

Estudio del comportamiento hidrodinámico de un gas granular mediante simulaciones computacionales directas de Monte Carlo

Antonio Astillero

Dept. de Tecnología de los Computadores
y de las Comunicaciones
Centro Universitario de Mérida
Universidad de Extremadura
E-06800 Mérida, Spain
aavivas@unex.es

Andrés Santos

Departamento de Física
Universidad de Extremadura
E-06071 Badajoz, Spain
andres@unex.es

Resumen

En este trabajo analizamos un caso paradigmático de sistema complejo como es un fluido granular en condiciones de flujo tangencial uniforme. Efectuamos simulaciones por ordenador empleando el método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC), mostrando que, con independencia de las condiciones iniciales, tras unas pocas colisiones por partícula el sistema alcanza un régimen hidrodinámico no newtoniano. La comparación de los resultados de simulación con un modelo reológico simplificado muestra un buen acuerdo.

1. Introducción

Como es bien sabido, en la descripción hidrodinámica de un fluido convencional las ecuaciones de balance de las densidades de las magnitudes conservadas (masa, cantidad de movimiento y energía) se convierten en ecuaciones cerradas cuando las ecuaciones constitutivas de los flujos de cantidad de movimiento y energía son conocidas. Dichas ecuaciones proporcionan la relación existente entre los flujos de momento y energía con las densidades conservadas y sus gradientes. Si los gradientes hidrodinámicos son débiles, podemos suponer que los flujos son lineales en esos gradientes, siendo esto conocido como la descripción hidrodinámica de Navier–Stokes (NS).

Por otro lado, incluso si los gradientes son intensos, es posible un régimen hidrodinámico (no newtoniano) más allá del de Navier–Stokes. El escenario convencional para la relajación hacia el “comportamiento hidrodinámico” en un gas convencional puede describirse del siguiente modo [1]. Dado un estado inicial arbitrario, la evolución tiene lugar en dos etapas sucesivas. En primer lugar, durante la denominada etapa *cinética* hay una relajación rápida (que dura unas pocas colisiones por partícula) a una función de distribución de velocidades “universal” (o “normal”) $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t)$ que es una funcional de los campos hidrodinámicos (densidad numérica, velocidad media y temperatura). Posteriormente, la etapa “hidrodinámica” está descrita por una evolución más lenta de los campos hidrodinámicos a medida que se aproximan o bien a un estado de equilibrio o bien a un estado estacionario de no equilibrio impuesto externamente. La primera de las dos etapas es muy sensible a la preparación inicial del sistema, mientras que en la etapa hidrodinámica el sistema prácticamente ha “olvidado” los detalles de las condiciones iniciales (excepto por una dependencia implícita de las condiciones iniciales a través de los campos hidrodinámicos). Si los gradientes hidrodinámicos son lo suficientemente pequeños cuando se alcanza la etapa hidrodinámica, ésta puede ser descrita por los términos de Navier–Stokes del desarrol-

lo de Chapman–Enskog [2]. No obstante, una función de distribución de velocidades normal (o hidrodinámica) no se encuentra restringida exclusivamente al dominio de Navier–Stokes, sino que puede existir también en situaciones muy alejadas del equilibrio (régimen no newtoniano) [3].

Recientemente, se ha despertado un gran interés, tanto desde un punto de vista científico como tecnológico, por el estudio de los medios granulares [4, 5]. Cuando las partículas del medio granular se mantienen en un estado de agitación constante, se dice que estamos ante un “fluido granular”. En ese caso, es posible aplicar para su estudio muchos de los conceptos y métodos desarrollados para los fluidos convencionales. Sin embargo, la aplicabilidad de una descripción hidrodinámica a fluidos granulares no es del todo evidente [6]. En particular, la no conservación de la energía debido a la inelasticidad de las colisiones partícula–partícula ocasiona la aparición de un término sumidero en la ecuación de balance de la energía. Dado que la escala temporal para la “temperatura granular” está dada por dicho término sumidero, además de por los gradientes espaciales, pudiera ocurrir que el papel de la temperatura como variable hidrodinámica (lenta) dejara de ser cierto a medida que la disipación aumentara. Sin embargo, al menos en el régimen de Navier–Stokes, hay evidencias convincentes tanto teóricas [7, 8], como de simulaciones en ordenador [9, 10, 11] y experimentos [12, 13, 14] que apoyan la validez del tratamiento hidrodinámico de los fluidos granulares. Por otra parte, la inherente falta de separación de escalas espaciales o temporales en gases granulares sometidos a cizalladura invalida una descripción de Navier–Stokes, de modo que la aplicación de la hidrodinámica a esos estados ha sido motivo de controversia [15, 16, 17]. Es sabido que el escenario de relajación hacia el comportamiento hidrodinámico descrito más arriba se cumple en dos casos límite: disipación finita en ausencia de gradientes (es decir, en la evolución hacia el estado de enfriamiento homogéneo [11]) y disipación nula pero gradientes altos [3]. Teniendo en cuenta esto, la pregunta que queremos

abordar en este trabajo es si ese escenario que acabamos de discutir puede seguir aplicándose a gases granulares con una fuerte disipación y en el régimen no newtoniano.

2. Simulaciones de Monte Carlo

Con la finalidad de clarificar la cuestión anterior y su posible respuesta, consideramos un gas tridimensional de esferas duras inelásticas en condiciones de flujo tangencial uniforme [18] descrito en el sistema de referencia lagrangiano. Podemos justificar la elección de este tipo particular de flujo en base a tres razones principales [19]. En primer lugar, es un flujo sencillo desde un punto de vista macroscópico puesto que sólo hay un gradiente hidrodinámico ($a = \partial u_x / \partial y$) que, además, es constante. En segundo lugar, este flujo tiene un estado estacionario (resultado del balance entre el enfriamiento debido a la inelasticidad de las colisiones y el calentamiento viscoso) que es inherentemente no newtoniano [20]. Por último, puesto que tanto la densidad n como la velocidad media $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ son independientes del tiempo, la posible evolución hacia el régimen hidrodinámico está gobernada por la evolución temporal de la temperatura granular $T(t)$, que es precisamente la magnitud que pone en duda la aplicabilidad de una descripción hidrodinámica.

Con la finalidad de comprobar de modo cuidadoso si el régimen hidrodinámico existe o no, hemos resuelto la ecuación de Boltzmann correspondiente a un gas de esferas duras inelásticas en condiciones de flujo tangencial uniforme dada por

$$(\partial_t - aV_y \partial_{v_x}) f(\mathbf{V}, t) = J[f(t), f(t)], \quad (1)$$

donde $J[f, f]$ es el operador de Boltzmann para colisiones inelásticas y $\mathbf{V} \equiv \mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r})$ es la llamada velocidad peculiar. Para resolver la ecuación (1) hemos hecho uso del método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC) [21]. En este problema se implementa el flujo tangencial uniforme trabajando directamente en el sistema de referencia no inercial lagrangiano. Dado que la ecuación (1)

es uniforme, es necesario guardar las velocidades (peculiares) $\{\mathbf{V}_i(t)\}$ de las N partículas y además no hay necesidad de dividir el sistema en capas o de aplicar condiciones de contorno.

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

$$V_{ix}(t + \delta t) = V_{ix}(t) - V_{iy}(t)a\delta t. \quad (2)$$

En la etapa de colisiones, del total de parejas de partículas posibles en el sistema se toman aleatoriamente

$$\mathcal{N} = \frac{N}{2\sqrt{2}} \frac{w\delta t}{\lambda^0} \quad (3)$$

parejas candidatas a colisionar, donde $w \propto \sqrt{T(t)}$ es una estimación superior de la velocidad relativa máxima en todo el sistema y λ^0 es el recorrido libre medio. La probabilidad de aceptar la colisión en cada una de las \mathcal{N} parejas candidatas es proporcional a la velocidad relativa de las dos partículas de la pareja. Si se acepta la colisión, las velocidades de ambas partículas se modifican de acuerdo con las reglas de colisión inelástica, las cuales están caracterizadas por un coeficiente de restitución normal α . Los parámetros técnicos del problema son $\delta t = 10^{-3}\tau^0\sqrt{T^0/T}$, donde τ^0 es un tiempo característico del orden del tiempo medio entre colisiones inicial y T^0 es la temperatura inicial, las cantidades hidrodinámicas se actualizan cada 4 pasos de tiempo y se guardan cada 160, y hemos tomado $N = 10^4$ partículas. Además, los resultados son promediados sobre 100 realizaciones independientes para mejorar la estadística.

Los valores del coeficiente de restitución considerados han sido $\alpha = 0.5, 0.7$ y 0.9 . Para cada valor de α , se han tomado cuatro valores diferentes del gradiente de velocidad: $a = 0.01/\tau^0$, $a = 0.1/\tau^0$, $a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$. Los dos valores primeros del gradiente de velocidad ($a = 0.01/\tau^0$ y $a = 0.1/\tau^0$) son lo suficientemente pequeños para corresponder a casos de enfriamiento (es decir, en

los que la temperatura disminuye en el tiempo por dominar el efecto de las colisiones), incluso para el sistema menos inelástico ($\alpha = 0.9$), mientras que los otros dos valores ($a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$) son lo suficientemente grandes para representar casos de calentamiento (es decir, en los que la temperatura aumenta en el tiempo por dominar el efecto de la viscosidad), incluso para el sistema más inelástico ($\alpha = 0.5$). Para cada uno de los doce pares (α, a) , se han tomado cinco condiciones iniciales diferentes, de modo que en total se han simulado sesenta estados independientes. La primera condición inicial (que denotaremos por A) está representada por la función de distribución de velocidades correspondiente a la aproximación de equilibrio local, es decir,

$$f^0(\mathbf{V}) = n (m/2\pi T^0)^{3/2} e^{-mV^2/2T^0}. \quad (4)$$

Las otras cuatro condiciones iniciales presentan la forma altamente anisotrópica

$$f^0(\mathbf{V}) = \frac{n}{2} \left(\frac{m}{2\pi T^0} \right)^{1/2} e^{-mV_z^2/2T^0} \times [\delta(V_x - V^0 \cos \phi) \delta(V_y + V^0 \sin \phi) + \delta(V_x + V^0 \cos \phi) \delta(V_y - V^0 \sin \phi)], \quad (5)$$

donde $V^0 \equiv \sqrt{2T^0/m}$ es la velocidad térmica inicial, $\phi \in [0, \pi]$ es el ángulo que caracteriza cada condición particular y δ es la función delta de Dirac. Los cuatro valores de ϕ considerados son $\phi = k\pi/4$ con $k = 0, 1, 2$ y 3 ; denotaremos las respectivas condiciones iniciales del tipo (5) como B0, B1, B2 y B3, respectivamente.

3. Resultados

La resolución de la ecuación de Boltzmann (1) empleando el método DSMC nos permite seguir la evolución temporal de los momentos de la velocidad, tales como la temperatura granular $T(t)$ y el tensor de presiones $\mathbf{P}(t)$, así como la propia función de distribución de velocidades $f(\mathbf{V}, t)$.

En las figuras 1 y 2 se representa la evolución de la temperatura T/T^0 , la tensión tangencial (reducida) $-P_{xy}/nT$ y la diferencia de

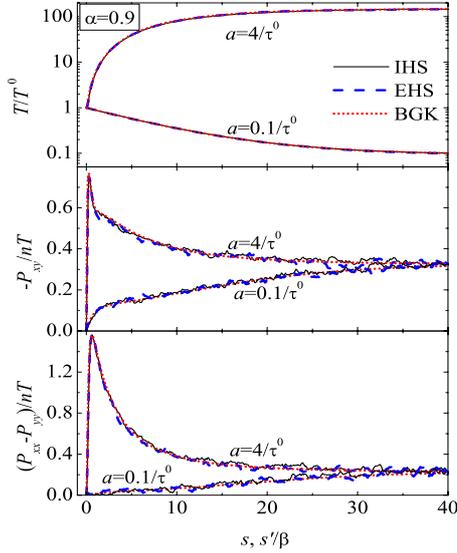


Figura 1: Evolución de T/T^0 , $-P_{xy}/nT$ y $(P_{xx} - P_{yy})/nT$ para esferas duras inelásticas (IHS, líneas continuas) y esferas duras elásticas sometidas a una fuerza de arrastre (EHS, líneas segmentadas) en los casos $\alpha = 0.9$ con $a\tau^0 = 0.1$ y $a\tau^0 = 4$. Las líneas de puntos representan las predicciones obtenidas a partir de la solución de un modelo tipo BGK. En el caso IHS las magnitudes se representan en función del número acumulado de colisiones por partícula (s), mientras que en el caso EHS se representan en función del número acumulado de colisiones por partícula (s') dividido por $\beta = (1+\alpha)/2$. Los datos se han obtenido tomando como función de distribución de velocidades inicial la dada por la aproximación de equilibrio local [6].

tensiones normales (reducidas) $(P_{xx} - P_{yy})/nT$ para $\alpha = 0.9$ y $\alpha = 0.5$, respectivamente. Además de los datos de simulación obtenidos para el sistema de esferas duras inelásticas (IHS), se han incluido los correspondientes a un sistema equivalente de esferas duras elásticas (EHS) [18], así como a un modelo cinético tipo BGK. En el caso de $\alpha = 0.9$ se observa un excelente acuerdo entre los resultados de simulación de ambos gases (IHS y EHS). Además, los resultados teóricos obtenidos con el modelo BGK describen con gran precisión el comportamiento de los datos de simulación.

Sin embargo, en el caso $\alpha = 0.5$ el sistema EHS tiende a tener una temperatura mayor que la del sistema IHS, siendo esta diferencia, en el estado estacionario, aproximadamente de un 12%. Esto es debido en parte a que la verdadera tasa de enfriamiento ζ del gas IHS es mayor que el valor de equilibrio local ζ_0 impuesto al gas EHS [18]. Esto explica también por qué el modelo BGK, que también hace uso de la aproximación $\zeta \rightarrow \zeta_0$, predice una temperatura en buen acuerdo con los datos de simulación del sistema EHS. Dado que la temperatura del gas EHS es mayor que la del gas IHS, el gradiente de velocidad normalizado con la frecuencia de colisión ($a^* \propto a/\sqrt{T(t)}$) es menor para el sistema EHS que para el sistema IHS. Como consecuencia, la distorsión respecto a la distribución de equilibrio local (que es medida por la tensión tangencial y, especialmente, por la diferencia de tensiones normales) es menor en el gas EHS que en el IHS. La comparación de las figuras 1 y 2 muestra que la duración de la evolución hacia el estado estacionario (en unidades del número acumulado de colisiones por partícula) disminuye a medida que la inelasticidad aumenta: $s \simeq 40$ para $\alpha = 0.9$ frente a $s \simeq 20$ para $\alpha = 0.5$. Sin embargo, cuando el tiempo es medido en unidades reales, hemos observado que depende principalmente del gradiente de velocidad y no de α , a saber $t \simeq 9\tau^0$ para $a\tau^0 = 4$ y $t \simeq 160-200\tau^0$ para $a\tau^0 = 0.1$.

Consideremos ahora la evolución temporal del gradiente de velocidad reducido con respecto a la frecuencia de colisión, es decir, $a^*(t) \propto a/\sqrt{T(t)}$ (el cual decrece en los estados de calentamiento y aumenta en los estados de enfriamiento), de la viscosidad tangencial reducida $\eta^*(t) = -P_{xy}(t)/nT(t)a^*(t)$ y de las funciones viscométricas reducidas $\Psi_1(t) = [P_{yy}(t) - P_{xx}(t)]/nT(t)[a^*(t)]^2$ y $\Psi_2(t) = [P_{zz}(t) - P_{yy}(t)]/nT(t)[a^*(t)]^2$. Una representación paramétrica de $\eta^*(t)$ frente a $a^*(t)$ es muy útil para comprobar el establecimiento de un régimen hidrodinámico en el cual $\eta^*(t) \rightarrow \eta^*(a^*(t))$, donde la función $\eta^*(a^*)$ debe ser independiente de las condiciones iniciales. Lo mismo debe suceder para una representación paramétrica de las

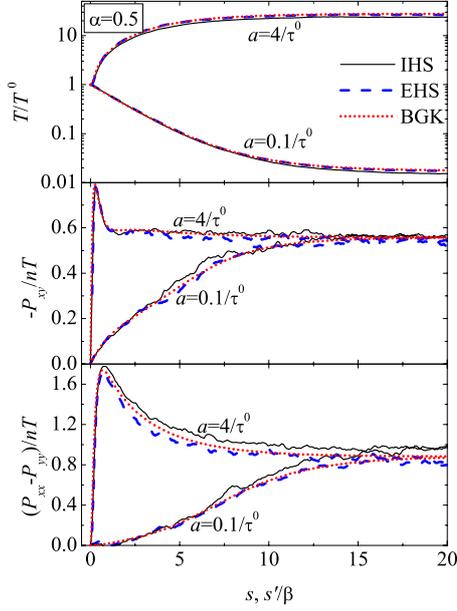


Figura 2: Ídem que en la figura 1, pero para $\alpha = 0.5$.

funciones viscométricas $\Psi_1(t)$ y $\Psi_2(t)$ frente a $a^*(t)$. Esta representación paramétrica se muestra en la figura 3 para el gas más inelástico ($\alpha = 0.5$) y para los casos de calentamiento ($a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$). Se han incluido también las curvas correspondientes a una solución analítica aproximada del modelo cinético tipo BGK [19]. Está bastante claro que, para cada magnitud, las diez curvas son atraídas hacia una curva universal común la cual, además, resulta estar excelentemente descrita por nuestro modelo simplificado. El panel inferior de la figura 3 muestra la evolución temporal (medida por el número acumulado de colisiones por partícula) de $a^*(t)$. Podemos observar que los estados con el efecto de calentamiento más alto ($a = 10/\tau^0$) alcanzan el régimen hidrodinámico después de aproximadamente 1 colisión por partícula solamente, mientras que este periodo de envejecimiento es algo más largo (aproximadamente 2 colisiones por partícula) en los estados con $a = 4/\tau^0$. Una vez que el estado se une a la curva hidrodinámica, se mueve a lo largo de ella hasta

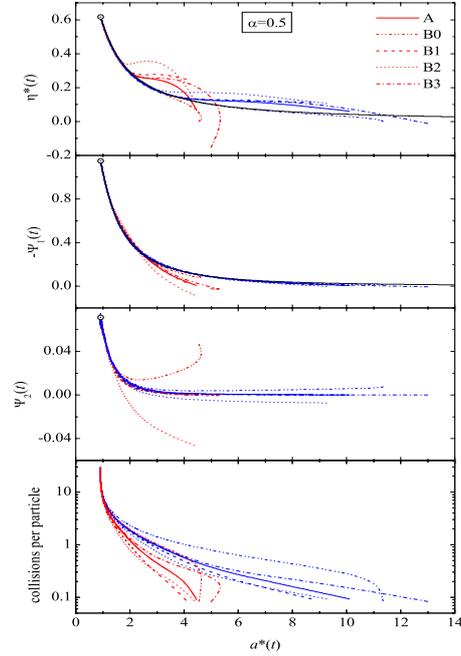


Figura 3: Viscosidad tangencial reducida $\eta^*(t)$, funciones viscométricas $-\Psi_1(t)$ y $\Psi_2(t)$, y número de colisiones por partícula frente al gradiente de velocidad reducido $a^*(t)$ para $\alpha = 0.5$ en los dos casos de calentamiento ($a = 4/\tau^0$ y $a = 10/\tau^0$). En los tres primeros paneles, el círculo representa el punto correspondiente al estado estacionario (a_s^*, η_s^*), mientras que la línea sólida delgada corresponde a las funciones hidrodinámicas obtenidas a partir de nuestro modelo reológico simplificado. Nótese que en dicho modelo $\Psi_2(a^*) = 0$.

que alcanza el estado estacionario, lo que típicamente ocurre después de 10 colisiones por partícula desde el estado inicial. Esto significa que aproximadamente el 80–90% de la duración (medida por el número de colisiones) de la evolución hacia el estado estacionario corresponde a la etapa hidrodinámica. También es interesante comentar que, para un valor dado de a , el calentamiento más lento tiene lugar para la condición inicial B0, seguida por B3, A y B1, mientras que el calentamiento más rápido corresponde a B2. Esto implica que el estado que comenzó en B0 es el que se une

a la curva hidrodinámica para un valor más grande de a^* ($a^* \simeq 7$ y $a^* \simeq 3$ para $a = 10/\tau^0$ y $a = 4/\tau^0$, respectivamente), mientras que el estado que comenzó en B2 lo hace para un valor más pequeño ($a^* \simeq 3$ y $a^* \simeq 1.5$ para $a = 10/\tau^0$ y $a = 4/\tau^0$, respectivamente).

4. Conclusiones

Hemos investigado si el escenario convencional de evolución hacia una descripción hidrodinámica sigue siendo aplicable a gases granulares con un alto grado de disipación, incluso si la descripción hidrodinámica es no newtoniana. Utilizando el ejemplo del flujo tangencial uniforme, hemos observado que, en contra del escepticismo expresado por algunos autores [6, 15], una descripción hidrodinámica sigue siendo generalmente válida para los gases granulares. De acuerdo con nuestros datos de simulación, la evolución hacia el estado estacionario tiene lugar en dos etapas. La primera etapa (cinética) depende en gran medida de la preparación inicial del sistema y tiene una duración aproximada de unas pocas colisiones por partícula. A esto le sigue una etapa hidrodinámica mucho más lenta que, a medida que pasa el tiempo, se va haciendo cada vez más independiente de las condiciones iniciales. Una vez escalada convenientemente con la velocidad térmica $v_0(t) = \sqrt{2T(t)/m}$, la función de distribución de velocidades en la etapa hidrodinámica depende del tiempo exclusivamente a través de la velocidad reducida $\mathbf{C}(t) = \mathbf{V}/v_0(t)$ y del gradiente de velocidad reducido $a^*(t) \propto a/\sqrt{T(t)}$. En particular, para un valor dado de α , la viscosidad tangencial no lineal (reducida) $\eta^*(a^*)$ se mueve sobre una cierta curva reológica, en la cual el valor correspondiente al estado estacionario $\eta_s^* = \eta^*(a_s^*)$ representa un único punto. Este punto divide la curva $\eta^*(a^*)$ en dos ramas. La rama $a^* \leq a_s^*$ es accesible desde estados iniciales tales que el enfriamiento disipativo domina sobre el calentamiento viscoso, con lo cual, $T(t)$ disminuye y $a^*(t)$ aumenta durante la evolución. Alternativamente, la rama $a^* \geq a_s^*$ corresponde a estados iniciales donde el calentamiento viscoso prevalece, de modo que $T(t)$ aumenta y $a^*(t)$

disminuye, hasta llegar al estado estacionario.

Referencias

- [1] Dorfman, J. R., H. van Beijeren, *Statistical Mechanics part B: Time-dependent processes*, Plenum Press, New York, 1977, chapter The kinetic theory of gases, pp. 65-179, B. J. Berne (ed.).
- [2] Chapman, S., T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*, Cambridge University Press, Cambridge, 1970.
- [3] Garzó, V., A. Santos, *Kinetic Theory of Gases in Shear Flows. Nonlinear Transport*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003.
- [4] Jaeger, H. M., S. R. Nagel, R. P. Behringer, "The physics of granular materials", *Physics Today* 49:32-38, 1996.
- [5] Brey, J. J., "Teoría cinética de los medios granulares", *Revista Española de Física* 17(5):14-18, 2003.
- [6] Kadanoff, L., "Built upon sand: theoretical ideas inspired by granular flows", *Rev. Mod. Phys.* 71:435-444, 1999.
- [7] Brey, J. J., J. W. Dufty, "Hydrodynamic modes for a granular gas from kinetic theory", *Phys. Rev. E* 72:011303-1-16, 2005.
- [8] Santos, A., J. W. Dufty, "Dynamics of a hard sphere granular impurity", *Phys. Rev. Lett.* 97:058001-1-4, 2006.
- [9] Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero, F. Moreno, "Hydrodynamics of an open vibrated granular system", *Phys. Rev. E* 63:061305-1-10, 2001.
- [10] Brey, J. J., M. J. Ruiz-Montero, M. J. Moreno, R. García-Rojo, "Transversal inhomogeneities in dilute vibrofluidized granular fluids", *Phys. Rev. E* 65:061302-1-10, 2002.

- [11] Dahl, S., C. Hrenya, V. Garzó, J. W. Dufty, “Kinetic temperatures for a granular mixture”, *Phys. Rev. E* 66:041301-1-10, 2002.
- [12] Rericha, E. C., C. Bizon, M. D. Shattuck, H. L. Swinney, “Shocks in supersonic sand”, *Phys. Rev. Lett.* 88:014302-1-4, 2002.
- [13] Yang, X., C. Huan, D. Candela, R. W. Mair, R. L. Walsworth, “Measurements of grain motion in a dense, three-dimensional granular fluid”, *Phys. Rev. Lett.* 88:044301-1-4, 2002.
- [14] Huan, C., X. Yang, D. Candela, R. W. Mair, R. L. Walsworth, “NMR experiments on a three-dimensional vibrofluidized granular medium”, *Phys. Rev. E* 69:041302-1-13, 2004.
- [15] Tan, M. L., I. Goldhirsch, “Rapid granular flows as mesoscopic systems”, *Phys. Rev. Lett.* 81:3022-3025, 1998.
- [16] Dufty, J. W., J. J. Brey, “Comment on Rapid granular flows as mesoscopic systems”, *Phys. Rev. Lett.* 82:4566-4566, 1999.
- [17] Tan, M. L., I. Goldhirsch, “Tan and Goldhirsch reply”, *Phys. Rev. Lett.* 82:4567-4567, 1999.
- [18] Astillero, A., A. Santos, “Uniform shear flow in dissipative gases: Computer simulations of inelastic hard spheres and frictional elastic hard spheres”, *Phys. Rev. E* 72:031309-1-20, 2005.
- [19] Astillero, A., A. Santos, “Aging to non-Newtonian hydrodynamics in a granular gas”, *Europhys. Lett.* 78:24002-1-6, 2007.
- [20] Santos, A., V. Garzó, J. W. Dufty, “Inherent rheology of a granular fluid in uniform shear flow”, *Phys. Rev. E* 69:061303-1-10, 2004.
- [21] Bird, G. A., *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Oxford Science Publications, Oxford, 1994.