}^{\text{elas}}$. En caso de que q no sea igual para todos los choques, entonces esta última igualdad no puede afirmarse que sea cierta.

Siempre se cumple la relación $\mathbb{P}^{\text{col}} = \mathbb{P}^{\text{elas}} + \mathbb{P}^{\text{inel}}$ de forma exacta, debido a la forma en que estos últimos tensores fueron definidos.

B.3.2. Medición en la simulación 3D

Se han medido los distintos términos anteriormente definidos, (B.12), (B.13), (B.14), (B.15), (B.16) y (B.17), en una simulación numérica de caja vibrada como la utilizada en el capítulo 7. Se utilizaron los mismos parámetros especificados en la sección 7.3.

Cálculo de términos inelásticos en las ecuaciones de balance

El resultado de la medición de (B.12) y (B.13), utilizando el cambio de momentum local, se muestra en la figura B.3. Para obtener la medición se debe integrar en el intervalo de tiempo considerado y dentro de la celda de medición, por lo que las unidades de medición coinciden con las del campo estudiado, en este caso momentum sobre tiempo. Se grafica el promedio local por cada posición y donde los extremos de la barra de error coinciden con los valores máximos y mínimos alcanzados para el promedio de las celdas a la misma altura.

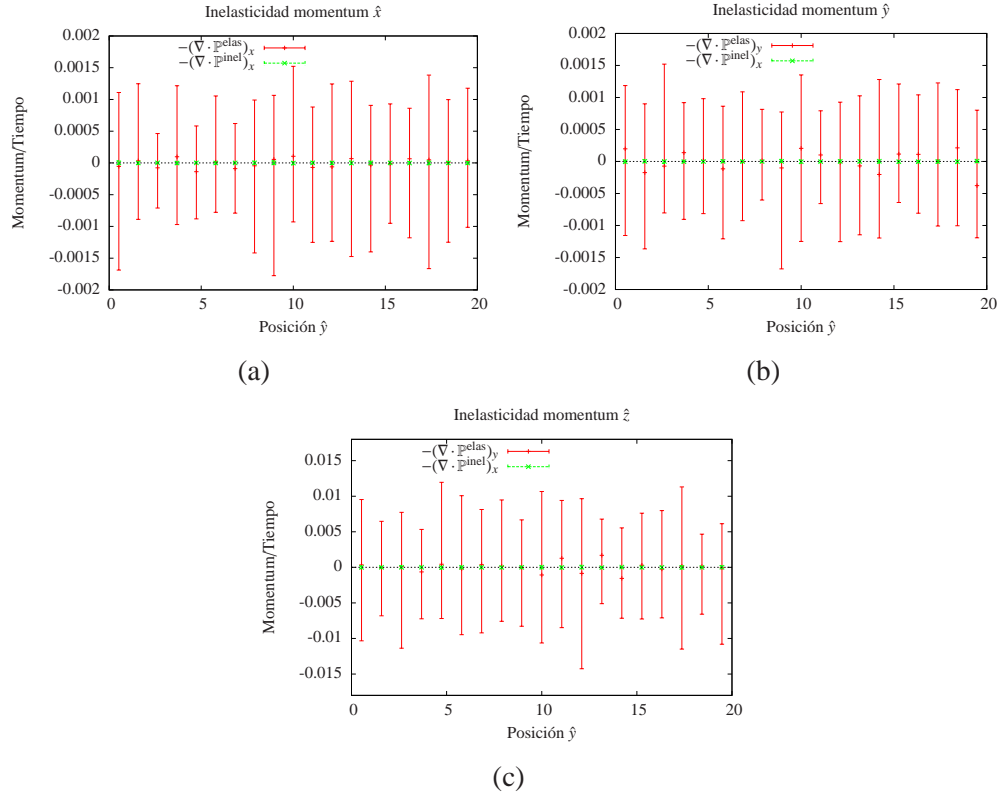


Figura B.3: Promedio de cada elemento de la igualdad (B.7) para cada componente. (a) Dirección \hat{x} . (b) Dirección \hat{y} . (c) Dirección \hat{z} .

La estructura de las tres direcciones nos indica que los términos inelásticos son muy pequeños frente a los términos elásticos. Este tamaño relativo se debe a que el coeficiente de inelasticidad es pequeño en este caso. Esto implica que \mathbb{P}^{col} será similar a \mathbb{P}^{elas} en promedio.

Donde el efecto de disociar los términos proporcionales a la inelasticidad se hace patente es en el gráfico que explicita la pérdida local de energía, mostrado en la figura B.4. En ella se observa que el término $V_{3D} \cdot (\nabla \cdot \mathbb{P}^{\text{inel}})$ (B.15) es siempre negativo y de tamaño considerable, de modo que los términos relacionados con cada tensor elástico (B.14) e inelástico son notoriamente distintos. Se ha incluido en la figura el término $-\vec{V} \cdot (\nabla \cdot \mathbb{P}^{\text{col}})$, que es la suma de los otros dos, y es patente el hecho de que se puede dar cuenta de la pérdida de energía con el término inelástico, y el término elástico solo genera una dispersión de los promedios.

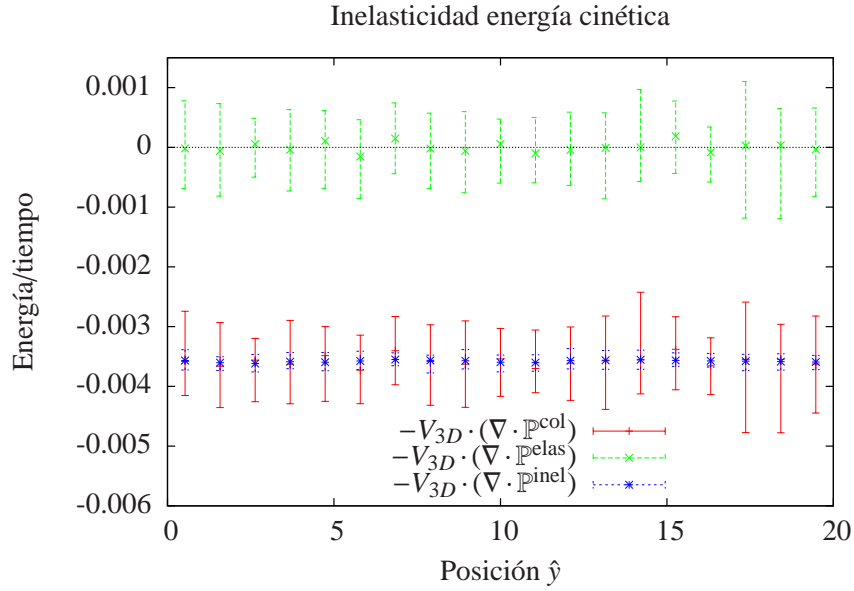


Figura B.4: Elementos del desglose del término sumidero de energía promediados en el tiempo

De esta forma, se ha mostrado como el efecto de la inelasticidad puede observarse al descomponer el efecto de la inelasticidad de los choques entre granos en las ecuaciones de balance microscópicas de momentum y energía.

Presión elástica e inelástica

Los tensores de presión elástica (B.16) e inelástica (B.17) se muestran por componentes en la figura B.5. Se omite el tensor de presión colisional, pues al ser la suma de los dos tensores graficados, y al comprobarse que el tensor inelástico es muy pequeño, el tensor de presión elástico es muy similar en promedio al tensor de presión colisional.

Se han omitido las componentes xz , yz y zz dado que por ser un sistema pseudo-2D las celdas no se dividen en la dirección \hat{z} y las integrales de estas componentes son por definición nulas.

Es posible observar que los tamaños de los componentes en el plano horizontal (xx , xy , yx e yy) tienen tamaños de dispersión similares, de modo que se reafirma la homogeneidad en promedio temporal, del plano xy . Esto se deduce de que una transformación rotacional dejaría este tensor sin cambios significativos. En cambio la dirección vertical tiene un tamaño superior al resto en su dispersión. Esta característica también se observa en el gráfico B.3.

Con esto se demuestra que es posible medir cada tensor por separado y que podrían guardar información útil sobre el sistema estudiado.

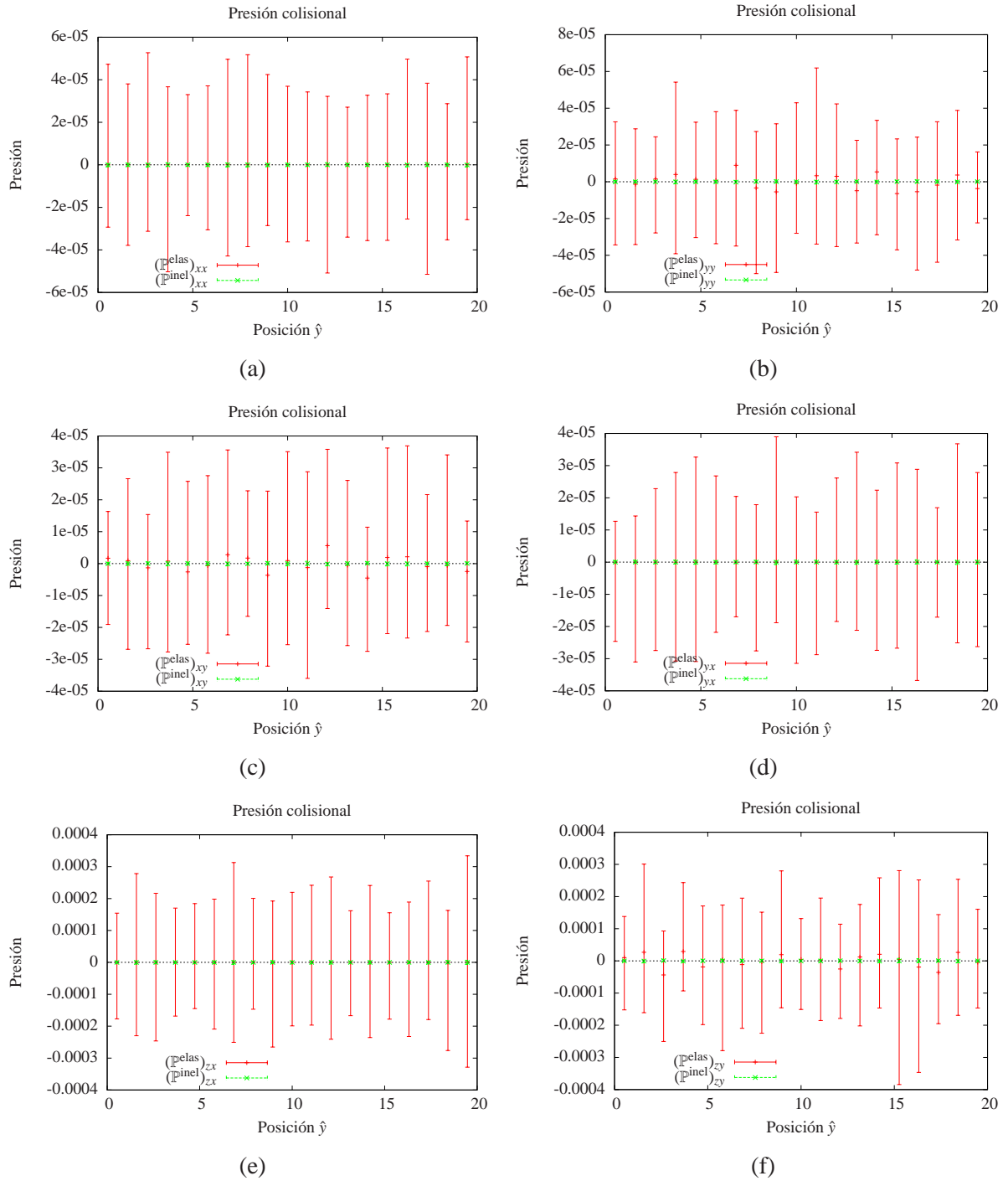


Figura B.5: Promedio de medición de los tensores de presión elástica \mathbb{P}^{elas} y presión inelástica \mathbb{P}^{inel} por altura. (a) Componentes xx . (b) Componentes yy . (c) Componentes xy . (d) Componentes yx . (e) Componentes zx . (f) Componentes zy .

B.4. Resumen

Se ha utilizado la descripción de las colisiones en el modelo de esferas duras para extraer información de los choques inelásticos y obtener, por ejemplo, la disipación de energía local, en sistemas

2D y 3D.

Junto con ello, se ha presentado una descomposición del tensor de presión colisional que puede ser útil para sistemas donde el coeficiente de inelasticidad q no sea igual para todos los choques. Esta descomposición en un tensor que no depende explícitamente de q y otro que si lo hace puede dar luces sobre la influencia de la inelasticidad en el sistema, pero no se ha probado en sistemas donde la relación $\mathbb{P}^{\text{inel}} = -q\mathbb{P}^{\text{elas}}$ no se cumpla, de modo que no se ha probado en que forma puede ser de ayuda este tratamiento.

Apéndice C

Factor de estructura dinámico y estático

C.1. Introducción

Al margen de todas las diferencias ya discutidas en este trabajo entre la definición usual de los campos en los medios granulares, usando la función delta de Dirac para localizar las propiedades, y la propuesta en este trabajo hay una diferencia en el factor de estructura, tanto estático como dinámico. Esta herramienta es fundamental para el estudio de fluidos ya que a longitudes de onda grandes ($k \rightarrow 0$) este codifica propiedades sobre el equilibrio y no equilibrio del fluido [19].

C.2. En un sistema bidimensional

Se parte el análisis examinando la autocorrelación de densidad de masa en dos dimensiones:

$$C_{\rho,\rho}(\vec{r}, t) = \int_V \langle \rho(\vec{r} + \vec{r}', t + t') \rho(\vec{r}', t') \rangle_{t'} dx' dy' - \rho^2 . \quad (\text{C.1})$$

Esta definición depende de la función densidad elegida. Se analiza en la práctica la función en el espacio de Fourier. Para el caso de la distribución de masa usando la función δ

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_i m_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) , \quad (\text{C.2})$$

donde m_i es la masa de la esfera i -ésima y \vec{r}_i la posición de su centro, se tiene la transformada de Fourier sobre $C_{\rho,\rho}$:

$$C_{\rho,\rho}^\delta(\vec{k}, t) = \left\langle \sum_{i,j} m_i m_j e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j(t) - \vec{r}_i(t+t'))} \right\rangle_{t'} - \rho^2 (2\pi)^2 \delta(\vec{k}) . \quad (\text{C.3})$$

Pero si se usa la definición de $\rho(\vec{r}, t)$ con la función de Heaviside (2.4) se tiene

$$\begin{aligned}
C_{\rho,\rho}^{\Theta}(\vec{k}, t) &= \int_V \int_V \langle \rho(\vec{r} + \vec{r}', t + t') \rho(\vec{r}', t') \rangle_{t'} dx' dy' e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} dx dy - \rho^2 (2\pi)^2 \delta(\vec{k}) \quad (C.4) \\
&= \left\langle \sum_{i,j} \left(\frac{2J_1(kR_i)}{kR_i} \right) \left(\frac{2J_1(kR_j)}{kR_j} \right) (\pi R_i^2) \rho_i (\pi R_j^2) \rho_j e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j(t) - \vec{r}_i(t+t'))} \right\rangle_{t'} \\
&\quad - \rho^2 (2\pi)^3 \delta(\vec{k}) \\
&= \left\langle \sum_{i,j} \left(\frac{2J_1(kR_i)}{kR_i} \right) \left(\frac{2J_1(kR_j)}{kR_j} \right) m_i m_j e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j(t) - \vec{r}_i(t+t'))} \right\rangle_{t'} - \rho^2 (2\pi)^3 \delta(\vec{k}) ,
\end{aligned}$$

donde V es el volumen total del sistema y J_1 es la función de Bessel de primer tipo de orden 1. Luego, si se impone que $R_i = R$ para todas las partículas esencialmente (incluido $\vec{k} = 0$) se tiene:

$$C_{\rho,\rho}^{\Theta}(\vec{k}, t) = \left(\frac{2J_1(kR)}{kR} \right)^2 C_{\rho,\rho}^{\delta}(\vec{k}, t) = G_{2D}(kR)^2 C_{\rho,\rho}^{\delta}(\vec{k}, t) , \quad (C.5)$$

y esta función de escalamiento en un sistema bidimensional (referida como $G_{2D}(kR)$) tiene como gráfico el mostrado en la figura C.1. Este resultado puede también ser alcanzado si se analiza a la función de densidad distribuida en el volumen como un producto de convolución de la función de densidad para masas puntuales (C.2) con un kernel:

$$\rho_{2D} = \int dx' dy' K(\vec{r} - \vec{r}') \rho(\vec{r}') , \quad (C.6)$$

con $K(\vec{r}) = \Theta(R - |\vec{r}|)$. De esta forma se puede desarrollar la transformada de Fourier que afecta directamente al kernel en (C.4) y llegar al mismo resultado presentado a través del teorema de convolución.

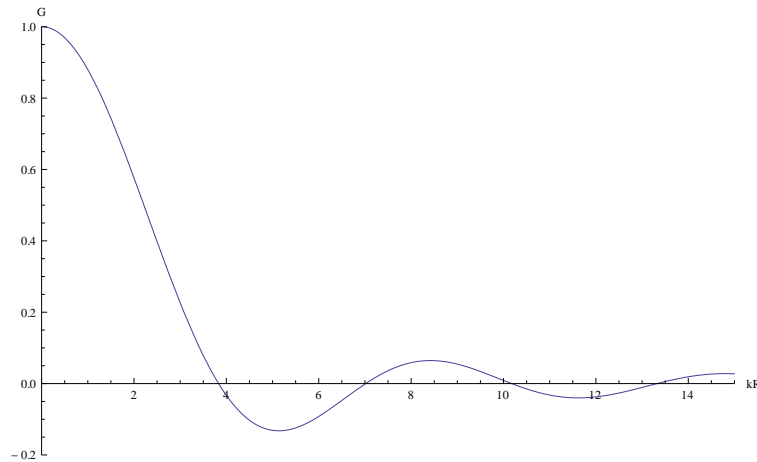


Figura C.1: $G_{2D}(kR)$. Escalamiento δ - Θ en 2 dimensiones.

Se debe notar que $G_{2D}(kR \rightarrow 0) = 1$, $G_{2D}(kR \rightarrow \infty) = 0$, y su integral para $kR \in \{0 \dots \infty\}$ es finita, así también para $G_{2D}(kR)^2$:

$$\int_0^{\infty} G_{2D}(kR) d(kR) = 2 \quad , \quad \int_0^{\infty} G_{2D}^2(kR) d(kR) = \frac{16}{3\pi} \approx 1.698 . \quad (C.7)$$

El gráfico C.1 corresponde al caso de \vec{k} continuo. En caso de tener un sistema con bordes periódicos o semi-periódicos se discretizan estos vectores y no se alcanzan todos los valores de kR .

Luego, dado que hay una modificación sobre $C_{\rho,\rho}$ también se modifica la función de dispersión intermedia, definida por:

$$F(\vec{k}, t) = \frac{1}{\rho} \int_V dx dy e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}} C_{\rho,\rho}(\vec{r}, t) = \frac{C_{\rho,\rho}(\vec{k}, t)}{\rho} , \quad (\text{C.8})$$

quedando definidas dos funciones comparables según la función correlación que se use:

$$F^\Theta(\vec{k}, t) = \frac{C_{\rho,\rho}^\Theta(\vec{k}, t)}{\rho} = G_{2D}^2(kR) \frac{C_{\rho,\rho}^\delta(\vec{k}, t)}{\rho} = G_{2D}^2(kR) F^\delta(\vec{k}, t) . \quad (\text{C.9})$$

Este escalamiento se replica en el factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$, definido como la transformada de Fourier temporal de la función de dispersión intermedia, es decir:

$$S(\vec{k}, \omega) = \int_{t_0}^{\infty} F(\vec{k}, t) e^{-i\omega t} dt , \quad (\text{C.10})$$

por lo que se deduce que

$$S^\Theta(\vec{k}, \omega) \equiv G_{3D}(kR) S^\delta(\vec{k}, \omega) . \quad (\text{C.11})$$

Al observar longitudes de onda grandes ($k \rightarrow 0$) la función de escalamiento $G_{2D} \rightarrow 1$ por lo que no habría diferencia, pero mientras más el análisis se aleje de ese valor, G_{2D} se vuelve más relevante. Esta función G_{2D} por cuanto puede cuantificar que tan lejos se está de las longitudes de onda grande. Esta ecuación final deja de manifiesto la importancia de considerar este sistema con tamaños de granos comparables con el tamaño del sistema de forma de reflejar en el factor de estructura la distribución de masa dentro de cada disco.

C.3. En un sistema tridimensional

Existen sutiles diferencias de definición que distinguen a los casos bidimensional y tridimensional. Debido a ello se sigue el mismo proceso para comparar las definiciones como han sido estudiadas en el capítulo 6 junto con las usualmente usadas en la literatura. Se inicia con la definición de la autocorrelación de densidad de masa:

$$C_{\rho,\rho}(\vec{r}, t) = \int_V \langle \rho(\vec{r} + \vec{r}', t + t') \rho(\vec{r}', t') \rangle_{t'} dr'^3 - \rho^2 , \quad (\text{C.12})$$

donde ρ es la densidad de masa promedio en todo el espacio. Como esta definición depende de la función densidad de masa elegida, si se toma el caso de la distribución de masa usando la función delta de Dirac:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_i m_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) , \quad (\text{C.13})$$

donde m_i es la masa de la esfera i -ésima y \vec{r}_i la posición de su centro, se tiene que la transformada de Fourier sobre $C_{\rho,\rho}$:

$$C_{\rho,\rho}^\delta(\vec{k}, t) = \left\langle \sum_{i,j} m_i m_j e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j(t) - \vec{r}_i(t+t'))} \right\rangle_{t'} - \rho^2 (2\pi)^3 \delta(\vec{k}) . \quad (\text{C.14})$$

Pero si se utiliza la definición de $\rho(\vec{r}, t)$ propuesta en este trabajo (6.2), e imponiendo que todas las partículas tengan radio $R_i = R$, se tiene:

$$\begin{aligned}
C_{\rho,\rho}^{\Theta}(\vec{k}, t) &= \int_V \int_V \langle \rho(\vec{r} + \vec{r}', t + t') \rho(\vec{r}', t') \rangle_{t'} dr'^3 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} dr^3 - \rho^2 (2\pi)^3 \delta(\vec{k}) \\
&= \left(\frac{3}{(kR)^3} (\sin(kR) - kR \cos(kR)) \right)^2 \left\langle \sum_{i,j} \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right)^2 \rho_i \rho_j e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j(t) - \vec{r}_i(t+t'))} \right\rangle_{t'} \\
&\quad - \rho^2 (2\pi)^3 \delta(\vec{k}) \\
&= \left(\frac{3}{(kR)^3} (\sin(kR) - kR \cos(kR)) \right)^2 \left\langle \sum_{i,j} m_i m_j e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j(t) - \vec{r}_i(t+t'))} \right\rangle_{t'} - \rho^2 (2\pi)^3 \delta(\vec{k}) .
\end{aligned}$$

Luego, esencialmente (incluido $\vec{k} = 0$) se tiene:

$$C_{\rho,\rho}^{\Theta}(\vec{k}, t) = \left(\frac{3}{(kR)^3} (\sin(kR) - kR \cos(kR)) \right)^2 C_{\rho,\rho}^{\delta}(\vec{k}, t) = G_{3D}(kR)^2 C_{\rho,\rho}^{\delta}(\vec{k}, t) , \quad (C.15)$$

y esta función escalamiento (referida como $G_{3D}(kR)$) tiene como gráfico el mostrado en la figura C.2. Este resultado es análogo al caso bidimensional y puede haber sido obtenido por el teorema de convolución con un kernel adecuado en tres dimensiones.

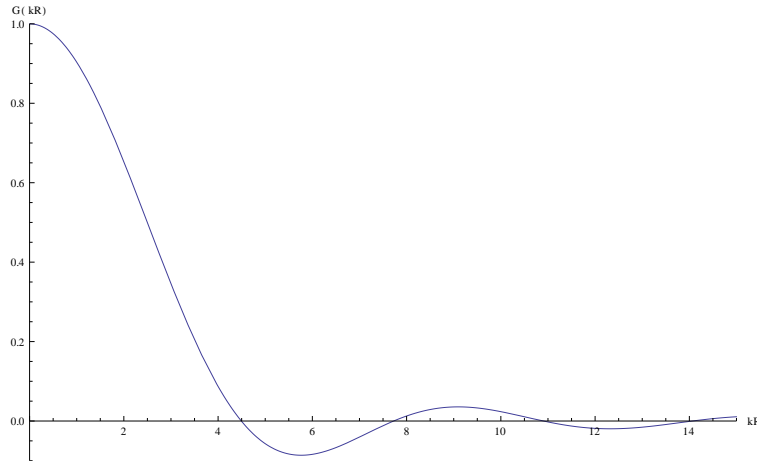


Figura C.2: Gráfico de $G_{3D}(kR)$ usado en el escalamiento δ - Θ

Esta función tiene buenas propiedades: es continua con derivada continua, $G(kR \rightarrow 0) = 1$ y $G(kR \rightarrow \infty) = 0$ por lo que es seguro que no diverge. A su vez, las integrales de $G_{3D}(kR)$ y $[G_{3D}(kR)]^2$ con $kR \in [0, \infty]$ son finitas.

Este resultado afecta directamente la definición del factor de estructura dinámico

$$F_{\rho\rho}^{\Theta}(\vec{k}, t) = \frac{C_{\rho\rho}^{\Theta}(\vec{k}, t)}{\rho} = G_{3D}^2(kR) \frac{C_{\rho\rho}^{\delta}(\vec{k}, t)}{\rho} = G_{3D}^2 F_{\rho\rho}^{\delta}(\vec{k}, t) , \quad (C.16)$$

donde ρ es la densidad promedio global. Esto en la práctica significa que la consideración de la distribución de masa sobre el volumen de la esfera afecta directamente al factor de estructura, donde la función G_{3D} que depende solamente del módulo de \vec{k} . Este resultado se repite para el caso bidimensional.

C.4. Sobre \vec{k} en el espacio de Fourier

Como se estudia una simulación tridimensional con condiciones de borde periódicas en las direcciones \hat{x} e \hat{y} , se debe tener en cuenta al hacer la transformada de Fourier, de la siguiente forma. La transformada de Fourier de una función arbitraria $f(\vec{x}, t)$ es:

$$\begin{aligned} F(\vec{k}, t) &= \iint_A f(\vec{x}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} dx dy , \\ F(\vec{k}, t) &= \iint_A f(\vec{x} + L_x \hat{x} + L_y \hat{y}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} dx dy . \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

Haciendo uso del cambio de variables $\vec{x}' = \vec{x} + L_x \hat{x} + L_y \hat{y}$ se tiene:

$$\begin{aligned} F(\vec{k}, t) &= \iint_{A'} f(\vec{x}', t) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{x}' - L_x \hat{x} - L_y \hat{y})} dx dy , \\ F(\vec{k}, t) &= e^{i\vec{k} \cdot (L_x \hat{x} + L_y \hat{y})} \iint_{A'} f(\vec{x}', t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}'} dx' dy' , \\ F(\vec{k}, t) &= e^{i\vec{k} \cdot (L_x \hat{x} + L_y \hat{y})} F(\vec{k}, t) , \\ \Rightarrow 1 &= e^{i(k_x L_x + k_y L_y)} , \\ \Rightarrow k_x L_x + k_y L_y &= 2\pi n \text{ con } n \in \mathbf{N} . \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Seguindo el mismo razonamiento para periodicidad en x e y independientemente se deduce que

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x} , \quad (\text{C.19})$$

$$k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y} , \quad (\text{C.20})$$

con n_x y n_y en los enteros. Y se cumple que $n = n_x + n_y$.

En el ejemplo utilizado de la caja vibrada la dirección \hat{z} no está la condición de periodicidad para poder incorporarlo a este análisis. Sin embargo se puede definir:

$$k_z = \frac{\pi m_z}{L_z} , \quad (\text{C.21})$$

donde se tiene que m_z es un número natural y $L_z \ll L_x$ y $L_z \ll L_y$.

Estas observaciones generan que al analizar el factor de estructura dinámico no todos los valores de \vec{k} son alcanzables en el plano xy , de modo que no se puede pensar en integrar en esas direcciones, sino realizar sumatorias infinitas, que gracias a las propiedades de $G_{3D}(kR)$ pueden ser truncadas adecuadamente.

Para el caso bidimensional, donde hay una condición de borde periódica solo en la dirección \hat{x} parte de estos resultados también son aplicables en esa dirección.

C.5. Resumen

Se ha descrito el factor de estructura dinámico y estático en dos y tres dimensiones, y se ha notado que pueden relacionarse los resultados obtenidos para masas puntuales y granos con volumen a través de una función de escalamiento G . Se ha caracterizado esta función y se ha observado que para longitud de onda grande el escalamiento no es tan relevante y ambas definiciones del factor de estructura coinciden. A medida que la longitud de onda decrece la diferencia entre ambas se acentúa, y la función G caracteriza esta diferencia.

Esto implica que los resultados obtenidos hasta ahora en la literatura usando la función de distribución de masa con partículas puntuales, (C.2) en 2D y (C.13) en 3D, puede ser llevada de manera muy simple al esquema presentado en este trabajo a través de la función de escalamiento G adecuada.