

CAPÍTULO 24

Propiedades de transporte
en gases granulares forzados.

MOISÉS GARCÍA CHAMORRO

Los medios granulares son sistemas complejos formados por un gran número de partículas macroscópicas habitualmente denominadas *granos* que se mueven libremente en el vacío o inmersas en un fluido intersticial y cuya única interacción se debe a fuerzas de carácter repulsivo no existiendo fuerzas de cohesión ni de largo alcance entre ellos. Esta clase de materiales está muy presente en la naturaleza en ejemplos como polvo, arena, cereales, sal, e incluso en los grandes anillos planetarios como el de Saturno o material interestelar. Son también protagonistas en numerosos procesos en la industria agrícola, construcción, minería, química y farmacéutica. De igual manera entender la física subyacente en los procesos en los que estos materiales están involucrados puede ayudar a la descripción de fenómenos naturales como la erosión de suelos, movimiento de dunas, formación de bancos de sedimentación submarina (de vital importancia para la navegación), así como eventos catastróficos como flujos piroclásticos y avalanchas de nieve. Recientes estudios apuntan que las pérdidas económicas debido al desconocimiento de la física granular ascienden a miles de millones de euros al año en todo el mundo (Andreotti, Forterre y Pouliquen, 2013).

Existen además importantes razones puramente científicas para entender las leyes que rigen su comportamiento. Bajo ciertas condiciones estos materiales pueden *fluir* y exhiben la mayoría de los fenómenos hidrodinámicos conocidos como flujos tangenciales, de Taylor-Couette, convección de Bénard, etc., así como algunos fenómenos propios aún poco estudiados, que no tienen homólogo en los fluidos regulares, como las fuentes de tipo *geyser* llamados *oscilones* (Umbanhowar, Melo y Swinney, 1996).

Durante los últimos años se ha experimentado un creciente interés en el análisis de fluidos granulares rarificados a través de la teoría cinética presentando diversos modelos para ello. Uno de ellos es el modelo de *gas granular*. Este modelo está compuesto por partículas con un grado de inelasticidad caracterizado por un coeficiente de restitución normal α que se supone constante. Se supone también que la densidad numérica es suficientemente baja como para que sólo puedan darse colisiones binarias entre partículas. Debido a la inelasticidad, las partículas disipan parte de su energía cinética en cada colisión transmitiéndose a grados de libertad internos (deformaciones plásticas, aumento de temperatura...) y no vuelve a ser liberada al sistema lo cual se traduce en un *enfriamiento* (pérdida de energía cinética) continuado de todo el sistema apareciendo fenómenos de clusterización (Chapman y Cowling, 1994).

Para mantener el sistema en estado de flujo rápido se inyecta de energía por medio de fuerzas externas no conservativas que compensan la pérdida debido a las colisiones. En

experimentos la energía puede introducirse a través de los contornos del sistema como paredes vibrantes o de forma homogénea bajo ciertas condiciones, como camas de aire a presión. Las dificultades que se encuentran en la experimentación, tales como la presencia de gradientes espaciales en los campos hidrodinámicos en el primer ejemplo o la restricción de sistemas en dos dimensiones en el segundo, pueden salvarse mediante la inyección de energía a través de fuerzas externas homogéneas o termostatos. Este tipo de fuerzas homogéneas en la mayoría de los casos es muy difícil de implementar experimentalmente por lo que se recurre a la simulación por ordenador.

Aunque el uso de termostatos es muy habitual en simulaciones numéricas, la influencia del termostato sobre las propiedades dinámicas del sistema es todavía un campo de interés tanto desde el punto de vista fundamental como práctico en el que todavía se están realizando importantes contribuciones (Goldhirsch, 2003).

En este trabajo se estudia el efecto de una clase de termostato doble compuesto por una fuerza estocástica que calienta de manera homogénea el sistema y otra de arrastre que frena las partículas proporcionalmente a su velocidad de una forma similar a como lo hiciera la fricción producida por un fluido viscoso en el que estuvieran inmersas. El objetivo fundamental es obtener las propiedades termodinámicas de esta clase de gases a través de los coeficientes de transporte. Para ello previamente se caracteriza la forma de la función de distribución de velocidades a través del cálculo de sus cumulantes. Los coeficientes de transporte ligados a gradientes de primer orden en los campos hidrodinámicos son calculados mediante el método de Chapman-Enskog sobre un modelo de esferas duras inelásticas (IHS), tanto en sistemas diluidos como de densidad finita (Garzó, Chamorro y Vega-Reyes, 2013).

1. Estados homogéneos.

En primer lugar se ha examinado la influencia del termostato sobre la función de distribución de velocidades de un gas granular diluido en estado estacionario homogéneo (Chamorro, Vega-Reyes y Garzó, 2013). Para ello se usa la ecuación de Boltzmann debidamente modificada para la dinámica de partículas inelásticas. Se ha comprobado de esta manera que la función de distribución de velocidades, expresada como una expansión de polinomios ortogonales de Sonine (Brilliantov y Pöschel, 2004), es función de la temperatura granular no sólo a través de la velocidad escalada con la temperatura sino también del parámetro de la intensidad del termostato estocástico, también escalado.

Complementando lo anterior se han realizado diferentes simulaciones mediante el método de Monte Carlo (DSMC) para ser contrastadas con las expresiones teóricas (Bird, 1994).

En la Figura 1 se muestra la dependencia del segundo coeficiente de Sonine con el coeficiente de restitución normal, que mide la inelasticidad de las partículas para un valor

del parámetro del termostato $\xi^*=1,69$. Puede observarse que los resultados obtenidos en la simulación (puntos) se ajustan perfectamente a la predicción teórica (línea).

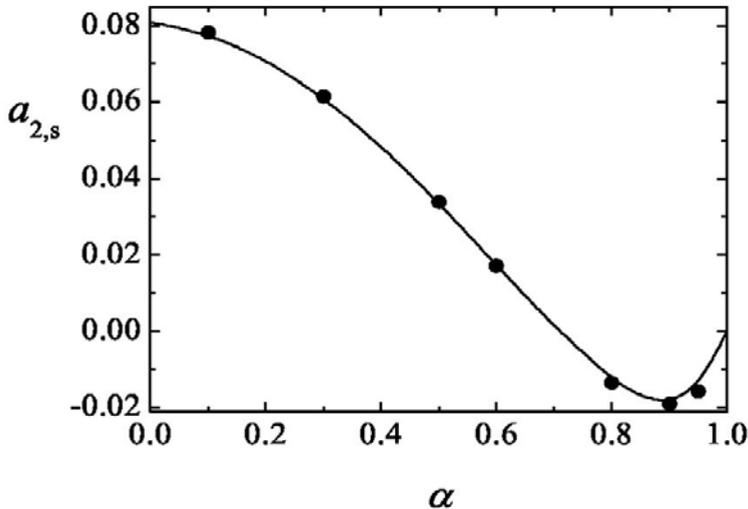


Figura 1. Segundo coeficiente de Sonine $a_{2,s}(\alpha, \xi^*)$

2. Coeficientes de transporte.

El siguiente paso es la obtención de los coeficientes de transporte de Navier-Stokes a partir de la ecuación de Enskog (gases moderadamente densos) mediante el desarrollo perturbativo de Chapman-Enskog alrededor de la versión local del estado homogéneo anterior.

Los flujos de calor y momento han sido determinados a primer orden en desviaciones de los campos hidrodinámicos desde su estado estacionario y homogéneo. Un punto de sutil importancia en la obtención de estos coeficientes ha sido que el enfriamiento colisional no puede ser compensado localmente por la acción de unos termostatos generalizados. Este hecho conlleva que la función de distribución de referencia a orden cero depende del tiempo a través de su dependencia con la temperatura. Aparecen entonces nuevas dificultades conceptuales y prácticas no presentes en el caso de gases granulares no forzados. Por otro lado, para simplificar el análisis y dado que únicamente estamos interesados en el transporte a primer orden de desviaciones desde el estado de referencia, se han considerado condiciones estacionarias para proporcionar las formas explícitas de los coeficientes de transporte. De igual forma que en el apartado anterior, las predicciones teóricas son comparadas con recientes simulaciones, en este caso simulaciones dinámicas de Langevin (Gradenigo, Sarracino, Villamaina y Puglisi, 2011).

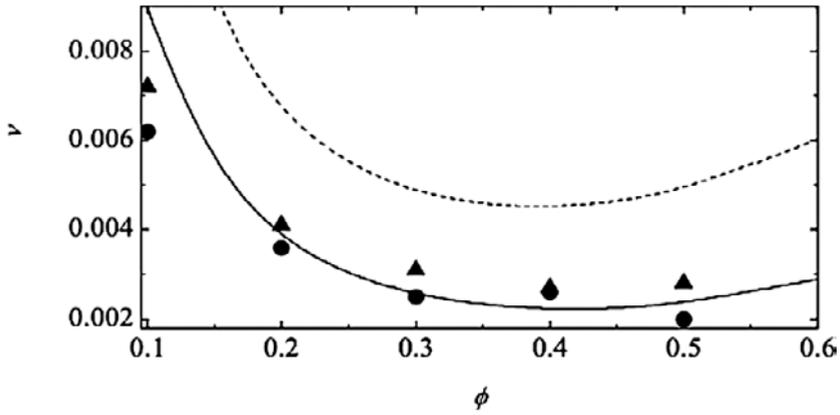


Figura 2. Viscosidad cinemática en función del factor de empaquetamiento.

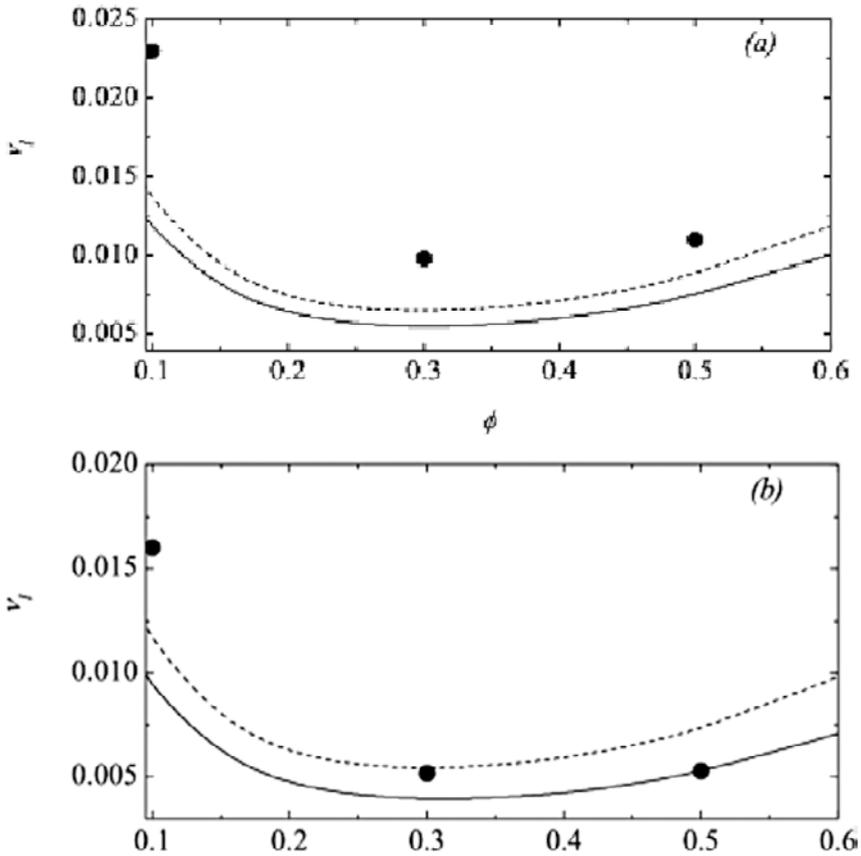


Figura 3. Viscosidad longitudinal en función del factor de empaquetamiento para $\alpha=0.6$ (panel a) y $\alpha=0.8$ (panel b).

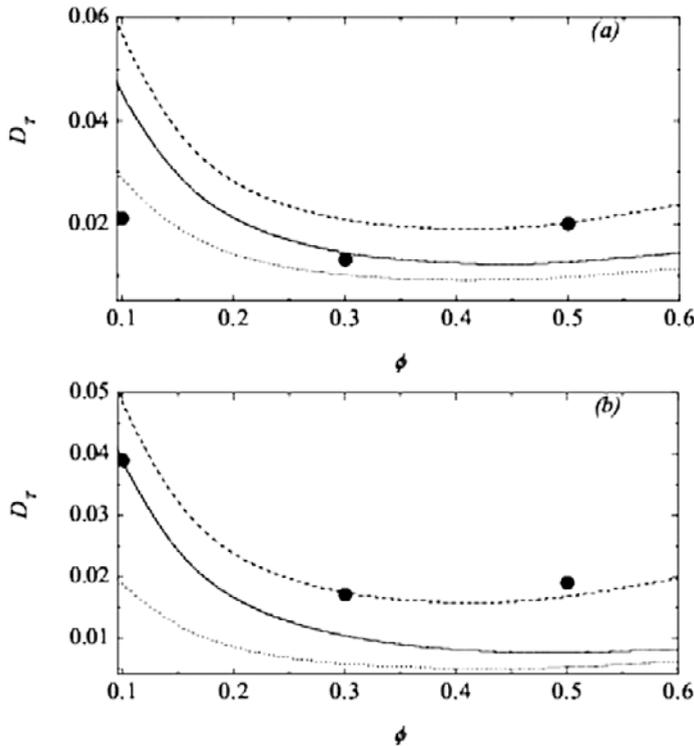


Figura 4. Difusividad térmica en función del factor de empaquetamiento para $\alpha=0.6$ (panel a) y $\alpha=0.8$ (panel b).

En la Figura 2 se muestra la viscosidad cinemática en función del factor de empaquetamiento, que es una medida de la densidad del sistema. La línea continua es nuestra predicción teórica mientras que la discontinua es la correspondiente a una estimación asumiendo la forma elástica de la viscosidad. Los puntos corresponden a la simulación de Langevin tomando factores de estructura estáticos (círculos) y dinámicos (triángulos).

Las Figuras 3 y 4 muestran la viscosidad longitudinal y la difusividad térmica respectivamente frente al factor de empaquetamiento para dos valores del coeficiente de restitución normal ($\alpha=0.6$ y $\alpha=0.8$). Al igual que en la Figura 2, las líneas continuas son nuestras predicciones teóricas mientras que las discontinuas son asumiendo las expresiones elásticas. En la Figura 4 la línea punteada es nuestra predicción teórica asumiendo un caso especial de termostato local. Los símbolos son los resultados de simulación.

Como puede observarse la comparación entre predicciones teóricas y simulaciones muestra en general un excelente acuerdo para la viscosidad cinemática en un amplio rango de densidades aunque se observan algunas discrepancias en la viscosidad longitudinal y en la difusividad térmica en los casos más densos. Sorprendentemente, en el caso de la difusividad térmica, la comparación concuerda mejor con la forma elástica de la predicción teórica en el

caso más inelástico estudiado. Este desacuerdo puede estar provocado en parte por el hecho de que mientras las simulaciones han sido realizadas para valores finitos de los gradientes, las expresiones de Enskog para los coeficientes de transporte únicamente son aplicables en el límite de gradientes nulos. Además, dado que las discrepancias aparecen conforme el sistema se va haciendo más denso, esto puede ser un indicador de las limitaciones de la teoría de Enskog, la cual está basada en la hipótesis de caos molecular que se restringe a sistemas donde existen únicamente colisiones binarias.

REFERENCIAS

- Andreotti, B.; Forterre, Y. y Pouliquen, O. (2013). *Granular media. Between Fluid and Solid*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Bird, G.A. (1994). *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Clarendon.
- Brilliantov, N. V. y Pöschel, T. (2004). *Kinetic Theory of Granular Gases*. Oxford: Oxford University Press.
- Chamorro, M. G.; Vega-Reyes, F. y Garzó, V. (2013). Homogeneous steady states in a granular fluid driven by a stochastic bath with friction. *Journal of Statistical Mechanics*, P07013. doi:10.1088/1742-5468/2013/07/P07013
- Chapman, S. y Cowling, T. G. (1994). *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Garzó, V.; Chamorro, M. G. y Vega-Reyes, F. (2013). Transport properties for driven granular fluids in situations close to homogeneous steady states. *Physical Review E*, 87(3). doi: 10.1103/PhysRevE.87.032201
- Goldhirsch, I. (2003). Rapid Granular Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 35, 267-293.
- Gradenigo, G.; Sarracino, A.; Villamaina, D. y Puglisi, A. (2011). Fluctuating hydrodynamics and correlation lengths in a driven granular fluid. *Journal of Statistical Mechanics*, P08017. doi: 10.1088/1742-5468/2011/08/P08017
- Umbanhowar, P. B.; Melo, F. y Swinney, H. L. (1996). Localized excitations in a vertically vibrated granular layer. *Nature*, 382, 793–796.

APUNTES BIOGRÁFICOS

Moisés García Chamorro (Madrid, 3 de diciembre de 1980) es Licenciado en Ciencias Físicas y Máster en Contaminación Ambiental por la Universidad de Extremadura. Ha trabajado como investigador en el Área Física del Aire en modelos climatológicos y desde 2011 realiza su Doctorado en Física Teórica en el Departamento de Física de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Extremadura bajo la supervisión de los profesores Vicente Garzó Puertos y Francisco Vega Reyes.

Contacto: moises@unex.es