

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

Departamento de Física Aplicada I



TESIS DOCTORAL

Teoría cinética de gases de red

TESIS DOCTORAL

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR

PRESENTADA POR

Ricardo Brito López

Director:

Carlos Fernández Tejero

Madrid, 2001

ISBN: 978-84-669-0509-1

© Ricardo Brito López, 1992

Teoría Cinética de Gases de Red

Ricardo Brito López



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE



5314280713

1992/30

Teoría Cinética de Gases de Red

*Memoria que presenta para optar al grado de
Doctor en Ciencias Físicas*

Ricardo Brito López

Dirigida por los profesores

Carlos Fernández Tejero
Universidad Complutense de Madrid

Matthieu H. Ernst
Rijksuniversiteit de Utrecht

Departamento de Física Aplicada I
Facultad de Ciencias Físicas
Universidad Complutense de Madrid

Junio 1992

LIBRARY
23516

616500295
12533094

a una princesa

Agradecimientos

Quiero agradecer aquí a mis directores, Carlos Fernández Tejero y Matthieu H. Ernst porque sin ellos esta tesis no hubiera podido llevarse a cabo. Tanto Carlos como Matthieu me incorporaron a sus grupos y con ellos me inicié en la investigación. Me facilitaron todos los medios a su alcance para que esta tesis llegara a su fin. Su apoyo en todos estos años ha sido decisivo. Ellos me han enseñado todo lo que sé sobre el tema de esta tesis y con ellos ha sido un verdadero placer trabajar. También agradezco a Matthieu su hospitalidad en mis visitas a Utrecht y su paciencia conmigo. Muchas gracias a ambos.

Carlos también se rodeó de gente con la que fue muy agradable trabajar: José Cuesta, Juanma Parrondo y, por supuesto, Angel Sánchez. Con ellos he compartido muchas horas y ellos han sido los primeros en escuchar mis ideas, dudas y problemas, y la mayoría de ellos se resolvieron en conversaciones con ellos.

También quiero recordar a mis colegas de Holanda: Harmen Bussemaker, Shankar Das, Grzegorz Szamel, Bert van Velzen y Toyoaki Naitoh, con los que compartí muchas horas en Utrecht. Buena parte de esta tesis se ha desarrollado gracias a su colaboración o en conversaciones con ellos. Y, como no, Liesje, y también Esme, Miriam, Jordi y Erik contribuyeron a hacer mi estancia en Utrecht más agradable.

A Jim Dufty le agradezco sinceramente su hospitalidad durante mi visita a la Universidad de Florida en Gainesville en mayo y junio de 1991. Fue una estancia muy productiva en todos los aspectos y en ella desarrollé una de las partes más importantes de esta tesis. Quiero recordar también a Harmen, Jackie y Roser.

También quiero agradecer a la gente del Tomi las múltiples horas de esparcimiento que pasé con ellos. A Rosa, Jose, Carmen, Leonor, Angel, Rubén, Lurdes, Pepe y Rodrigo. También a Manuel, Pep, Juan Carlos y Migue. Fuera del ambiente universitario, agradezco la ya larga amistad de María José, Antonio, Fernando y Susana. No puedo tampoco olvidarme de

Yolanda.

Y por último, a mis padres y hermanas, que me han soportado (a veces sufrido) durante todos estos años. Sin su ayuda y compañía este trabajo no hubiera sido posible.

A todos, gracias.

R.B.

Madrid, 26 de mayo de 1991

No quiero olvidarme de las contribuciones económicas:

- Proyectos de la CAICYT PB85-0024 y de la DGICYT PB88-0140 y Subvención para el Fomento de la Cooperación Científica con países de la CEE (programa Science).
- FOM (Fundamental Onderzoek der Materie) (Holanda).
- Universidad Complutense de Madrid. Programas Bolsas '91 y '92.
- Comunidad Autónoma de Madrid.
- Programa ERASMUS de intercambio de estudiantes.
- Institute for Scientific Interchange Foundation (Turín, Italia).
- Oficina de Relaciones Internacionales de la Universidad de Utrecht y Vicerrectorado de Relaciones Internacionales de la Universidad Complutense.

Indice

Indice	ix
Indice de Figuras	xiii
Indice de Tablas	xv
I Hidrodinámica	1
1 Introducción	3
1.1 Gases de Red	3
1.2 Introducción a la Hidrodinámica Clásica	7
2 Modelos de gases de red	13
2.1 Generalidades	13
2.2 Modelo HPP	16
2.3 Modelo FHP	17
2.4 Modelos 8 y 9 bits	21
2.5 Modelo FCHC	23
2.6 Ecuación de Liouville y variables dinámicas	25
3 Ecuaciones de la dinámica de fluidos	29
3.1 Mecánica Estadística de equilibrio	29
3.2 Ecuación de Euler	34
3.3 Ecuaciones de Navier–Stokes disipativas	39
4 Leyes de conservación espúreas	47
4.1 Invariantes espúreas en el modelo FHP	48
4.2 Evolución de los invariantes espúreas en el modelo FHP	51

II Teoría Cinética	57
IIa Teoría de Boltzmann	59
5 Aproximación de Boltzmann	61
5.1 Introducción	61
5.2 Ecuación de Boltzmann de red	63
5.3 Propagador cinético	65
5.4 Operador de colisión linealizado	67
6 Coeficientes de transporte en la aproximación de Boltzmann	69
6.1 Propagador cinético en la aproximación de Boltzmann	69
6.2 Diagonalización del operador de colisión linealizado	72
6.3 Coeficientes de transporte en la aproximación de Boltzmann	76
6.3.1 Viscosidades	76
6.3.2 Difusividades espúreas	78
7 Factor de estructura	81
7.1 Teoría de perturbaciones	82
7.2 Factor de Estructura	92
7.3 Método de Landau–Placzek	94
7.4 Análisis de diferentes regímenes del factor de estructura	95
7.4.1 Régimen hidrodinámico	96
7.4.2 Régimen de partícula libre	98
7.4.3 Régimen cinético	101
IIb Teoría de Anillo	105
8 Desarrollo de la Teoría	107
8.1 Introducción	107
8.2 Difusión de una partícula marcada	110
8.3 Ecuaciones de evolución de la partícula marcada	112
8.4 Teoría cinética de anillo	114
9 Análisis de la teoría cinética de anillo	125
9.1 Tiempos cortos, correlaciones geométricas	125
9.2 Tiempos intermedios	131

9.3	Tiempos largos: teoría del acoplamiento de los modos	133
10	Análisis numérico de la teoría cinética de anillo	139
10.1	Introducción	139
10.2	Teoría cinética de anillo para fluidos	140
10.3	Esquema numérico	145
10.4	Resultados	148
III	Conclusiones	155
11	Conclusiones y cuestiones abiertas	157
11.1	Conclusiones	157
11.2	Cuestiones abiertas	162
IV	Apéndices	165
A	Tensores	167
B	Expresiones para $c\bar{\Omega}$ y $c\bar{\Omega}^{(2)}$	171
C	Relación entre $\bar{\Omega}^{(2)}$ y $\bar{\Omega}$	175
	Publicaciones	177
	Referencias	179

Indice de Figuras

2.1	Modelo HPP, canales y colisiones	17
2.2	Modelo FHP. Reglas de colisión	19
2.3	Modelo FHP con partícula en reposo	20
2.4	Reglas de colisión de los modelos 8 y 9-bits	21
2.5	Proyección tridimensional del modelo FCHC	24
4.1	Subredes de las cantidades espúreas	48
6.1	Viscosidades de cizalla para los modelos FHP	78
7.1	Espectro hidrodinámico del modelo FHP-I. Densidad $f = 0.4$	87
7.2	Espectro hidrodinámico del modelo FHP-I en función del ángulo de k	88
7.3	Espectro del modelo FHP-I. Densidad $f = 0.5$	90
7.4	Factor de estructura en el límite hidrodinámico	96
7.5	Factor de estructura, modelo FHP-I, con $f = 0.5$ y $k = 0.05$	97
7.6	Factor de estructura, modelo FHP-I, con $f = 0.5$ y $k = 0.1$	98
7.7	Factor de estructura, modelo FHP-I, con $f = 0.001$ y $k = 0.1$	99
7.8	Factor de estructura, modelo FHP-I, con $f = 0.5$ y $k = 3$	99
7.9	Factor de estructura, modelo FHP-I, con $f = 0.5$ y $k = 0.25$	101
7.10	Factor de estructura, modelo FHP-I, con $f = 0.5$ y $k = 0.75$	102
8.1	Ejemplos de colisiones correlacionadas	108
8.2	Esquema de la teoría cinética de anillo	116
9.1	Geometría del modelo FHP con condiciones de contorno periódicas tras 2 espaciados en la dirección y	126
9.2	VACF de exceso para el modelo FCHC	130
9.3	Caminos que dan contribución no nula a la integral de anillo	132
10.1	Función de correlación de cizalla para $t = 3$, FHP-I	144

10.2	Regiones de integración; primera zona de Brillouin	148
10.3	Comportamiento de $\phi(t)$; FHP-I	149
10.4	Funciones de correlación para el modelo FHP-III	150
10.5	Coefficientes de transporte dependientes del tiempo. FHP-I .	151
10.6	Coefficientes de transporte dependientes del tiempo. FHP-III	151
10.7	Viscosidad de cizalla, comparación con simulaciones	152
10.8	Viscosidad de volumen, comparación con simulaciones	153

Indice de Tablas

6.1	Propiedades de simetría de la base de autofunciones de Ω . .	75
6.2	Autovalores de los modelos FHP	76

I Hidrodinámica

1

Introducción

1.1 Gases de Red

La física de los fluidos ha sido uno de los campos de la Física sobre los que más se ha trabajado en los últimos dos siglos. Ello se debe no sólo al gran número de problemas tecnológicos con los que está relacionada, sino por lo fundamental de las cuestiones físicas que suscita. De otro lado, la gran dificultad de cualquier tratamiento exacto de las ecuaciones de la dinámica de fluidos ha supuesto un gran desafío a los investigadores más destacados y a pesar de conocerse un cierto número de resultados queda mucho por hacer para la total resolución de la física de fluidos.

Una de las aproximaciones a este problema que más provechosa ha resultado ser es intentar sustituir una descripción precisa del fluido por medio de modelos aproximados más sencillos que retengan las características básicas de los fluidos. Ello es debido a que la forma de las ecuaciones macroscópicas de la hidrodinámica no depende de las características microscópicas del fluido que se trate, sino que sólo está especificada por propiedades más generales; a saber, leyes de conservación y simetrías del problema. La única dependencia de las propiedades microscópicas está en los coeficientes de transporte. Por tanto, dos fluidos de muy diferente composición pero con coeficientes de transporte similares se comportan de igual forma, tienen las mismas propiedades y generan el mismo tipo de patrones macroscópicos en la evolución. Siguiendo esta pauta uno de los modelos más extensamente usado es el de esferas duras, en el que las moléculas se sustituyen por esferas rígidas de diámetro σ que colisionan elásticamente. Este sistema, aún sin interacción realista, es el más extensamente estudiado tanto en sus propiedades de equilibrio como de no equilibrio. Un siguiente paso

en la “esquemmatización” de estos modelos lo constituyen los modelos discretos. Es sabido que se pueden construir modelos uni, bi y tridimensionales con un número finito de velocidades que en el límite continuo reproducen las características de la dinámica de fluidos [Gatignol]. Estos modelos son discretos sólo en las velocidades, pero no en el espacio y en el tiempo. Siguiendo este camino de “esquemmatización” de los modelos de fluidos, en 1986 se propuso un modelo donde sólo se consideraban los ingredientes más básicos posibles. Este modelo se denominó “Autómatas Celulares de Gases de Red” o simplemente “Gases de Red”. De forma general (no para fluidos) fueron introducidos por von Neumann y Ulam en 1966 para modelar sistemas biológicos [Neumann 66]. Constan de una red, en la que cada sitio puede tener un número finito de estados. La evolución se produce a pasos de tiempo discretos, y los nodos se actualizan simultáneamente de acuerdo con determinadas reglas, que pueden ser deterministas o estocásticas, pero típicamente para actualizar un nodo sólo intervienen un número pequeño de nodos adyacentes. Un ejemplo muy popular es el Juego de la Vida de Conway [Berlenkamp *et al* 84].

El primer modelo de gas de red para la modelación de fluidos fue propuesto por Hardy, de Pazzis y Pomeau en 1973 [Hardy *et al* 73]. Consta de una red cuadrada bidimensional en la que puede haber hasta 4 partículas por nodo, con velocidades dirigidas a lo largo de los enlaces de la red. La actualización de cada nodo se produce en dos pasos (hablaremos con más detalle de ellos en el capítulo 2). Primeramente se realiza una colisión en la que dos partículas con velocidades opuestas colisionan girando cada una un ángulo de $\pi/2$. Posteriormente, las partículas se propagan al nodo hacia el que apuntan. Este proceso se repite a lo largo del tiempo, generando así la evolución. Este modelo tan sencillo fue originalmente introducido para estudiar cuestiones fundamentales de la Mecánica Estadística, como la ergodicidad, la existencia de un estado de equilibrio, o de coeficientes de transporte en dos dimensiones. Sin embargo, la red cuadrada no tiene la simetría suficiente para que en su comportamiento macroscópico obedezca las ecuaciones de Navier–Stokes.

Para resolver este problema, en 1986 Frisch, Hasslacher y Pomeau propusieron un modelo definido sobre la red triangular [Frisch *et al* 86]. Este modelo sí que presenta un comportamiento macroscópico de acuerdo a las ecuaciones de Navier–Stokes y es el modelo más empleado actualmente. Una vez demostrado el éxito de este modelo, se crearon otros para dimensiones superiores y con otras características.

Aunque como hemos explicado los gases de red surgieron como mode-

los aproximados para la descripción de fluidos, nosotros los estudiaremos también desde otro punto de vista. Los consideraremos como sistemas objeto de estudio *en sí mismos*, y *no* por ser modelizaciones de los fluidos. Los gases de red tienen una riqueza en su comportamiento que los hace objetos interesantes en sí mismos, independientemente de los fluidos. En el límite macroscópico se comportan como fluidos, pero hasta llegar a él hay muchas peculiaridades de estos modelos que han de ser estudiadas.

¿Cuáles son las ventajas de los gases de red que los han hecho tan relevantes en la física de fluidos? La primera y más importante es su facilidad para ser implementados en ordenadores vectoriales y paralelos. La descripción de un estado de un gas de red se hace en términos de un conjunto de números $n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ con valores 0 (si en la velocidad \mathbf{c}_i del nodo \mathbf{r} en el tiempo t no hay partícula) y 1 (en el caso contrario). La propagación no es más que una serie de operaciones lógicas (AND, OR, XOR) con este conjunto de bytes. La colisión se puede representar como una asignación dentro de una matriz [Stauffer 91]. Así, el programa de ordenador que simula la evolución no consta más que de unas pocas líneas donde se realizan únicamente operaciones lógicas o de asignación [Brosa y Stauffer 89]. Estas características (basadas grandemente en la “localidad” de las reglas de colisión) hace que los superordenadores sean enormemente eficientes en la simulación de estos modelos. Asimismo, su descripción Booleana en términos de los números 0 y 1 los libera de los errores de redondeo, que es uno de los problemas más grandes que presentan las simulaciones de los sistemas continuos. Además ordenadores especiales multiprocesadores (hasta 65000 procesadores en paralelo) se están construyendo cuya potencia de cálculo se incrementa un factor 10 cada año [Despain *et al* 90][Doolen 89].

Desde el punto de vista de la teoría cinética, los gases de red ciertamente ofrecen algunas ventajas sobre los fluidos continuos. La mayoría de los resultados de la Mecánica Estadística del no equilibrio se aplican a los gases de red con modificaciones mínimas [Ernst 91a]. Sin embargo, la complejidad de las ecuaciones cinéticas para fluidos continuos se reduce a un mero cálculo matricial en los gases de red, lo que permite obtener más resultados que en teoría cinética continua. Con el hecho añadido de que las propiedades de sistemas continuos y los gases de red son iguales, estos últimos nos permiten avanzar en la comprensión de la teoría cinética, en particular en el entendimiento de cómo las propiedades macroscópicas emergen de las microscópicas subyacentes.

En cuanto a las desventajas de los gases de red, casi todas provienen de su estructura discreta y de ello hablaremos a lo largo de esta memoria.

Citaremos aquí dos de ellas. La primera es la falta de invariancia Galileo [Frisch *et al* 86], que trae como consecuencia la aparición de un coeficiente $G(\rho)$ en el término de Euler, de la forma $\nabla \cdot G(\rho)\rho\mathbf{u}\mathbf{u}$. El efecto de este factor se puede eliminar de la dinámica a costa de modelar un fluido incompresible, con $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. En este caso, con una redefinición del tiempo y de las viscosidades, este factor se absorbe y las ecuaciones de la hidrodinámica recuperan su forma clásica. Otro efecto es la aparición de cantidades conservadas espúreas que añaden nuevas ecuaciones al conjunto de ecuaciones hidrodinámicas y que también modifican la forma de las ecuaciones de Navier–Stokes [Kadanoff *et al*]. Su efecto en ciertas propiedades de la dinámica se puede eliminar sin más que considerar estados en los que estas cantidades conservadas son nulas en el dato inicial.

Desde el punto de vista computacional, la ventaja de ser discreto de la que hablábamos antes, es también un inconveniente. Para obtener valores “suaves” de los campos macroscópicos de densidad y velocidad, hemos de promediar, bien sobre regiones espaciales bien sobre un gran número de simulaciones. Cualquiera de estas alternativas ralentiza la obtención de resultados. Sin embargo, el efecto neto de la rapidez debida a su carácter Boleano y de la lentitud debida al promedio resulta ser positiva: es más rápido simular fluidos con gases de red que con discretizaciones de las ecuaciones de Navier–Stokes. Ello es especialmente así en sistemas con geometrías irregulares, como los medios porosos [Chen *et al*].

Uno de los grandes éxitos de los gases de red ha sido la observación numérica del decaimiento algebraico de la función de autocorrelación de la velocidad, que ha sido medida con una precisión sin precedentes por Frenkel y sus colaboradores. Ello mejora en varios órdenes de magnitud las mejores medidas que existían hasta el momento para discos y esferas duras [Erpenbeck y Wood]. Con el método por ellos desarrollado no sólo se han medido los exponentes sino también la amplitud de las colas algebraicas, y con ello ha sido posible dar la mejor confirmación existente de la teoría del acoplamiento de los modos. Sin embargo, no sólo las simulaciones numéricas han corroborado la validez de la teoría del acoplamiento de los modos, sino que dicha teoría ha sido derivada analíticamente en el límite de tiempos largos en todo el rango de densidades. Asimismo, dentro del contexto de los gases de red ha sido posible evaluar las correcciones debidas al tamaño finito del sistema, en perfecto acuerdo con las simulaciones [Naitoh *et al* 91b].

Más allá de los decaimientos algebraicos de las funciones de correlación existen decaimientos como $(t\sqrt{\log t})^{-1}$ en dos dimensiones, que son de una importancia conceptual enorme, porque permiten dar una base sólida a la

teoría del acoplamiento de los modos autoconsistente [van der Hoef y Frenkel 91b], [Leegwater 91]. Estos decaimientos más rápidos han sido obtenidos teóricamente, y lo que es mucho más importante, han sido observados numéricamente [van der Hoef y Frenkel 91b]. Hay que señalar que parece muy improbable que en los próximos años nadie sea capaz de observar numéricamente este decaimiento en sistemas continuos.

Por todo ello, los gases de red juegan un papel muy relevante en el avance de la física de fluidos en general y de la teoría cinética en particular.

1.2 Introducción a la Hidrodinámica Clásica

En esta capítulo daremos una breve introducción a la hidrodinámica de los fluidos continuos, para tener una base sobre la que desarrollar la teoría de los gases de red. Seguiremos la referencia [Ernst 91a]. Obtendremos las ecuaciones de Euler y de Navier–Stokes y las fórmulas de Green–Kubo.

Las variables básicas para la descripción macroscópica de los fluidos son aquellas que satisfacen leyes de conservación a nivel microscópico, esto es, la densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$ y el momento, $\mathbf{g}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, donde $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ es el campo de velocidad. Igualmente, en fluidos continuos existe otra cantidad conservada, la energía $\epsilon(\mathbf{r}, t)$, que no consideraremos aquí puesto que en los gases de red más estudiados la energía no es conservada en absoluto o bien su conservación equivale a la ley de conservación de la densidad. Sin embargo, ocasionalmente trataremos modelos en los que la energía sí se conserva. La relajación de un fluido al equilibrio global atraviesa dos estados. Un estado cinético, muy rápido, en el que se alcanza un *equilibrio local*, en el que se supone que las relaciones termodinámicas se satisfacen localmente. Posteriormente sigue un relajamiento más lento, *hidrodinámico* en el que se llega a un estado de equilibrio global, en el que las variables macroscópicas no varían en el tiempo.

Volvamos a las variables conservadas, que satisfacen ecuaciones de balance de la forma:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{g} = 0 \quad (1.1a)$$

$$\partial_t \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = 0, \quad (1.1b)$$

donde $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{r}, t)$ es el promedio del tensor de flujo de momento. Dichas ecuaciones pueden obtenerse promediando las definiciones microscópicas de la

densidad y del momento en un sistema de N partículas,

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}) &= \sum_{i=1}^N m\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \\ \mathbf{g}(\mathbf{r}) &= \sum_{i=1}^N m\mathbf{v}_i\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}).\end{aligned}\quad (1.2)$$

sobre una colectividad inicial de no equilibrio, y definiendo $\rho(\mathbf{r}, t) = \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle_{ne}$ y $\mathbf{g}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{g}(\mathbf{r}) \rangle_{ne}$. Para obtener (1.1) derivamos parcialmente respecto al tiempo en (1.2) y aplicamos la regla de la cadena:

$$\begin{aligned}\partial_t \rho &= -\nabla \cdot \mathbf{g} \\ \partial_t \mathbf{g} &= -\nabla \cdot \boldsymbol{\tau},\end{aligned}\quad (1.3)$$

con la expresión microscópica del tensor $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{r}, t) = \langle \boldsymbol{\tau}(\mathbf{r}) \rangle_{ne}$:

$$\boldsymbol{\tau}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \left[m\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i + \frac{1}{2} \sum_j \mathbf{r}_{ij}\mathbf{F}_{ij} \right] \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}).\quad (1.4)$$

Estas leyes de conservación han sido escritas en un cierto sistema de referencia inercial. Sin embargo, las leyes de conservación deben ser invariantes bajo transformaciones a diferentes sistemas de referencia inerciales; deben ser *invariantes Galileo*. Supongamos dos sistemas de referencia inerciales, O y O' , que se mueven con velocidad relativa \mathbf{w} . La posición y velocidad en el sistema O' (denotadas con primas) se relacionan con las magnitudes en el sistema O a través de: $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{w}t$ y $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{w}$. Por tanto, las variables microscópicas se transforman ante el cambio de coordenadas como:

$$\begin{aligned}\rho'(\mathbf{r}', t) &= \rho(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{g}'(\mathbf{r}', t) &= \mathbf{g}(\mathbf{r}, t) - \rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{w} \\ \mathbf{u}'(\mathbf{r}', t) &= \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{w},\end{aligned}\quad (1.5)$$

donde $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ es la velocidad macroscópica del fluido. En consecuencia, la velocidad de una partícula en un sistema localmente en reposo se transforma como: $\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$. Si definimos el *tensor de presiones* $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ como el tensor de flujo de momento en un sistema localmente en reposo (por tanto es diagonal, $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = p(\mathbf{r})\mathbf{1}$) y sustituimos las transformaciones (1.5) en la expresión microscópica del tensor de flujo de momento, obtenemos la relación:

$$\boldsymbol{\tau}(\mathbf{r}, t) = p(\mathbf{r}, t)\mathbf{1} + \rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t).\quad (1.6)$$

La ley de balance (1.1) queda finalmente:

$$\partial_t \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u} = -\nabla p. \quad (1.7)$$

Esta es la llamada *Ecuación de Euler*. Nótese que el término en $\mathbf{u} \mathbf{u}$ va multiplicado por un factor ρ . En los gases de red, debido a la pérdida de invariancia Galileo, dicho factor es diferente. Volveremos sobre ello en la sección 3.2

Hasta el momento hemos considerado un fluido ideal en el que no hay disipación. Por tanto, las ecuaciones de balance son reversibles, esto es, invariantes bajo el cambio $t \rightarrow -t$. Sin embargo, en un fluido real aparece disipación debida al propio movimiento del fluido, que da lugar a la irreversibilidad de las ecuaciones del movimiento. Los mecanismos de la disipación son la viscosidad y la conducción térmica (que no aparecerá en los fluidos que consideramos aquí) y para considerarlos tenemos que incluir algunos términos adicionales en la ecuación de Euler (la ecuación de continuidad es válida para cualquier fluido, sea viscoso o no). Ello se hace añadiendo al tensor de presiones una parte disipativa \mathbf{P}^D que, por argumentos de simetría (ver [Landau *et al* 59]) sólo depende de la velocidad a través de sus gradientes. Su forma más general es:

$$\mathbf{P}_{\alpha\beta}^D = -\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} \nabla_\gamma u_\delta, \quad (1.8)$$

donde $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ es el *tensor de viscosidades*. A partir de ahora, utilizaremos la convención de Einstein: hay una suma implícita sobre índices griegos repetidos. La forma más general de dicho tensor es (ver apéndice A):

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv \eta \left[\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{2}{d} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right] + \zeta \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}, \quad (1.9)$$

donde los coeficientes η y ζ son las *viscosidades de cizalla* ('*shear*') y de *volumen* ('*bulk*'). Incluyendo este término en la ecuación de Euler, llegamos a la *ecuación de Navier-Stokes*:

$$\partial_t \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \nabla p = \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \eta' \nabla \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (1.10)$$

con $\eta' = \eta(1 - 2/d) + \zeta$. Hemos escrito en el miembro de la izquierda la ecuación de un fluido ideal, y en el de la derecha los términos responsables del amortiguamiento viscoso. Cuando en un fluido domina la parte viscosa frente al término convectivo $\nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u}$ y podemos ignorar este último, las ecuaciones se convierten en lineales. Cuando ocurre lo contrario, y es la parte no lineal la que domina, nos encontramos en el régimen de flujo no lineal y donde aparecen las inestabilidades hidrodinámicas, turbulencias, vórtices,

..., fenomenología que no será tratada en esta memoria. La importancia de los términos convectivos no lineales frente a los viscosos viene dada por un coeficiente adimensional, el *número de Reynolds*, Re . Sea L la longitud característica de variación del campo de velocidades, entonces el número de Reynolds es:

$$Re = \frac{[\nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u}]}{[\eta \nabla^2 \mathbf{u}]} = \frac{\rho u L}{\eta}. \quad (1.11)$$

Para valores grandes del número de Reynolds el comportamiento no lineal domina, mientras que si Re es pequeño el fluido se comporta hidrodinámicamente. En este último régimen, el decaimiento de las excitaciones está descrito por la ecuación de Navier–Stokes lineal, que puede ser diagonalizada en el espacio de Fourier, siendo sus autovectores los llamados *modos normales*. Para obtenerlos, definimos un estado de equilibrio caracterizado por una densidad constante ρ y por el valor medio de la velocidad igual a cero. Posteriormente definimos las fluctuaciones alrededor de este estado de equilibrio en la densidad como: $\delta\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \rho(\mathbf{r}, t) - \rho$ y en la velocidad: $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$. Si asumimos la hipótesis de equilibrio local, podemos escribir que la presión depende únicamente de la densidad ρ (en fluidos con energía conservada depende de ρ y ϵ), y por tanto las fluctuaciones de presión se pueden escribir como:

$$p = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right) \delta\rho = c_0^2 \delta\rho. \quad (1.12)$$

La cantidad c_0 es la *velocidad del sonido* del fluido. Si ahora transformamos Fourier las ecuaciones de balance, (1.1a, 1.10) obtenemos:

$$\begin{aligned} \partial_t \delta\rho(\mathbf{k}, t) + i\rho \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}, t) &= 0 \\ \rho \partial_t \mathbf{u}(\mathbf{k}, t) + i\mathbf{k} c_0^2 \delta\rho(\mathbf{k}, t) + \eta k^2 \mathbf{u}(\mathbf{k}, t) + \eta' \mathbf{k} \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}, t) &= 0. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Si descomponemos la velocidad en su parte paralela al vector \mathbf{k} , $u_{\parallel}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{k}, t) \cdot \mathbf{k} / |\mathbf{k}|$ y en su parte transversal, $\mathbf{u}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ (en un fluido d -dimensional hay $(d - 1)$ \mathbf{u}_{\perp} vectores independientes), las ecuaciones de balance linealizadas quedan:

$$\begin{pmatrix} \partial_t & ik & 0 \\ ikc_0^2 & \partial_t + \nu_{\parallel} k^2 & 0 \\ 0 & 0 & \partial_t + \nu k^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\rho \\ \rho u_{\parallel} \\ \rho \mathbf{u}_{\perp} \end{pmatrix} = 0, \quad (1.14)$$

donde el coeficiente ν_{\parallel} se define como $[2(1 - d^{-1})\eta + \zeta] / \rho$. Transformando Laplace la ecuación (1.14) se reemplazan las derivadas temporales por $-\omega$. El

determinante de la matriz (1.14) es un polinomio de grado $(d+1)$ en ω , cuya resolución nos da las frecuencias hidrodinámicas $\omega(\mathbf{k})$. Dicho determinante se factoriza en:

$$(\omega^2 - \nu_l k^2 \omega + k^2 c_0^2)(\omega - \nu k^2)^{d-1} = 0. \quad (1.15)$$

La primera parte de este polinomio da la relación de dispersión de las ondas sonoras, mientras que el segundo término es la de los $(d-1)$ modos de cizalla. Concretamente:

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}(\mathbf{k}) &= \pm i c_0 k + \frac{1}{2} \Gamma k^2 \\ \omega_{\eta}(\mathbf{k}) &= (\eta/\rho) k^2 = \nu k^2, \end{aligned} \quad (1.16)$$

con ν la viscosidad cinemática y la constante amortiguadora del sonido, Γ vale:

$$\Gamma = \nu_l = \left[2 \left(\frac{d-1}{d} \right) \eta + \zeta \right] / \rho \quad (1.17)$$

Los correspondientes autovectores son los modos hidrodinámicos:

$$\begin{aligned} A_{\pm}(\mathbf{k}) &= c_0 \delta \rho(\mathbf{k}) \pm \rho \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}) \\ A_{\eta_i}(\mathbf{k}) &= \hat{\mathbf{k}}_{\perp i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Los vectores unitarios $\{\hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{k}}_{\perp i}\}$ con $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ forman un conjunto ortonormal. Los dos primeros modos, etiquetados con \pm representan las ondas sonoras, con velocidad c_0 y constante de amortiguamiento $\Gamma = \nu_l$. La estructura de dichos modos es similar a la de fluidos con conservación de energía: fluctuaciones de presión y momento longitudinal. La diferencia radica en que en modelos sin conservación de energía las fluctuaciones de presión son sólo fluctuaciones de densidad, mientras que en modelos con conservación contiene las fluctuaciones de densidad y energía [Resibois 77]. El resto de los modos, con subíndice η_i son puramente difusivos, modos de cizalla, con difusividad ν . En fluidos con conservación de energía existe un modo adicional, el de las fluctuaciones de *entropía*, combinación lineal entre densidad y energía, y es también puramente difusivo.

En las ecuaciones de evolución para las cantidades conservadas aparecen los coeficientes de transporte, que se pueden relacionar con magnitudes microscópicas a través de las *fórmulas de Green-Kubo*. Para ello hemos de introducir la *hipótesis de Onsager*, que supone que la matriz de las fluctuaciones de equilibrio $\langle \delta A(\mathbf{k}, t) \delta A^*(\mathbf{k}, 0) \rangle_{\text{eq}}$ obedece asintóticamente la ecuación hidrodinámica para $\langle \delta A \rangle_{\text{ne}}$ [McLennan 89]. Para ilustrar la forma de las

expresiones de Green-Kubo, derivaremos la ecuación para el coeficiente de difusión D para un caminante aleatorio. Por supuesto, los gases de red no se parecen a caminantes aleatorios, pero la expresión final que resulta es igual en ambos casos. El propósito aquí es meramente ilustrativo. Comenzamos por la relación de Einstein entre el desplazamiento cuadrático medio y el coeficiente de difusión:

$$\langle (r_x(t) - r_x(0))^2 \rangle = 2Dt \quad (t \rightarrow \infty) \quad (1.19)$$

donde $r_x(t)$ es la posición del caminante aleatorio. Tomando la derivada temporal y utilizando que los promedios temporales son estacionarios, obtenemos la relación de Green-Kubo:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau \langle v_x(\tau) v_x(0) \rangle. \quad (1.20)$$

El integrando es la función de autocorrelación temporal. Vemos la forma esencial de las expresiones de Green-Kubo: una integración temporal de una función de correlación, supuesto que esta integral existe, lo que no es el caso para sistemas bidimensionales. Volveremos sobre ello a lo largo de esta tesis. En el capítulo 3 derivaremos fórmulas de Green-Kubo para los coeficientes de transporte de los gases de red.

Hasta aquí la introducción de los conceptos más básicos de la hidrodinámica clásica. Pasamos ya a desarrollar el cuerpo de esta tesis, la *Teoría Cinética de Gases de Red*.

2

Modelos de gases de red

2.1 Generalidades

La idea fundamental de los gases de red consiste en sustituir la descripción molecular tradicional por otra en términos de partículas puntuales que se desplazan sobre una red regular y cuyas velocidades pertenecen a un conjunto discreto, que usualmente coincide con enlaces de la red. El tiempo es también discreto, de tal forma que las partículas siempre se encuentran en nodos de la red. Para ser más precisos, los ingredientes básicos en la definición de un gas de red son los siguientes:

- La *geometría de la red*, que ha de ser regular. Las partículas sólo pueden estar en los nodos de la red. Posteriormente veremos que tanto la *dinámica* como las *consideraciones de simetría* imponen restricciones al tipo de red.
- La *dinámica*, que incluye la definición de las velocidades permitidas así como de reglas de interacción de las partículas que han de verificar las leyes de conservación requeridas.
- Por último, introducimos el *principio de exclusión*, que impide la presencia simultánea de dos o más partículas en el mismo nodo con la misma velocidad.

La red, d -dimensional, se define a través de una base propia $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d\}$, de tal forma que todo punto de la red viene dado por una combinación lineal de dichos vectores,

$$\mathbf{r} = n_1 \mathbf{e}_1 + \dots + n_d \mathbf{e}_d, \quad (2.1)$$

con n_1, \dots, n_d enteros en el rango $0, \dots, L_i - 1$. El número total de puntos de la red lo denotamos por V y es igual a $L_1 \times L_2 \times \dots \times L_d$. En cada nodo existen b velocidades permitidas (b es llamado *número de bits*), etiquetadas $\{\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_b\}$, conectando el nodo con otros nodos cercanos, usualmente los próximos vecinos, aunque ocasionalmente se extiende también a nuevos próximos vecinos. Partículas en reposo, con $|\mathbf{c}| = 0$, también son permitidas en ciertos modelos. El espacio de fases consta de 2^{bV} puntos.

Podemos definir ahora las variables básicas en la descripción de los gases de red: los *números de ocupación*, denotados por $n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ ó $n_i(\mathbf{r}, t)$. Estas variables sólo pueden tomar dos valores, 0 ó 1 (recuérdese que las partículas obedecen el principio de exclusión). Su valor es 1 si hay partícula en el nodo \mathbf{r} con velocidad \mathbf{c}_i en el tiempo t y 0 en otro caso. El estado del gas de red está especificado por el conjunto de bV números $n(\cdot) = \{n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t); \forall \mathbf{r}, \mathbf{c}_i\}$. En función de los números de ocupación, la densidad de partículas y de momento se escriben:

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}, t) &= \sum_i n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \\ \mathbf{g}(\mathbf{r}, t) &= \sum_i \mathbf{c}_i n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t).\end{aligned}\tag{2.2}$$

Más generalmente, si denotamos por $\{a(\mathbf{r}, t)\}$ al conjunto de cantidades conservadas, $a(\mathbf{r}, t) = \sum_i a(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ con $a(\mathbf{c}) = \{1, \mathbf{c}\}$. Su suma sobre toda la red \mathbf{r} da el número total de partículas N y momento \mathbf{P} .

La dinámica de un gas de red consta de dos etapas: colisión y propagación. Discutiremos separadamente el efecto de cada uno de estos pasos en las ecuaciones de movimiento de los números de ocupación.

colisión: Primeramente se realizan las colisiones, que son locales, esto es, sólo involucran a partículas en el mismo nodo (modelos con interacción no local están siendo considerados por [Rothman *et al*]). Su efecto es un cambio instantáneo de las velocidades de algunas de las partículas presentes en el nodo. Las reglas de colisión han de elegirse de tal forma que soporten las leyes de conservación requeridas, en general número de partículas y momento¹. Impondremos también que tengan la simetría de la red subyacente: rotaciones e inversiones. Para formalizarlo, definamos $n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ y $n'(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ como los números de ocupación inmediatamente antes y después de la colisión, respectivamente. El

¹Como ya se dijo en el capítulo 1, excluirémos la ley de conservación de la energía, aunque muchos desarrollos serán válidos para modelos térmicos.

paso de colisión se describe como:

$$n'(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) = n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) + I(\mathbf{c}_i|n) \quad (2.3)$$

donde $I(\mathbf{c}_i|n)$, describe el cambio en los números de ocupación debido a la colisión. En general, será un polinomio de grado b en dichos números, que toma valores $-1, 0, +1$, dependiendo de que la población del estado i disminuya (-1), permanezca invariante (0) o aumente ($+1$) debido a la colisión (ver la ecuación (2.8) para un ejemplo de $I(\mathbf{c}_i|n)$).

propagación: Posteriormente se realiza la propagación, en la que las partículas se mueven según su velocidad \mathbf{c}_i durante un intervalo temporal hasta alcanzar otro nodo de la red. Por ejemplo, una partícula en el nodo \mathbf{r} se moverá con velocidad \mathbf{c}_i hasta el nodo $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{c}_i$. El cambio en los números de ocupación debido a la etapa de propagación es:

$$n'(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) = n(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t + 1) \equiv S_i n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t + 1), \quad (2.4)$$

donde S_i es un operador desplazamiento, que actúa sobre la variable de posición \mathbf{r} , y la reemplaza por $\mathbf{r} + \mathbf{c}_i$.

La dinámica es la composición de colisión y propagación, que nos da:

$$n(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t + 1) = n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) + I(\mathbf{c}_i|n). \quad (2.5)$$

Esta es la *ecuación de evolución* de los números de ocupación de los gases de red. Como hemos mencionado anteriormente, hemos impuesto a la dinámica la existencia de unas determinadas cantidades conservadas, denotadas por $\{a(\mathbf{c}_i)\}$. Puesto que las colisiones son locales, al multiplicar (2.3) por $a(\mathbf{c}_i)$ y sumar sobre i se tiene:

$$\sum_i a(\mathbf{c}_i) I(\mathbf{c}_i|n) = 0, \quad (2.6)$$

y se sigue de (2.5) que:

$$\sum_i a(\mathbf{c}_i) [n(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t + 1) - n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)] = 0. \quad (2.7)$$

Hasta aquí las generalidades acerca de la dinámica de los gases de red. Pasaremos ahora a describir los más frecuentemente utilizados en este trabajo.

2.2 Modelo HPP

Este modelo fue el primero utilizado en la simulación de fluidos. Fue introducido en los años 70 por Hardy, de Pazzis y Pomeau [Hardy *et al* 73, Hardy *et al* 76], de cuyas iniciales toma el nombre, y con él se trataron de estudiar problemas fundamentales de la Mecánica Estadística, como ergodicidad, relajación al equilibrio, el comportamiento de las funciones de correlación y la divergencia de coeficientes de transporte.

El modelo HPP está definido sobre la red cuadrada bidimensional con $b = 4$ partículas por nodo, dirigidas a lo largo de los enlaces de la red, con $|\mathbf{c}_i| = 1, \forall i$ (ver figura 2.1a). Es el modelo más sencillo que se puede construir, aunque luego veremos que presenta tantos inconvenientes que en la práctica se ha abandonado. Aquí lo utilizaremos con un propósito ilustrativo sólomente. En virtud del principio de exclusión el número posible de configuraciones diferentes en un nodo es $2^4 = 16$. Sin embargo, sólo una configuración da lugar a colisiones activas, la ilustrada en la figura 2.1b. Es una configuración en la que dos partículas chocan frontalmente, dando lugar a un estado de salida rotado 90° respecto al inicial. Ninguna otra colisión es posible si queremos conservar el número de partículas y el momento lineal y si tenemos en cuenta el principio de exclusión. El operador de colisión asociado se escribe:

$$I(\mathbf{c}_i|n) = -n_i n_{i+2} \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i-1} + n_{i+1} n_{i-1} \bar{n}_i \bar{n}_{i+2}. \quad (2.8)$$

La notación utilizada es $n_i \equiv n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ y $\bar{n}_i \equiv 1 - n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$. El primer término expresa la pérdida de partícula en el canal i , que sólo se puede dar si tenemos partículas en los canales i y $i + 2$ y huecos en los canales de salida $i + 1$ y $i - 1$ en virtud del principio de exclusión. El segundo término representa la ganancia en el canal i debido a la colisión inversa. La ecuación (2.8) tiene la misma estructura que el término de colisión de la ecuación de Boltzmann continua, [Resibois 77]. Asimismo, se verifican fácilmente las leyes de conservación (2.6) con $a(\mathbf{c}_i) = 1, \mathbf{c}_i$.

Numerosas simulaciones se han hecho sobre este modelo, siendo las más precisas las realizadas en el MIT [Margolus *et al* 86], donde se construyó un ordenador especializado para la simulación de gases de red: el CAM (*Cellular Automata Machine*)[Toffoli y Margolus 89]. Sin embargo, el model HPP no es válido para la simulación de las ecuaciones de Navier–Stokes. En efecto, si la dinámica microscópica continua es isótropa, las ecuaciones de Navier–Stokes resultantes han de serlo. Este no es el caso del modelo HPP, que conduce a ecuaciones anisotrópicas, debido a que la red sobre la que está

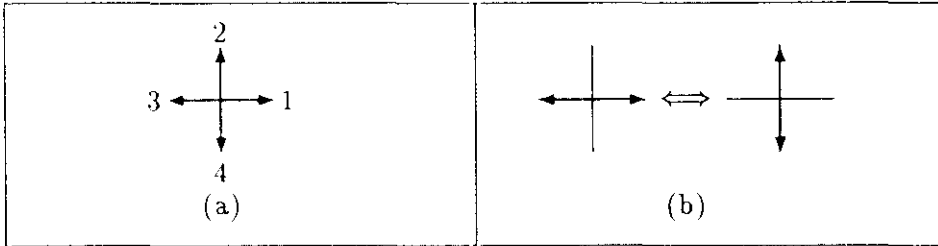


Figura 2.1: Modelo HPP. Es un modelo definido sobre la red cuadrada. En (a) pueden verse las etiquetas de los canales, mientras que en (b) se representa la única colisión activa de este modelo.

definido el modelo sólo posee como simetrías las reflexiones y rotaciones de ángulo $\pi/2$, que no son suficientes para garantizar la isotropía de los tensores de cuarto orden que aparece en las ecuaciones de Navier–Stokes (ver Apéndice A). La simetría que se ha de imponer a la red para tener dicho comportamiento isótropo es de rotaciones de ángulo $\pi/3$ o menores.

Otro problema que presenta el modelo HPP es la aparición de múltiples cantidades conservadas nuevas, sin análogo físico. Son los llamados ‘invariantes de línea’. Consideremos una línea horizontal o vertical. El momento paralelo a dicha línea es conservado para cada línea independientemente, puesto que las únicas colisiones que cambian el número de partículas en las líneas son aquellas con momento 0. Si el comportamiento macroscópico está determinado por las cantidades conservadas, este modelo presenta tantas que difícilmente será apropiado para la caracterización de fluidos reales. Por tanto han de buscarse otros más sofisticados.

2.3 Modelo FHP

Para solventar el problema de la isotropía ya mencionado, en dos dimensiones la red ha de ser invariante bajo, al menos, rotaciones de ángulo $\pi/3$. La única red que satisface dicho requerimiento es la red triangular. Sobre dicha red, Frisch, Hasslacher y Pomeau construyeron en 1986 el modelo llamado FHP [Frisch *et al* 86], que ha resultado ser el más (y prácticamente el único) utilizado para la simulación de gas de red en dos dimensiones.

El modelo FHP original cuenta con $b = 6$ partículas por nodo en una red triangular, con velocidades dirigidas a lo largo de los enlaces de la red y numeradas en el sentido contrario al de las agujas del reloj comenzando por el eje X (ver figura 4.1). El número posible de estados por nodo es $2^6 = 64$,

cuatro veces mayor que en el modelo HPP, lo que permitirá muchas más colisiones efectivas. Consideremos primeramente las posibles colisiones binarias, que nos servirán para introducir el concepto de *colisiones deterministas o estocásticas*. De entre todos los estados con dos partículas, sólo aquellos con momento total nulo dan lugar a colisiones activas, que han sido representadas en la figura 2.2a. Son colisiones frontales, como las del modelo HPP. Sin embargo, en el modelo FHP hay dos posibles estados de salida; uno girado $\pi/3$ respecto al de entrada y otro girado $2\pi/3$. Para decidir cuál se elige, se introducen dos criterios distintos. En las reglas de colisión estocásticas, se genera una variable aleatoria a cada paso de tiempo que selecciona uno de ellos. En las reglas deterministas, se elige de acuerdo con la paridad del tiempo; en los pasos de tiempo par se va a una de ellas y en los impares a la otra alternativamente. Esto se puede ilustrar escribiendo el operador de colisión asociado a la figura 2.2a:

$$I^{(a)}(\mathbf{c}_i | \mathbf{n}) = \alpha \{ -n_i n_{i+3} \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+2} \bar{n}_{i+4} \bar{n}_{i+5} + n_{i+1} n_{i+4} \bar{n}_i \bar{n}_{i+2} \bar{n}_{i+3} \bar{n}_{i+5} \} \\ + \beta \{ -n_i n_{i+3} \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+2} \bar{n}_{i+4} \bar{n}_{i+5} + n_{i+2} n_{i+5} \bar{n}_i \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+3} \bar{n}_{i+4} \}, \quad (2.9)$$

con $\alpha + \beta = 1$, y el superíndice (a) indica que se trata de colisiones binarias, representadas en la figura 2.2a. En la versión estocástica del modelo, α es una variable aleatoria que toma valores 0 ó 1 con probabilidad $\frac{1}{2}$. En la versión determinista α depende del tiempo según: $\alpha = \frac{1}{2}[1 + (-1)^t]$. Es de esperar que ambas versiones del modelo se comporten de manera similar para tiempos suficientemente grandes y suficiente número de realizaciones. Cuando se toman promedios de la ecuación (2.9) sobre muchas realizaciones de la dinámica, α y β se pueden reemplazar por $\langle \alpha \rangle = \langle \beta \rangle = \frac{1}{2}$. Sin embargo, es importante señalar que la sustitución de α y β por sus valores medios sólo tiene sentido bajo un gran número de realizaciones.

Como sucedía en el modelo HPP, las colisiones binarias frontales son “patológicas”, porque introducen leyes de conservación del momento en las direcciones de propagación—invariantes de línea. Una manera de eliminarlas es incluyendo las colisiones ternarias, también con momento total *cero*, ilustradas en la figura 2.2b. Aquí no hay ambigüedad en cuanto al estado de salida, con lo que no cabe hablar de colisiones estocásticas o deterministas. El término correspondiente en el operador de colisión es:

$$I^{(b)}(\mathbf{c}_i | \mathbf{n}) = -n_i n_{i+2} n_{i+4} \bar{n}_{i+1} \bar{n}_{i+3} \bar{n}_{i+5} + n_{i+1} n_{i+3} n_{i+5} \bar{n}_i \bar{n}_{i+2} \bar{n}_{i+4}. \quad (2.10)$$

El modelo original FHP, incluye sólo estos dos tipos de colisiones. Posteriormente, debido a la introducción de más reglas de colisión así como partículas en reposo, cambió su nombre a FHP-I. Este modelo no es *auto*

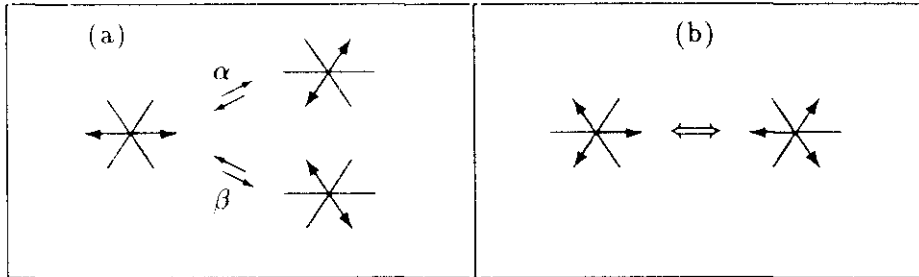


Figura 2.2: Modelo FHP. Reglas de colisión binarias (a) y ternarias (b).

dual, esto es, no es invariante bajo el cambio partículas \leftrightarrow huecos, puesto que las colisiones no son auto duales. La manera más simple de hacerlo auto dual es incluyendo colisiones cuaternarias con momento total nulo, además de las binarias y ternarias ya descritas (las colisiones cuaternarias presentan la misma ambigüedad que las binarias en cuanto a la elección del estado de salida y se aplican los mismos argumentos). El resultado es el modelo llamado FHP-I'. Otras posibles colisiones no son incluidas.

Los dos modelos expuestos anteriormente, FHP-I y I', tienen $b = 6$ partículas por nodo con velocidades a lo largo de los enlaces de la red. Sin embargo nada nos impide incluir una séptima partícula por nodo, con $|c_7| = 0$. El número de posibles estados asciende hasta $2^7 = 128$. Tradicionalmente se utilizan dos conjuntos de colisiones, que dan lugar a los modelos llamados FHP-II y FHP-III. Se han definido otros modelos con varias partículas en reposo, pero no nos ocuparemos de ellos aquí [d'Humières y Lallemand 87]. Las colisiones de ambos FHP-II y III están dibujadas en la figura 2.3. El primero de ellos incluye las colisiones a, b, c, d y la colisión d con una partícula en reposo presente, mientras que el FHP-III las incluye todas y sus duales. Este último modelo es el que más se ha estudiado.

Podemos preguntarnos ahora por las ventajas e inconvenientes de incluir más colisiones. La primera ventaja, de la que ya hemos hablado, es que se eliminan posibles cantidades conservadas no físicas, como sucede con la colisiones binarias frontales, que conservan el momento a lo largo de líneas. Ninguna de las otras colisiones, excepto las cuaternarias obtenidas como superposición de dos binarias lo hacen. Otra razón es la eficiencia: si, por ejemplo, sólo incluimos las colisiones binarias, a altas densidades será muy improbable que las partículas interactúen y el modelo se comportará como un gas de red sin colisiones. Por último, mayor número de colisiones activas














n	g_x	g_y				
2	0	0				a
2	1	0				b
3	0	0				c
3	0	0				d
3	2	0				e

Figura 2.3: Modelo FHP con partícula en reposo. Sólo las colisiones con menos de 4 partículas se presentan. El resto pueden ser obtenidas sustituyendo partículas por huecos y viceversa.

implica normalmente una viscosidad menor que conduce a números de Reynolds (ecuación (1.11)) mayores. Por tanto, es más atractivo si queremos simular vórtices, inestabilidades,...

Hasta ahora no hemos hablado de la conservación de la energía en las reglas de colisión. Si asociamos una energía cinética por partícula igual a $\frac{1}{2}c_i^2$, resulta que para los modelos FHP-I y I' es indistinguible de la conservación de la masa, y, por tanto, no juega ningún papel en la dinámica. Sin embargo, las partículas en reposo tienen una energía cinética igual a cero, y una simple observación de las reglas de colisión b y e de la figura 2.3 nos muestra que no es conservada en absoluto. Por tanto, si estamos interesados en la modelación de problemas con flujo de energía, los modelos

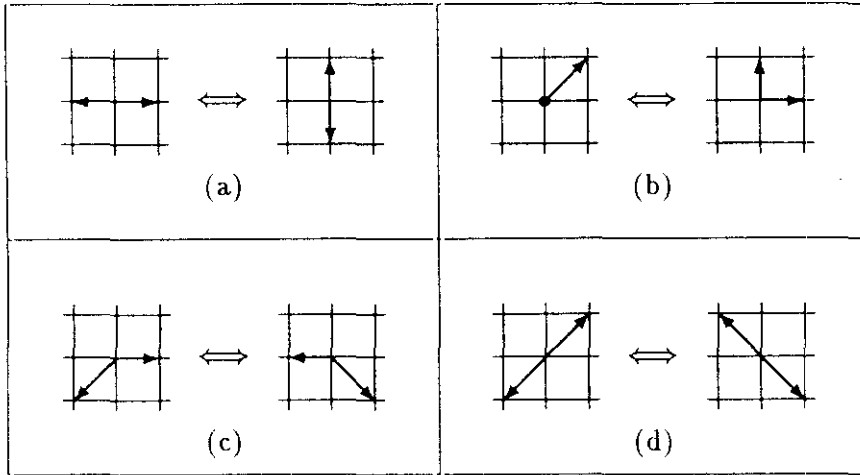


Figura 2.4: Reglas de colisión de los modelos 8 y 9-bits. La colisión (b) no está presente en el modelo 8-bits.

FHP no cumplirán nuestros propósitos, pero sí los modelos que siguen.

2.4 Modelos 8 y 9 bits

El modelo 8-bits fue introducido por [Chopard y Droz 88] y el 9-bits por d'Humières, Lallemand y Frisch [d'Humières *et al* 86]. Consisten en la superposición de dos modelos HPP, girados $\pi/4$, uno de ellos con velocidades $\sqrt{2}$ veces mayor que el otro. En el modelo 8-bits hay $b = 8$ (de ahí su nombre) partículas por nodo: cuatro lentas (o "frías"), conectando con próximos vecinos con velocidades $(\pm 1, 0)$ y $(0, \pm 1)$ y cuatro rápidas (o "calientes") con velocidades $(\pm 1, \pm 1)$ a nuevos próximos vecinos. El modelo 9-bits incluye además una partícula en reposo. Las reglas de colisión se eligen de tal forma que conserven el número de partículas, el momento y la energía, como se ilustra en la figura 2.4.

Estos modelos son invariantes bajo rotaciones de ángulo $\pi/2$, y por tanto, los tensores de cuarto orden que aparecen no son isótropos. Pero aquí éste es un problema menor, porque estos modelos se introducen únicamente para estudiar problemas de conducción de calor. Sin embargo, existe un mecanismo introducido por [d'Humières *et al* 86] y estudiado por [Ernst y Das 92] que permite, en ciertos casos, recuperar la isotropía. En los modelos térmicos el estado de equilibrio está caracterizado por dos parámetros termodinámicos, el potencial químico (o la densidad) y la temperatura (o energía). La aniso-

tropía se manifiesta por la presencia de términos proporcionales a $\delta^{(4)}$ en los tensores de cuarto orden de las ecuaciones de Navier–Stokes (ver apéndice A), uno de ellos en la parte viscosa, $(\nabla\nabla\mathbf{u})$ y otro en la parte convectiva no lineal $(\nabla\mathbf{u}\mathbf{u})$. El coeficiente que acompaña a dichos términos $\delta^{(4)}$ es función de la densidad y la energía del modelo. En consecuencia podemos igualar dicho coeficiente a cero en uno de los dos tensores, obteniendo una relación entre la densidad y la energía. Si queremos que ambos tensores sean isótropos, obtenemos dos relaciones entre estas magnitudes, lo que nos lleva a que sólo en un conjunto limitado de puntos del espacio (densidad, energía) el modelo es completamente isótropo [Ernst y Das 92]. Obviamente, con este mecanismo perdemos las propiedades térmicas de nuestro gas de red. Este modelo no es un buen candidato para estudiar problemas térmicos e isótropos a la vez. Sin embargo, recientemente [Grosfils *et al* 92] se ha introducido un modelo que conjuga ambas propiedades: la conservación de energía y la correcta simetría de tensores. Está definido en la red triangular, con 19 partículas por nodo, que enlazan con próximos, nuevos próximos y nuevos-nuevos próximos vecinos, y parece el modelo idóneo para la simulación de problemas donde el flujo de energía sea importante. Sin embargo, desde un punto de vista computacional, sus 19 partículas por nodo parece ser un número demasiado grande para un modelo bidimensional.

Ocupémonos por un momento del modelo 8-bits, que posee sólo las reglas a, c y d de la figura 2.4. Podemos observar que el número de partículas lentas y rápidas se conserva independientemente y pueden ser escritas como combinación lineal del número de partículas y de la energía. Si las denotamos por N_l y N_r respectivamente, y por N el número total de partículas y E la energía total, tendremos

$$\begin{aligned} N &= N_l + N_r \\ E &= \frac{1}{2}N_l + N_r. \end{aligned} \tag{2.11}$$

Podemos usar equivalentemente ambos conjuntos de cantidades conservadas, bien $\{N, E\}$ o $\{N_l, N_r\}$. La interpretación es, sin embargo, diferente. En el primer caso se trata de un modelo térmico de un gas de red mono-componente, con temperatura y conductividad térmica. En el segundo el modelo se trata como un gas de red que describe una mezcla binaria, con potenciales químicos independientes para cada tipo de partículas y con un coeficiente de difusión. En este sentido el modelo 9-bits es el único modelo térmico, porque la colisión tipo b cambia las poblaciones de partículas en reposo, lentas y rápidas.

2.5 Modelo FCHC

Aunque los modelos anteriormente presentados son bidimensionales, lo natural es modelar el comportamiento de un fluido tridimensional. Sin embargo no hay ninguna red regular simple suficientemente isótropa en tres dimensiones. Las redes tridimensionales más simétricas son las cúbicas (cúbica simple, cúbica centrada y cúbica centrada en las caras) y la hexagonal simple, pero ninguna de ellas da tensores de cuarto orden isótropos. Otros poliedros más complejos como icosaedros o dodecaedros sí dan tensores isótropos hasta orden 5 [Wolfram 86]. Sin embargo, no puede teselarse el espacio \mathbb{R}^3 con dichos poliedros.

Dos posibles soluciones a este problema han sido propuestas por [d'Humières y Lallemand 87]. La primera consiste en utilizar un red cúbica simple, sobre la que se define un modelo térmico, con partículas con velocidades 0, 1 y $\sqrt{2}$, correspondientes a partículas en reposo, partículas que saltan a los 6 próximos vecinos y a los 12 nuevos próximos vecinos. Un mecanismo similar al expuesto en el apartado anterior nos permite recuperar la isotropía de alguno de los dos tensores, pero no de ambos simultáneamente [Noullez 90].

La segunda solución propuesta para construir un gas de red en tres dimensiones se basa en el hecho de que en cuatro dimensiones hay varias redes regulares con la simetría requerida. La red más simple de ellas es la caracterizada por el símbolo de Schläfli $\{3,4,3\}$ [Coxeter 63], bautizada FCHC ('Face Centered Hyper-Cubic'). Contiene $b = 24$ partículas por nodo, con velocidades dadas por:

$$\begin{array}{lll} (\pm 1, \pm 1, 0, 0) & (\pm 1, 0, \pm 1, 0) & (\pm 1, 0, 0, \pm 1) \\ (0, \pm 1, \pm 1, 0) & (0, \pm 1, 0, \pm 1) & (0, 0, \pm 1, \pm 1). \end{array} \quad (2.12)$$

La red consta de todos los puntos que se pueden alcanzar con estos vectores, esto es, puntos \mathbf{r} con $r_x + r_y + r_z + r_u = \text{par}$.

La etapa de propagación en este modelo se realiza de la forma habitual, transferencia a los nodos adyacentes. Las colisiones se eligen de forma que conserven el número de partículas y el momento en las cuatro direcciones x, y, z y u . Como el número de bits es 24, tenemos $2^{24} = 16.777.216$ estados diferentes por nodo. La especificación detallada de las reglas de colisión es imposible, y se recurre a soluciones algorítmicas para realizar las simulaciones [Hènon 87, Hènon 92].

Para emplear este modelo en la simulación de fluidos tridimensionales, hemos de desarrollar un procedimiento que haga desaparecer la cuarta dimensión. Para ello imponemos condiciones periódicas en la cuarta dimensión

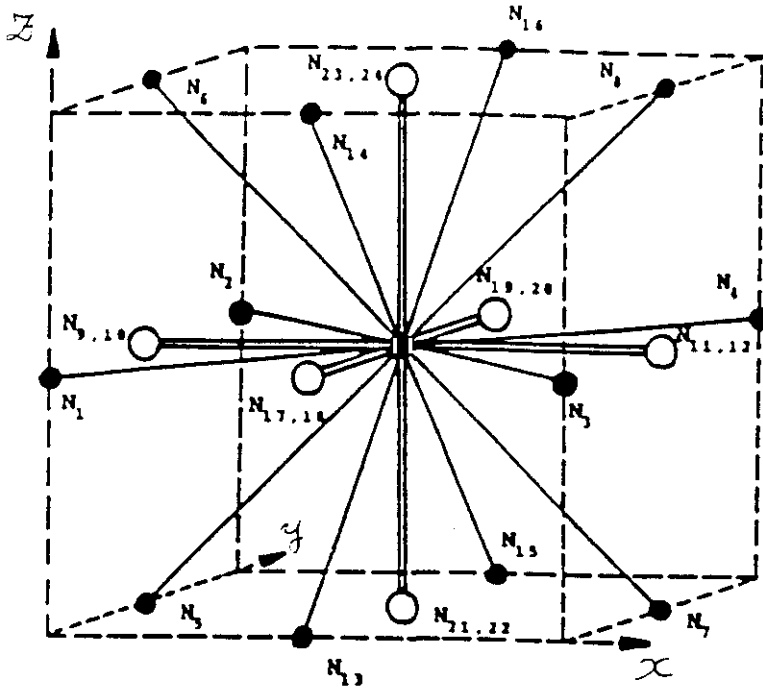


Figura 2.5: Proyección tridimensional del modelo FCHC. Los canales a los seis próximos vecinos están doblemente ocupados (fuente: [Noullez 90]).

haciendo la longitud de la red en esta dimensión muy pequeña; de hecho sólo permitimos dos espaciados de la red en la dirección u . Además, proyectamos el conjunto de velocidades (2.12) a tres dimensiones. Obtenemos entonces un modelo tridimensional definido sobre la red cúbica, con partículas saltando a los próximos vecinos, $(\pm 1, 0, 0)$, $(0, \pm 1, 0)$, $(0, 0, \pm 1)$ y a los nuevos próximos vecinos, $(\pm 1, \pm 1, 0)$, $(\pm 1, 0, \pm 1)$, $(0, \pm 1, \pm 1)$ (ver figura 2.5). Los canales dirigidos hacia los próximos vecinos están doblemente ocupados, y ello garantiza la isotropía del modelo.

En cuanto a la cuarta componente del momento, g_u , se desacopla de la ecuación de Navier–Stokes, y se comporta como un escalar pasivo, sin intervenir en la dinámica [Frisch *et al.* 86]. Sin embargo, veremos más tarde que el mecanismo de proyección produce correlaciones de origen geométrico, que serán evaluadas en esta memoria.

2.6 Ecuación de Liouville y variables dinámicas

Las definiciones operacionales de los gases de red en las secciones previas necesitan ser formalizadas para aplicar los métodos de la mecánica estadística de equilibrio y no equilibrio a estos modelos.

Con este propósito definimos algunos conceptos que utilizaremos en esta tesis. Un *estado* es el conjunto de los b números de ocupación en un nodo \mathbf{r} , esto es: $n(\mathbf{r}, t) \equiv \{n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t); i = 1, 2, \dots, b\}$. Un *microestado* o *configuración* es: $n(\cdot) = \{n(\mathbf{r}); \mathbf{r} \in \mathcal{L}\}$ con \mathcal{L} la red que estudiamos; un punto en el espacio Γ .

La dinámica puede ser determinista o estocástica. Tratamos la primera como un caso especial de la segunda, y describimos las colisiones por medio de una matriz $2^{bV} \times 2^{bV}$ que da la probabilidad de transición del estado $n(\mathbf{r})$ al $m(\mathbf{r})$ como: $A(n(\mathbf{r}) \rightarrow m(\mathbf{r}))$, que puede ser construida explícitamente a partir de las reglas de colisión definidas en las secciones previas. Está normalizada como:

$$\sum_{m(\mathbf{r})} A(n(\mathbf{r}) \rightarrow m(\mathbf{r})) = 1. \quad (2.13)$$

Las leyes de conservación (2.6) para toda cantidad $a(\mathbf{r})$ conservada bajo las colisiones es:

$$A(n(\mathbf{r}) \rightarrow m(\mathbf{r}))a(n(\mathbf{r})) = A(n(\mathbf{r}) \rightarrow m(\mathbf{r}))a(m(\mathbf{r})), \quad (2.14)$$

donde $a(\cdot)$ puede ser el número de partículas o el momento en el nodo \mathbf{r} .

El estado de equilibrio de un gas de red puede ser descrito por una colectividad de no equilibrio con densidad $\rho(n(\cdot), 0)$. La ecuación de Liouville—realmente una ecuación de Chapman-Kolmogorov para dinámica estocástica—describe la evolución temporal de $\rho(n(\cdot), t)$. Como se explicó en la sección 2.1 la dinámica consiste en el paso de colisión seguido de la propagación. La distribución $\rho(n(\cdot), t)$ cambia a $\rho'(m(\cdot), t)$ por las colisiones como [Frisch *et al* 86]:

$$\begin{aligned} \rho'(n(\cdot), t) &= \sum_{m(\cdot)} \left[\prod_{\mathbf{r}} A(m(\mathbf{r}) \rightarrow n(\mathbf{r})) \right] \rho(m(\cdot), t) \\ &\equiv \sum_{m(\cdot)} \mathcal{W}(n(\cdot)|m(\cdot)) \rho(m(\cdot), t) = (\mathcal{W}\rho(t))(n(\cdot)), \end{aligned} \quad (2.15)$$

donde el operador de colisión \mathcal{W} actúa sobre funciones de $n(\cdot)$. La propagación o movimiento libre se representa por:

$$\rho'(n(\cdot), t) = \rho(S^{-1}n(\cdot), t + 1) \equiv S^{-1}\rho(n(\cdot), t + 1). \quad (2.16)$$

El operador de propagación S y su inverso S^{-1} actúan sobre funciones de $n(\cdot)$ como operadores de sustitución, esto es:

$$(Sn)(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) = S_i n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) = n(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i), \quad (2.17)$$

donde el operador S_i , definido en (2.4) actúa sobre el argumento \mathbf{r} . La combinación de (2.15) y (2.17) nos da la *ecuación de Liouville*:

$$\rho(t + 1) = SW\rho(t) \equiv (\mathbf{1} + L)\rho(t), \quad (2.18)$$

donde L es el operador de Liouville. Su solución formal es:

$$\rho(t) = (SW)^t \rho(0) = (\mathbf{1} + L)^t \rho(0). \quad (2.19)$$

La dependencia temporal del promedio de no equilibrio puede ser también expresada por medio de la dinámica adjunta, aplicada sobre variables dinámicas:

$$\begin{aligned} \langle y \rangle_{ne} &= \sum_{n(\cdot)} y(n(\cdot)) \rho(n(\cdot), t) \\ &\equiv \sum_{n(\cdot)} y(n(\cdot), t) \rho(n(\cdot), 0). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Entonces, podemos deducir de esta definición y de la ecuación (2.19) que la dinámica de las variables satisface la ecuación adjunta:

$$y(t + 1) = \mathcal{W}^\dagger S^\dagger y(t) = \mathcal{W}^\dagger S^{-1} y(t). \quad (2.21)$$

La normalización del operador de colisión, (2.15), se escribe en términos de \mathcal{W} como:

$$\sum_{m(\cdot)} \mathcal{W}(n(\cdot)|m(\cdot)) = 1 \quad (2.22)$$

y las cantidades $a(n(\cdot))$, conservadas en las colisiones, son autofunciones de \mathcal{W} con autovalor 1,

$$\begin{aligned} (\mathcal{W}h)(n(\cdot)) &= \sum_{m(\cdot)} \mathcal{W}(n(\cdot)|m(\cdot)) a(m(\cdot)) \\ &= a(n(\cdot)) \sum_{m(\cdot)} \mathcal{W}(n(\cdot)|m(\cdot)) = a(n(\cdot)). \end{aligned} \quad (2.23)$$

En el capítulo siguiente estudiaremos soluciones estacionarias de la ecuación de Liouville, así como soluciones que describen pequeñas desviaciones del equilibrio total.

Como ilustración, derivaremos la ecuación microdinámica, (2.5) a partir de (2.21) con $y(n(\cdot)) = n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$. Con ayuda de (2.17) puede ser escrita como:

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t + 1) = \sum_{m(\cdot)} \prod_{\mathbf{r}'} A(n(\mathbf{r}') \rightarrow m(\mathbf{r}')) m(\mathbf{r} - \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t). \quad (2.24)$$

Todos las variables $m(\cdot)$ con $\mathbf{r}' \neq \mathbf{r} - \mathbf{c}_i$ se pueden sumar empleando (2.13) para dar:

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t + 1) &= \sum_{\sigma} \sigma_i A(n(\mathbf{r} - \mathbf{c}_i, t) \rightarrow \sigma) \\ &= S_i^{-1} \sum_i \sigma_i A(n(t) \rightarrow \sigma) \\ &\equiv S_i^{-1} [n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) + I(\mathbf{c}_i | n(\mathbf{r}, t))], \end{aligned} \quad (2.25)$$

con $\sigma = m(\mathbf{r} - \mathbf{c}_i, t)$. En la última igualdad el operador de colisión no lineal de Boltzmann $I(\mathbf{c}_i | n)$ en (2.3) está expresado explícitamente en términos de las probabilidades de transición A :

$$\begin{aligned} I(\mathbf{c}_i | n) &= \sum_{\sigma} (\sigma_i - n_i) A(n \rightarrow \sigma) \\ &= \sum_{\sigma, s} (\sigma_i - s_i) A(s \rightarrow \sigma) \prod_{j=1}^b n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1-s_j}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

En la derivación de la última igualdad hemos hecho uso de la identidad, válida para variables Booleanas s_i ,

$$\delta(g_j, s_j) = g_j^{s_j} (1 - g_j)^{1-s_j}, \quad (2.27)$$

donde $\delta(a, b)$ es la delta de Kronecker. Debe tenerse en cuenta que para modelos con dinámica estocástica la ecuación microdinámica (2.25) así como (2.21) sólo representan igualdades cuando se usan bajo signos de promedio, como en (2.20). El término de colisión (2.9) para el modelo FHP estocástico con $\langle \alpha \rangle = \langle \beta \rangle = 1/2$ es sólo un caso especial de (2.25).

La expresión general (2.26) del término de colisión no lineal será utilizada frecuentemente en los capítulos siguientes.

3

Ecuaciones de la dinámica de fluidos

En el capítulo anterior se han introducido los modelos más comunes de gases de red, pero no se ha hecho ningún comentario acerca de cómo pueden servir para la modelación de fluidos. Este es el objetivo del presente capítulo, que está organizado como sigue: primeramente consideraremos la mecánica estadística del equilibrio, para pasar al cálculo del término convectivo no lineal de las ecuaciones reversibles (no disipativas) de Navier–Stokes, donde, debido a la no invariancia Galileo de los gases de red, aparece un término diferente de los fluidos continuos. Finalizaremos con la deducción de la parte disipativa de las ecuaciones de Navier–Stokes, donde aparecen los coeficientes de transporte. Estos coeficientes de transporte se expresan como fórmulas de Green–Kubo a través del formalismo de los proyectores.

3.1 Mecánica Estadística de equilibrio

Para describir la Mecánica Estadística del equilibrio de los gases de red, suponemos la existencia de un estado de equilibrio único basado en el principio de Gibbs de igual probabilidad a priori para todos los microestados en el espacio Γ . Para sistemas aislados lleva a una distribución uniforme sobre todos los microestados localizados en la intersección de las hipersuperficies determinadas por el conjunto de las cantidades conservadas, esto es, la colectividad microcanónica. Para un sistema abierto en contacto con un foco, lleva a la colectividad macrocanónica, que será la utilizada en este capítulo. La prueba de la existencia de un estado de equilibrio como el descrito no es independiente del tipo de reglas de colisión elegido. Para reglas que satisfa-

cen el *principio de balance semidetallado* [Frisch *et al* 86], puede probarse un teorema **H** que lleva a la existencia de dicho estado de equilibrio (ver [Frisch *et al* 86], apéndice F).

Consideremos un sistema general en el que existe un conjunto de cantidades conservadas, $A = \{N, \mathbf{P}, H, \dots\}$ con variables termodinámicas conjugadas $b = \{\nu, \gamma, -\beta, \dots\}$, con

$$A = \sum_{r,i} a(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t), \quad (3.1)$$

y los invariantes de colisión, $a(\mathbf{c}_i)$, son:

$$a(\mathbf{c}_i) = \{1, \mathbf{c}_i, \epsilon(\mathbf{c}_i), \dots\}. \quad (3.2)$$

Aquí $\epsilon(\mathbf{c}_i)$ es la energía de una partícula en el canal i . Puede ser puramente cinética, $\epsilon(\mathbf{c}_i) = \frac{1}{2} \mathbf{c}_i^2$, o parte cinética y parte interna. En vista de futuras aplicaciones, es conveniente incluir en la presente discusión los modelos *térmicos*, con conservación de la energía. El caso *atérmico*, esto es, sin conservación de la energía, está contenido como el caso límite en el que la temperatura tiende a infinito, ($\beta \rightarrow 0$). La probabilidad de encontrar al sistema en una configuración en el espacio de las fases Γ viene dada por:

$$\rho(\Gamma) = Z^{-1} \exp[b \cdot A], \quad (3.3)$$

donde Z es la constante de normalización, y consideramos A y b como vectores. La colectividad de equilibrio de un gas de red tiene la misma forma funcional. Las cantidades conservadas son el número de partículas, N , el momento \mathbf{P} y la energía H , con multiplicadores de Lagrange asociados ν , γ y $-\beta$. Por el momento consideraremos estados de equilibrio con velocidad nula, $\mathbf{P} = N\mathbf{u} = 0$, puesto que $\gamma = 0$. A la colectividad de estados con velocidad nula la denotaremos por *equilibrio básico*, que se escribe:

$$\rho(n(\cdot)) = Z^{-1} \exp[\nu N - \beta H], \quad (3.4)$$

siendo $n(\cdot)$ la configuración global del gas de red. La distribución de equilibrio, (3.4) satisface la ecuación de Liouville (2.18) de la sección 2.6. El factor de normalización Z puede calcularse trivialmente, puesto que las cantidades conservadas se escriben como $A = \sum_{r,i} a(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i)$ y las variables se factorizan sobre posiciones y velocidades, obteniéndose:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_N \sum_{n(\cdot)}^* \exp \left[\sum_{r,i} b \cdot a(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \right] \\ &= \sum_N \sum_{n(\cdot)}^* \prod_{r,i} \exp [b \cdot a(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i)]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

El asterisco denota que la suma está restringida a configuraciones $n(\cdot)$ con N partículas. La doble suma en (3.5) se puede reescribir como $\sum_{n(\cdot)}$ sin restricción, con lo que finalmente resulta:

$$\rho(n(\cdot)) = \prod_{\mathbf{r}, i} \frac{e^{b \cdot a(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i)}}{1 + e^{b \cdot a(\mathbf{c}_i)}}. \quad (3.6)$$

Una vez obtenida $\rho(n(\cdot))$, podemos calcular la densidad media por enlace como:

$$f_i = \langle n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \rangle = \frac{1}{1 + e^{-b \cdot a(\mathbf{c}_i)}} \equiv \frac{1}{1 + e^{-\nu + \beta \epsilon(\mathbf{c}_i)}}. \quad (3.7)$$

En particular, para modelos atórmicos, ($\beta = 0$), f_i es independiente de la dirección y se reduce a:

$$f = \langle n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \rangle = \frac{1}{1 + e^{-\nu}} \equiv \frac{\rho}{b}, \quad (3.8)$$

donde ρ es la densidad por nodo. La expresión para f_i tiene la misma forma que la distribución de un gas ideal de Fermi, debido al principio de exclusión que rige para las partículas en el gas de red. Otras cantidades que serán usadas constantemente son las fluctuaciones de los números de ocupación, definidas como:

$$\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) = n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) - f_i \quad (3.9)$$

y cuyos valores medios son:

$$\begin{aligned} \langle \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \rangle &= 0 \\ \langle (\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i))^2 \rangle &= \kappa_i = f_i(1 - f_i) \\ \langle (\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i))^3 \rangle &= \kappa_i^{(3)} = f_i(1 - f_i)(1 - 2f_i). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Puesto que la distribución de equilibrio (3.6) está factorizada en los nodos \mathbf{r} y velocidades i , no hay correlaciones de partículas en diferentes posiciones o velocidades:

$$\begin{aligned} \langle \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \delta n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j) \rangle &= \kappa_i \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta_{ij} \\ \langle \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \delta n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j) \delta n(\mathbf{r}'', \mathbf{c}_k) \rangle &= \kappa_i^{(3)} \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \delta_{ijk}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Pasemos ahora a analizar distribuciones de equilibrio en la que la velocidad media del fluido es no nula, esto es, $\gamma \neq 0$, denotadas por $\rho_\gamma(n(\cdot))$. Su expresión es:

$$\rho_\gamma(n(\cdot)) = Z^{-1} \exp[\nu N + \gamma \cdot \mathbf{P} - \beta H] = \prod_{\mathbf{r}, i} \frac{e^{[\nu + \gamma \cdot \mathbf{c}_i - \beta \epsilon(\mathbf{c}_i)] n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i)}}{1 + e^{\nu + \gamma \cdot \mathbf{c}_i - \beta \epsilon(\mathbf{c}_i)}}, \quad (3.12)$$

con lo que la densidad por enlace depende de la dirección, siendo su valor:

$$f_\gamma(\mathbf{c}_i) = \langle n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \rangle_\gamma = \frac{1}{1 + e^{-\nu - \gamma \cdot \mathbf{c}_i + \beta \epsilon(\mathbf{c}_i)}}. \quad (3.13)$$

Los valores medios del número de partículas, momento y energía por nodo son simplemente,

$$\begin{aligned} \rho_\gamma &= \sum_i f_\gamma(\mathbf{c}_i) \\ \rho_\gamma \mathbf{u} = \mathbf{g}_\gamma &= \sum_i \mathbf{c}_i f_\gamma(\mathbf{c}_i) \\ e_\gamma &= \sum_i \epsilon(\mathbf{c}_i) f_\gamma(\mathbf{c}_i). \end{aligned} \quad (3.14)$$

En la siguiente sección, dedicada a la ecuación de Euler, aparecerá la presión, definida en la ecuación (1.6) y que para gases de red se escribe:

$$p = \frac{1}{d} \sum_i c_i^2 \langle n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \rangle = \frac{1}{d} \sum_i c_i^2 f_i, \quad (3.15)$$

que está calculada en un estado de equilibrio con valor medio del momento nulo y que se reduce a $p = c_0^2 \rho$ para modelos atérmicos. Hemos definido la velocidad del sonido para modelos atérmicos, c_0 , como $c_0^2 = \sum_i c_i^2 / bd$.

Consideremos ahora el caso de un estado de equilibrio no uniforme, en el que las variables conjugadas $b(\mathbf{r}) = \{\nu(\mathbf{r}), \gamma(\mathbf{r}), \dots\}$ dependen de la posición. La distribución de equilibrio se obtiene reemplazando la expresión en (3.3) por:

$$\rho_l(n(\cdot)) = Z_l^{-1} \exp \left[\sum_{\mathbf{r}} \{ \nu(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) + \gamma(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{g}(\mathbf{r}) - \beta(\mathbf{r}) \epsilon(\mathbf{r}) \} \right]. \quad (3.16)$$

Esta colectividad conduce a que las variables macroscópicas no son uniformes sino que dependen de la posición, aunque localmente siguen verificando las relaciones termodinámicas. Por ejemplo, la densidad por canal se escribe de acuerdo con (3.13):

$$f_l(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) = \langle n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \rangle_l = \frac{1}{1 + e^{-\nu(\mathbf{r}) - \gamma(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{c}_i + \beta(\mathbf{r}) \epsilon(\mathbf{c}_i)}}, \quad (3.17)$$

y las ecuaciones (3.14) son válidas localmente,

$$\begin{aligned} \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle_l &= \sum_i f_l(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \\ \langle \mathbf{g}(\mathbf{r}) \rangle_l &= \sum_i \mathbf{c}_i f_l(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) = \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle_l \mathbf{u}(\mathbf{r}) \\ \langle \epsilon(\mathbf{r}) \rangle_l &= \sum_i \epsilon(\mathbf{c}_i) f_l(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Las ecuaciones (3.18) relacionan las variables $\{\rho(\mathbf{r}), \mathbf{g}(\mathbf{r}), e(\mathbf{r})\}$ con los multiplicadores de Lagrange $\{\nu(\mathbf{r}), \gamma(\mathbf{r}), -\beta(\mathbf{r})\}$. El equilibrio local nos proporciona un método para definir variables termodinámicas conjugadas $\{\nu(\mathbf{r}, t), \gamma(\mathbf{r}, t) \dots\}$ fuera del equilibrio [McLennan 89]. Consideremos un sistema fuera del equilibrio descrito por una distribución de no equilibrio $\rho(n(\cdot), t)$, en la que el valor medio de las densidades conservadas es:

$$a_{ne}(\mathbf{r}, t) = \{\rho_{ne}(\mathbf{r}, t), \mathbf{g}_{ne}(\mathbf{r}, t), e_{ne}(\mathbf{r}, t) \dots\}. \quad (3.19)$$

Definamos también el estado de *equilibrio local*,

$$\rho_l(n(\cdot)) = Z_l^{-1} \exp \left[\sum_{\mathbf{r}} b_{ne}(\mathbf{r}, t) a(\mathbf{r}) \right]. \quad (3.20)$$

Las variables conjugadas de no equilibrio, $b_{ne}(\mathbf{r}, t)$ no están determinadas y se fijan con el requerimiento de que el promedio de las densidades conservadas sobre el no equilibrio calculadas con (3.20), sean iguales a sus valores medios *en todos los instantes de tiempo*, esto es,

$$\langle a(\mathbf{r}) \rangle_l = a_{ne}(\mathbf{r}, t). \quad (3.21)$$

Esta ecuación *define* los parámetros termodinámicos conjugados, $b_{ne}(\mathbf{r}, t) = \{\nu_{ne}(\mathbf{r}, t), \gamma_{ne}(\mathbf{r}, t), -\beta_{ne}(\mathbf{r}, t), \dots\}$ fuera del equilibrio térmico en función de las densidades $a_{ne}(\mathbf{r}, t)$.

La distribución de no equilibrio puede ser representada como:

$$\rho(n(\cdot), t) = \rho_l(n(\cdot)) + \rho_D(n(\cdot), t). \quad (3.22)$$

Esta ecuación describe la parte disipativa ρ_D de la distribución que representa las desviaciones del equilibrio local.

Como consecuencia de (2.14), sección 2.6, $\rho_l(n(\cdot))$ es invariante bajo el paso de colisión, así que sólo cambia bajo la propagación, esto es, por desplazamiento real de las partículas. Para largos tiempos y largas separaciones espaciales tales desviaciones son proporcionales a los gradientes en el sistema, y dan lugar al amortiguamiento viscoso y la conductividad calorífica y por ello el nombre de *parte disipativa*.

Para pequeños gradientes y pequeñas desviaciones del equilibrio total, $\rho_D(n(\cdot), t)$ puede ser resuelta perturbativamente a partir de la ecuación de Liouville (2.18), dando las fórmulas de Green-Kubo para los coeficientes de transporte y las ecuaciones de Navier-Stokes de la hidrodinámica (sección 3.3). En la sección siguiente consideraremos la distribución de equilibrio local sin disipación, que da lugar a las ecuaciones de Euler de la hidrodinámica.

3.2 Ecuación de Euler

Una derivación sistemática de las ecuaciones de la dinámica de fluidos para grandes escalas espaciales y temporales se basa en el método de Chapman y Enskog [Chapman y Cowling 70] o en un formalismo multiescala equivalente. Las ecuaciones resultantes se escriben en forma de un desarrollo en potencias de gradientes. Reescribimos aquí la ecuación de Navier–Stokes para fluidos continuos, (1.10)

$$\partial_t \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \nabla p = \eta \nabla^2 \mathbf{u} + [\eta(1 - \frac{2}{d}) + \zeta] \nabla \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (3.23)$$

El miembro de la izquierda constituye la ecuación de Euler no disipativa, que es de orden $\mathcal{O}(\nabla)$. El resto es el término disipativo de Navier–Stokes, que es de orden $\mathcal{O}(\nabla^2)$.

La idea esencial del método de Chapman–Enskog es que las soluciones de la ecuación de Liouville a grandes escalas (\mathbf{r}, t) dependen explícitamente de \mathbf{r} y t sólo a través de las cantidades conservadas locales, que varían lentamente. Las derivadas temporales son, por tanto, también pequeñas. Un parámetro formal para medir esas variaciones lentas en el espacio es el gradiente (∇) . También el gradiente es válido para medir variaciones temporales, puesto que las derivadas temporales de las cantidades conservadas se pueden eliminar utilizando las leyes de conservación $\partial_t \sim \mathcal{O}(\nabla)$.

Aunque los gradientes sean pequeños, las desviaciones totales del equilibrio en un sistema macroscópico, $\delta = \{|\mathbf{u}|, \Delta \rho, \Delta e \dots\}$ con $\Delta \mathbf{a} = \mathbf{a}_{\text{ne}}(\mathbf{r}, t) - \langle \mathbf{a}(\mathbf{r}) \rangle$, pueden ser todavía grandes. Esto introduce un desarrollo en un segundo parámetro δ . El término $\mathcal{O}(\delta)$ en (3.23) corresponde a la ecuación *linealizada* de la dinámica de fluidos, y contiene tanto los términos de Euler no disipativos, $\mathcal{O}(\nabla p) \sim \mathcal{O}(\delta, \nabla)$, como el término de Navier–Stokes disipativo, $\mathcal{O}(\eta \nabla^2 \mathbf{u}) \sim (\delta, \nabla^2)$.

Para derivar la ecuación no lineal de la dinámica de fluidos, el término convectivo no lineal, $\nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u} \sim \mathcal{O}(\delta^2, \nabla)$ también debe ser incluido. La meta de este capítulo será la derivación de las ecuaciones macroscópicas para un fluido de gas de red, incluyendo términos $\mathcal{O}(\delta, \nabla)$, $\mathcal{O}(\delta^2, \nabla)$ y $\mathcal{O}(\delta, \nabla^2)$.

En esta sección queremos derivar la ecuación de Euler para gases de red, $\mathcal{O}(\nabla)$ similar a (1.1b). Para ello, consideraremos la ecuación de conservación microscópica del momento, (2.7) con densidad $a(\mathbf{c}_i) = \mathbf{c}_i$ y la desarrollamos hasta primer orden en gradientes (∇) , se tiene:

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{g}(\mathbf{r}) &= -\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}(\mathbf{r}) + \mathcal{O}(\nabla^2) \\ \boldsymbol{\tau}(\mathbf{r}) &= \sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i), \end{aligned} \quad (3.24)$$

donde órdenes más altos en derivadas temporales son $\mathcal{O}(\nabla^2)$. Su promedio sobre la colectividad de equilibrio local, (3.16), nos lleva a la ecuación de Euler. Los términos en ∇^2 contribuirán a la ecuación de Navier-Stokes y serán tratados en la sección siguiente.

A diferencia de los fluidos continuos, los estados de equilibrio con $\gamma = 0$ y $\gamma \neq 0$ no están relacionados por una transformación de Galileo, puesto que los gases de red no son invariantes Galileo. Por tanto, la forma de la ecuación de Euler no será la escrita en la ecuación (1.7), sino que tendrá factores y términos adicionales. El propósito del presente capítulo es obtener la ecuación de Euler, y en particular los términos no invariantes Galileo.

Para derivar la ecuación de Euler no lineal necesitamos calcular $\langle \tau \rangle_l$ y sólo se necesita considerar explícitamente el parámetro γ , conjugado del momento \mathbf{g} . Por tanto, podemos reemplazar ρ_l en (3.16) por ρ_γ con $\gamma \neq 0$,

$$\rho_\gamma(n(\cdot)) = Z^{-1} \frac{\exp(\nu N + \gamma \cdot \mathbf{P} - \beta H)}{\langle \exp(\gamma \cdot \mathbf{P}) \rangle}, \quad (3.25)$$

donde $\langle \dots \rangle$ denota un promedio sobre el estado de equilibrio básico (aquél con $\gamma = 0$). Desarrollando ρ_γ alrededor del estado de equilibrio básico ρ , obtenemos:

$$\begin{aligned} \rho_\gamma(n(\cdot)) &= \rho(n(\cdot)) \left\{ 1 + \gamma \cdot \mathbf{P} + \frac{1}{2} \gamma \gamma : [\mathbf{P}\mathbf{P} - \langle \mathbf{P}\mathbf{P} \rangle] + \mathcal{O}(\gamma^3) \right\} \\ &= \rho(n(\cdot)) \left\{ 1 + \gamma_\mu P_\mu + \frac{1}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu [\delta P_\mu P_\nu] + \mathcal{O}(\gamma^3) \right\}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

donde se han introducido las fluctuaciones $\delta A = A - \langle A \rangle$. Utilizaremos el convenio de Einstein de suma sobre subíndices repetidos. La ecuación (3.26) nos permite relacionar valores medios con $\gamma = 0$ y con $\gamma \neq 0$:

$$\begin{aligned} V \Delta \rho &\equiv \langle N \rangle_\gamma - \langle N \rangle = \frac{1}{2d} \gamma^2 \langle \mathbf{P}^2 \delta N \rangle \\ V \rho_\gamma \mathbf{u} &\equiv \langle \mathbf{P} \rangle_\gamma = \frac{1}{d} \gamma \langle \mathbf{P}^2 \rangle \\ V \Delta e &\equiv \langle E \rangle_\gamma - \langle E \rangle = \frac{1}{2d} \gamma^2 \langle \mathbf{P}^2 \delta E \rangle, \end{aligned} \quad (3.27)$$

donde hemos sustituido $\langle P_\mu P_\nu \rangle$ por $\frac{1}{d} \langle \mathbf{P}^2 \delta_{\mu\nu} \rangle$, puesto que los tensores de segundo orden son isótropos en todas las redes estudiadas.

Para obtener la ecuación de Euler hemos de promediar el tensor de flujo de momento, (3.25), sobre la colectividad descrita por (3.26). Previamente descomponemos \mathbf{T} en su parte de traza nula, \mathbf{Q} , más su traza $T = T_{\alpha\alpha}/d$:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \sum_{\mathbf{r}} \tau(\mathbf{r}) = \mathbf{Q} + \mathbf{1}T \\ \mathbf{Q} &= \sum_{\mathbf{r}, i} (\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i - \frac{1}{d} c_i^2 \mathbf{1}) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i). \end{aligned} \quad (3.28)$$

El promedio de la ecuación (3.28) con la colectividad (3.26) nos da:

$$\begin{aligned}\langle T_{\alpha\beta} \rangle_\gamma &= \langle T_{\alpha\beta} \rangle + \frac{1}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu \langle P_\mu P_\nu \delta T_{\alpha\beta} \rangle + \mathcal{O}(\gamma^3) \\ &= \langle T_{\alpha\beta} \rangle + \frac{1}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu \langle P_\mu P_\nu \delta Q_{\alpha\beta} \rangle + \frac{1}{2d} \gamma^2 \langle \mathbf{P}^2 \delta T \rangle \delta_{\alpha\beta} + \mathcal{O}(\gamma^3).\end{aligned}\quad (3.29)$$

El término $\langle T_{\alpha\beta} \rangle$ evaluado en un sistema en reposo es diagonal y el coeficiente escalar no es más que la presión, definida como el flujo de momento por unidad de volumen en un sistema de referencia en *reposo*. Depende de los parámetros termodinámicos que caracterizan el estado de equilibrio, ρ_γ, e_γ y \mathbf{u} así que $p_0 = p_0(\rho_\gamma, e_\gamma, \mathbf{u})$. Para pequeñas desviaciones del equilibrio, p_0 puede ser determinada como un desarrollo perturbativo en potencias de δ . La ecuación (3.29) queda entonces:

$$\langle T_{\alpha\beta} \rangle_\gamma = \{V p_0 + \frac{1}{2d} \gamma^2 \langle \mathbf{P}^2 \delta T \rangle\} \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu \langle P_\mu P_\nu \delta Q_{\alpha\beta} \rangle.\quad (3.30)$$

El valor del parámetro conjugado γ es proporcional a \mathbf{u} , como se ve en (3.27). Por tanto $\langle T_{\alpha\beta} \rangle_\gamma$ recuerda a la expresión (1.6), excepto que el coeficiente de $\mathbf{u}\mathbf{u}$ no es un escalar sino un tensor de cuarto orden.

Sin embargo, la presión p_0 en la expresión (3.30) está expresada en función de las variables de estado ρ, e calculadas en el equilibrio básico. Sus valores cuando $\gamma \neq 0$ han sido obtenidos en (3.27). Un desarrollo de Taylor de la presión nos permite escribir:

$$p_0(\rho, e) = p_0(\rho_\gamma, e_\gamma) - \left(\frac{\partial p_0}{\partial \rho} \right)_e \Delta \rho - \left(\frac{\partial p_0}{\partial e} \right)_\rho \Delta e,\quad (3.31)$$

que, sustituido en la ecuación (3.30) nos lleva a:

$$\langle T_{\alpha\beta} \rangle_\gamma = \{V p_0(\rho_\gamma, e_\gamma) + \frac{1}{2d} \gamma^2 \langle \mathbf{P}^2 \delta \hat{T} \rangle\} \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \gamma_\mu \gamma_\nu \langle P_\mu P_\nu \delta Q_{\alpha\beta} \rangle.\quad (3.32)$$

En esta ecuación hemos englobado en $\delta \hat{T}$ las derivadas de la presión:

$$\delta \hat{T} = \delta T - \left(\frac{\partial p_0}{\partial \rho} \right)_e \delta N - \left(\frac{\partial p_0}{\partial e} \right)_\rho \delta E,\quad (3.33)$$

donde el circunflejo indica que se trata de una cantidad “sustraída”, esto es, eliminamos de δT la proyección sobre el espacio de las cantidades conservadas δN y δE . Este tipo de proyecciones volverá a aparecer en el cálculo de la fórmulas de Green-Kubo, sección 3.3.

Nos queda por analizar el último término de (3.32), $\langle P_\mu P_\nu \delta Q_{\alpha\beta} \rangle$. Es un tensor de cuarto orden de traza nula en $\{\alpha\beta\}$. Si el gas de red está definido en una red suficientemente isotrópica (FHP o FCHC), toma la forma:

$$\langle P_\mu P_\nu \delta Q_{\alpha\beta} \rangle = A \{ \delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta} + \delta_{\nu\alpha} \delta_{\mu\beta} - \frac{2}{d} \delta_{\mu\nu} \delta_{\alpha\beta} \}\quad (3.34)$$

con el coeficiente A dado por:

$$A = \frac{1}{(d-1)(d+2)} \langle P_\alpha P_\beta \delta Q_{\alpha\beta} \rangle. \quad (3.35)$$

Por último, podemos utilizar (3.27b) para reemplazar las variables conjugadas γ por la velocidad \mathbf{u} , obteniendo:

$$\langle \mathbf{T} \rangle_\gamma = V \left\{ p_0 - \frac{1}{2} G_1(\rho) \rho \mathbf{u}^2 \right\} \mathbf{1} + V G(\rho) \rho \mathbf{u} \mathbf{u}, \quad (3.36)$$

con los llamados 'factores no galileanos' $G(\rho)$ y $G_1(\rho)$ dados por:

$$\begin{aligned} G(\rho) &= \frac{d^2 \rho V}{(d-1)(d+2)} \frac{\langle P_\alpha P_\beta \delta Q_{\alpha\beta} \rangle}{\langle \mathbf{P}^2 \rangle^2} \\ G_1(\rho) &= \frac{G(\rho) - \frac{1}{2} d^2 \rho V \frac{\langle \mathbf{P}^2 \delta \hat{T} \rangle}{\langle \mathbf{P}^2 \rangle^2}}{\langle \mathbf{P}^2 \rangle^2}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

La ecuación (3.36) es muy diferente a su análoga continua, (1.6), debido a la presencia de G y G_1 . La parte proporcional a $\delta_{\alpha\beta}$ puede ser interpretada como la ecuación de estado para un gas de red en un sistema que se mueve con velocidad \mathbf{u} : $p_0(\rho_\gamma, e_\gamma) = p(\rho, e, \mathbf{u})$, que se reduce a la ecuación de estado usual cuando $\mathbf{u} = 0$. El factor G en la parte $\mathbf{u} \mathbf{u}$ puede englobarse en t si reescalamos el tiempo con G [Frisch *et al* 86]. Para ello, es necesario que tanto ρ como e sean constantes. La primera condición $\rho = \text{cte}$, implica que $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, esto es, *fluidos incompresibles*. En cualquier caso, ninguno de los dos factores no galileanos aparecen en el régimen lineal, porque ambos multiplican a términos u^2 . Si el gas de red considerado no posee tensores de cuarto orden isótropos, aparecen más factores no galileanos, G_2 , multiplicando a $(u_\alpha)^2 \delta_{\alpha\beta}$. También factores adicionales no galileanos aparecen en la ecuación de flujo de calor.

La definición de G_1 contiene la cantidad sustraída $\delta \hat{T}$, que se obtiene restando de δT su proyección sobre las cantidades conservadas, (3.33). Esta cantidad puede ser nula en dos casos:

- modelos con una sola velocidad, como HPP, FHP-I o FCHC. Entonces $c_i^2 = \text{cte}$, con lo que δT es proporcional a δN .
- modelos térmicos en los que la energía es puramente cinética; $c_i^2 = 2e$, y δT es simplemente δE .

En ambos casos $G_1 = G$.

En lo que sigue vamos a evaluar (3.37) en detalle. Primeramente obtenemos $\langle P^2 \rangle$:

$$\langle P^2 \rangle = \sum_{r,r'} \sum_{ij} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_j \langle n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j) \rangle. \quad (3.38)$$

Hacemos uso de las ecuaciones (3.10) para escribir:

$$\langle P^2 \rangle = V \sum_i \mathbf{c}_i^2 \kappa_i \quad (3.39)$$

(para modelos atérmicos $\kappa(\mathbf{c}_i) \equiv \kappa$). Análogamente:

$$\langle P_\alpha P_\beta \delta Q_{\alpha\beta} \rangle = V \frac{d-1}{d} \sum_i \mathbf{c}_i^4 \kappa_i^{(3)}, \quad (3.40)$$

con lo que:

$$G(\rho) = \begin{cases} \left(\frac{\rho d}{d+2} \right) \frac{\sum_i \mathbf{c}_i^4 \kappa_i^{(3)}}{[\sum_i \mathbf{c}_i^2 \kappa_i]^2} & \text{t\u00e9rmicos} \\ \left(\frac{bd}{d+2} \right) \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) \frac{\sum_i \mathbf{c}_i^4}{[\sum_i \mathbf{c}_i^2]^2} & \text{at\u00e9rmicos.} \end{cases} \quad (3.41)$$

Por \u00faltimo, calcularemos el factor G_1 para modelos at\u00e9rmicos con part\u00edculas con diferentes velocidades (FHP-II y III), puesto que para modelos t\u00e9rmicos o con una \u00fanica velocidad, ya se vi\u00f3 que $\delta \hat{T} = 0$ y $G_1 = G$. Para dichos modelos, $p_0 = f \frac{1}{d} \sum_i \mathbf{c}_i^2$, y $dp_0/d\rho = 1/bd \sum_i \mathbf{c}_i^2 = c_0^2$. Por tanto,

$$G_1(\rho) - G(\rho) = - \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) \frac{\sum_i \mathbf{c}_i^2 (\mathbf{c}_i^2 - dc_0^2)}{2bdc_0^4}. \quad (3.42)$$

Las expresiones m\u00e1s generales para los factores no galileanos son las (3.37), y son v\u00e1lidas incluso para modelos que violan el balance semidetallado, y en los que el estado de equilibrio no tiene la forma (3.3) (y como consecuencia no hay factorizaci\u00f3n sobre diferentes velocidades (3.7)). Desde un punto de vista computacional, este m\u00e9todo tiene la ventaja de que las medidas de los factores no galileanos se hacen en el equilibrio b\u00e1sico, esto es, en una colectividad en el que el momento fluct\u00faa alrededor del estado con $\mathbf{u} = 0$. Los m\u00e9todos usados tradicionalmente se basaban en medidas sobre un sistema fuera del equilibrio utilizando como definici\u00f3n de G :

$$G(\rho) = \lim_{u \rightarrow 0} \rho V \frac{\langle T_{xy} \rangle_\gamma}{\langle P_x \rangle_\gamma \langle P_y \rangle_\gamma}, \quad (3.43)$$

donde el tensor de tensiones y el momento se miden en un sistema con valor medio de la velocidad \mathbf{u} muy pequeño [d’Humières *et al* 87].

Si el gas de red tiene invariantes adicionales, como los invariantes que serán discutidos en el capítulo 4, deben ser incluidos en (3.20) y (3.25) y producen términos adicionales de órdenes $\mathcal{O}(b)$ y $\mathcal{O}(b^2)$ en (3.26) y en (3.36) [Zanetti 89, Ernst 91a].

El resultado hasta el momento en la derivación de las ecuaciones de fluidos puede obtenerse combinando (3.36) con (3.24):

$$\partial_t \rho \mathbf{u} = -\nabla [p_0 - \frac{1}{2} G_1(\rho) \rho \mathbf{u}^2] + \nabla \cdot G(\rho) \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \mathcal{O}(\delta^3 \nabla), \quad (3.44)$$

esto es, términos $\mathcal{O}(\nabla)$ lineales en los gradientes (término de Euler) y han sido calculados hasta orden $\mathcal{O}(\delta^2, \nabla)$ inclusive.

3.3 Ecuaciones de Navier–Stokes disipativas

Lo que queda por hacer para la obtención de las ecuaciones no lineales de Navier–Stokes es la derivación de la parte disipativa. Inspección de la ecuación (3.23) muestra que podemos determinar los términos $\mathcal{O}(\delta, \nabla^2)$ correctamente de la teoría linealizada alrededor del equilibrio total, esto es, $\mathcal{O}(\delta)$. Dicha teoría de la respuesta lineal contiene los términos de Euler linealizados, $\mathcal{O}(\delta, \nabla)$, los de Navier–Stokes linealizados, $\mathcal{O}(\delta, \nabla^2)$, los de Burnett, $\mathcal{O}(\delta, \nabla^3)$, etc. Por tanto, es suficiente emplear la teoría de la respuesta lineal para obtener la parte disipativa del término de Navier–Stokes de orden $\mathcal{O}(\delta, \nabla^2)$, que completará la derivación de las ecuaciones de la dinámica de fluidos para gases de red hasta los órdenes deseados en δ y ∇ .

En esta sección resolveremos la ecuación de Liouville (2.15) linealizada alrededor del equilibrio total, y buscaremos soluciones en la forma (3.22), donde $\rho_l(n(\cdot)) \sim \mathcal{O}(\nabla^0) = \mathcal{O}(1)$ y $\rho_D(n(\cdot), t) \sim \mathcal{O}(\nabla)$.

Supondremos que el estado inicial está especificado por el estado de *equilibrio local*,

$$\rho(n(\cdot), 0) = \rho_l(n(\cdot)) = Z_l^{-1} \exp \left[\sum_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{ne}}(\mathbf{r}, 0) a(\mathbf{r}) \right], \quad (3.45)$$

que, de acuerdo con (3.21), queda determinado por los valores iniciales de las cantidades conservadas locales, $a_{\mathbf{ne}}(\mathbf{r}, 0)$ en (3.19). Resolveremos la ecuación de Liouville con esta condición inicial.

En la sección previa hemos discutido los términos de Euler, $\mathcal{O}(\delta, \nabla)$ y $\mathcal{O}(\delta^2, \nabla)$. Para obtener la parte disipativa de la ecuación de Navier-Stokes, hasta $\mathcal{O}(\delta, \nabla^2)$, sólo es necesario considerar desviaciones lineales del equilibrio.

El objetivo de la presente sección es derivar las ecuaciones linealizadas de la hidrodinámica para los gases de red, análogas a (1.13), en particular los coeficientes de transporte en forma de relaciones de Green-Kubo. Para ello utilizaremos los métodos de la teoría de la respuesta lineal y el formalismo de los operadores de proyección.

Supongamos en (3.45) que $\delta b_{ne}(\mathbf{r}, 0) = b_{ne}(\mathbf{r}, 0) - b$ son las desviaciones iniciales del equilibrio. Entonces, podemos linealizar la distribución inicial (3.45) alrededor del equilibrio, que en el instante inicial vale:

$$\rho(n(\cdot), 0) = \rho(n(\cdot)) \left\{ 1 + \sum_{\mathbf{r}} \delta b_{ne}(\mathbf{r}, 0) \delta a(\mathbf{r}) \right\}, \quad (3.46)$$

donde $\rho(n(\cdot))$ está dado en (3.4) y $\delta a(\mathbf{r}) = a(\mathbf{r}) - \langle a(\mathbf{r}) \rangle$ son las fluctuaciones microscópicas alrededor de equilibrio. La evolución de estas desviaciones del equilibrio se obtiene promediándolas con (3.46):

$$\langle \delta a^n(\mathbf{r}, t) \rangle_{ne} = \sum_{\mathbf{r}'} \langle \delta a^n(\mathbf{r}, t) \delta a^m(\mathbf{r}', 0) \rangle \delta b_{ne}^m(\mathbf{r}', 0). \quad (3.47)$$

Esta expresión es la *hipótesis de Onsager*, que relaciona el decaimiento de *pequeñas desviaciones macroscópicas*, $\langle \delta a(t) \rangle_{ne}$, con el decaimiento de las fluctuaciones microscópicas, descritas por $\langle \delta a^n(t) \delta a^m(0) \rangle$. Como consecuencia, es equivalente calcular las ecuaciones de evolución para las cantidades $\langle \delta a \rangle_{ne}$ en no equilibrio que para las correlaciones en equilibrio. La ventaja de calcular las últimas es que no es necesaria ninguna consideración sobre estados de no equilibrio.

En lo que resta de la sección obtendremos las ecuaciones de evolución de las correlaciones como un desarrollo en vectores de onda k (o en gradientes) para k pequeño hasta orden k^2 . Ello nos conducirá a las ecuaciones linealizadas de la hidrodinámica, ecuación (1.13). Previamente hemos de introducir algunos conceptos.

Definimos la transformada de Fourier como:

$$F(\mathbf{k}) = F_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \delta F(\mathbf{r}), \quad (3.48)$$

y el producto escalar

$$\langle F|G \rangle = V^{-1} \langle F(\mathbf{k}) G^*(\mathbf{k}) \rangle = V^{-1} \langle F(\mathbf{k}) G(-\mathbf{k}) \rangle. \quad (3.49)$$

Las densidades de las cantidades conservadas se escriben en el espacio de Fourier:

$$a^m(\mathbf{k}) \implies \begin{cases} \rho_k(t) = \sum_i n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t) \\ \mathbf{g}_k(t) = \sum_i \mathbf{c}_i n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t) \\ e_k(t) = \sum_i \epsilon(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t), \end{cases} \quad (3.50)$$

donde $n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i)$.

Definimos ahora las fluctuaciones microscópicas recíprocas, b_k^m a través de la relación:

$$a_k^n = \langle a^n | a^m \rangle b_k^m, \quad (3.51)$$

(donde el convenio de sumación sobre índices repetidos está implícito) que satisfacen las relaciones

$$\begin{aligned} \langle a^n | b^m \rangle &= \delta_{nm} \\ \langle a^l | a^m \rangle \langle b^m | b^n \rangle &= \delta_{ln}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Los promedios de no equilibrio de las fluctuaciones de las densidades locales y de sus recíprocas están relacionadas, en virtud de (3.47) por:

$$\delta a_{ne}^n(\mathbf{k}, t) = \langle a^n | a^m \rangle \delta b_{ne}^m(\mathbf{k}, t). \quad (3.53)$$

Definimos el proyector hermítico \mathcal{P} sobre el espacio de las variables hidrodinámicas como: $\mathcal{P} = |a\rangle\langle b| = |b\rangle\langle a|$. Su acción sobre cualquier variable dinámica h es (pero no sobre densidades de probabilidad en el espacio de fases):

$$\mathcal{P}h = \langle h | a^m \rangle b_k^m = \langle h | b^m \rangle a_k^m. \quad (3.54)$$

Puesto que \mathcal{P} proyecta sobre las variables hidrodinámicas, el operador $\mathcal{Q} \equiv \mathbf{1} - \mathcal{P}$ lo hace sobre el subespacio complementario. Denotaremos por un circunflejo la actuación de \mathcal{Q} sobre funciones, $\mathcal{Q}h = \hat{h}$, o sobre operadores, $\mathcal{Q}F\mathcal{Q} = \hat{F}$, y las llamaremos “cantidades sustraídas”. Precisamente, en la derivación de los factores no galileanos (sección 3.2) ya apareció la acción de \mathcal{Q} sobre δT en (3.33).

Vamos ahora a derivar una ecuación para la proyección de la densidad de probabilidad (3.20) en el subespacio hidrodinámico (en esta sección eliminaremos el subíndice de no equilibrio ne). La evolución de la densidad $\rho(t)$ está dada por (2.18) como:

$$\rho(t+1) = (SW)\rho(t) = (\mathbf{1} + L)\rho(t) \quad (3.55)$$

Introducimos las desviaciones del equilibrio, $\phi(n(\cdot), t)$ definidas a través de $\rho(n(\cdot), t) = \rho_0(n(\cdot))[1 + \phi(n(\cdot), t)]$ con condición inicial (3.46) como $\phi(n(\cdot), 0) = \sum_r \delta b_{ne}(\mathbf{r}, 0) \delta a(\mathbf{r})$. La ecuación de Liouville da entonces:

$$\Delta_t \phi(t) = L\phi(t), \quad (3.56)$$

donde $\rho_0(n(\cdot))$ conmuta con \mathcal{SW} y $\Delta_t \phi(t) = \phi(t+1) - \phi(t)$. La actuación de \mathcal{P} y \mathcal{Q} sobre $\Delta_t \phi$ da:

$$\begin{aligned} \Delta_t \mathcal{P}\phi(t) &= \mathcal{P}L\mathcal{P}\phi(t) + \mathcal{P}L\mathcal{Q}\phi(t) \\ \Delta_t \mathcal{Q}\phi(t) &= \mathcal{Q}L\mathcal{P}\phi(t) + \mathcal{Q}L\mathcal{Q}\phi(t). \end{aligned} \quad (3.57)$$

Resolvamos formalmente la segunda de estas ecuaciones con condición inicial (3.46) ($\mathcal{Q}\phi(0) = 0$) para insertarla en la primera:

$$\Delta_t \mathcal{P}\phi(t) = \mathcal{P}L\mathcal{P}\phi(t) + \sum_{\tau=0}^{t-1} \mathcal{P}L\mathcal{Q}(\mathbf{1} + \hat{L})^\tau \mathcal{Q}L\mathcal{P}\phi(t - \tau - 1). \quad (3.58)$$

Esta ecuación se puede escribir en componentes, a_k^n :

$$\begin{aligned} \Delta_t \delta a_{ne}^n(\mathbf{k}, t) &= \langle a^n | L a^m \rangle \delta b_{ne}^m(\mathbf{k}, t) \\ &+ \sum_{\tau=0}^{t-1} \langle a^n | L \mathcal{Q}(\mathbf{1} + \hat{L})^\tau \mathcal{Q} L a^m \rangle \delta b_{ne}^m(\mathbf{k}, t - \tau - 1), \end{aligned} \quad (3.59)$$

El último término en (3.59) no local en el tiempo, $\sum_\tau \dots$, dará la parte irreversible de las ecuaciones (término de Navier-Stokes), mientras que el primer término, $\langle a | L a \rangle$ lleva en fluidos continuos a la parte de Euler linealizada $\mathcal{O}(\delta, \nabla)$. Analicemos cada término separadamente.

El operador L se define en (2.18) como $\mathcal{SW} - \mathbf{1}$. Las cantidades conservadas, a^m , son invariantes de colisión, $\mathcal{W}a^m = a^m$ (ver (2.23), sección 2.6). La acción del operador de traslación \mathcal{S} se ha definido en (2.16):

$$\begin{aligned} \langle a^n | L a^m \rangle &= V^{-1} \langle a^n \sum_i a^m(\mathbf{c}_i) [e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_i} - 1] n^*(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i) \rangle \\ &= V^{-1} \langle a^n \sum_i a^m(\mathbf{c}_i) [-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_i + \frac{1}{2}(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_i)^2 + \dots] n^*(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i) \rangle. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Si definimos la corriente asociada a a^n como

$$j_k^n(t) = \sum_i \mathbf{c}_i a^n(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t) \quad (3.61)$$

obtenemos:

$$\langle a^n | L a^m \rangle = -i k_\alpha \langle j_\alpha^n | a^m \rangle - \frac{1}{2} k_\alpha k_\beta \langle j_\alpha^n | j_\beta^m \rangle, \quad (3.62)$$

donde hemos omitido el subíndice k de la corriente j^n . Las funciones de correlación en (3.59), que involucran la evolución temporal proyectada $(\mathbf{1} + L)^\tau$ decaen rápidamente en las escalas macroscópicas. Podemos entonces aproximar:

$$b_k^n(t - \tau - 1) \simeq b_k^n(t). \quad (3.63)$$

Consideremos el término $\langle a^n | L Q (1 + \widehat{L})^\tau Q L a^m \rangle$. Hacemos que L actúe sobre a^n como L^\dagger :

$$\langle a^n | L Q (1 + \widehat{L})^\tau Q L a^m \rangle = \langle L^\dagger a^n | Q (1 + \widehat{L})^\tau Q L a^m \rangle. \quad (3.64)$$

La actuación de L sobre a_k^m es $(L a_k^m)^* = L a_{-k}^m = -i \mathbf{k} \cdot \mathbf{j}_{-k}^m$, según (3.62). Para, $L^\dagger a^n$ se tiene:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}^\dagger \mathcal{S}^\dagger a^n &= \mathcal{W}^\dagger \sum_i e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_i} a^n(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i) = \mathcal{W}^\dagger [a^n - i \mathbf{k} \cdot \mathbf{j}^n + \mathcal{O}(k^2)] \\ &= a^n - i \mathbf{k} \cdot \mathbf{j}^n(1) + \mathcal{O}(k^2), \end{aligned} \quad (3.65)$$

donde hemos escrito que $\mathcal{W}^\dagger j^n = j^n(1)$, (el argumento indica $\tau = 1$), que es válido en el límite $k \rightarrow 0$.

En consecuencia, en el orden más bajo de k :

$$\begin{aligned} \langle a^n | L Q (\mathbf{1} + \widehat{L})^\tau Q L a^m \rangle &= -k_\alpha k_\beta \langle \widehat{j}_\alpha^n(1) | (\mathbf{1} + L)^\tau \widehat{j}_\beta^m \rangle \\ &= -k_\alpha k_\beta \langle \widehat{j}_\alpha^n(\tau + 1) | \widehat{j}_\beta^m \rangle \end{aligned} \quad (3.66)$$

donde hemos hecho actuar Q sobre las corrientes j para dar las corrientes sustraídas \widehat{j} . Asimismo, hemos eliminado el cicunflejo del operador L puesto que actúa sobre variables microscópicas con $k \rightarrow 0$:

$$L P h_0 = L a_0 \langle b_0 | h_0 \rangle = (S W - \mathbf{1}) a_0 \langle b_0 | h_0 \rangle = 0, \quad (3.67)$$

y por lo tanto,

$$\widehat{L} h_0 = Q L (\mathbf{1} - P) h_0 = Q L h_0. \quad (3.68)$$

Pasamos a analizar $\Delta_t \delta a_{ne}^n(\mathbf{k}, t)$. Un desarrollo en serie de Taylor da:

$$\Delta_t \delta a_{ne}^n(\mathbf{k}, t) = \partial_t \delta a_{ne}^n(\mathbf{k}, t) + \frac{1}{2} \partial_t^2 \delta a_{ne}^n(\mathbf{k}, t) + \dots \quad (3.69)$$

El término en la derivada primera tiene la forma deseada de las ecuaciones de la hidrodinámica (1.1). El término ∂_t^2 es de orden k^2 , como puede verse en (3.62):

$$\begin{aligned}\partial_t \delta a_{ne}^n(\mathbf{k}, t) &= -ik_\alpha \langle j_\alpha^n | a^m \rangle \delta b_{ne}^m(\mathbf{k}, t) = -ik_\alpha \langle j_\alpha^n | b^m \rangle \delta a_{ne}^m(\mathbf{k}, t) \\ \partial_t^2 \delta a_{ne}^n(\mathbf{k}, t) &= -k_\alpha k_\beta \langle j_\alpha^n | b^m \rangle \langle j_\beta^m | a^l \rangle \delta b_{ne}^l(\mathbf{k}, t) \\ &= -k_\alpha k_\beta \langle j_\alpha^n | \mathcal{P} j_\beta^m \rangle \delta b_{ne}^m(\mathbf{k}, t),\end{aligned}\quad (3.70)$$

donde hemos utilizado la definición de \mathcal{P} (3.54).

Reuniendo todos estos resultados, ecuaciones (3.62), (3.66) y (3.70), llegamos a

$$\left[\partial_t + ik\Omega + k^2\Lambda \right] \langle a_k^n(t) \rangle_{ne} = 0, \quad (3.71)$$

donde las matrices Ω (Euler) y Λ (Navier-Stokes) son:

$$\begin{aligned}\Omega &= \langle j | a \rangle \chi^{-1} \\ \Lambda &= \left(\lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{\tau=0}^t \langle \hat{j}(t) | \hat{j} \rangle - \frac{1}{2} \langle \hat{j} | \hat{j} \rangle \right) \chi^{-1},\end{aligned}\quad (3.72a)$$

y la matriz de susceptibilidades:

$$\chi_{mn} = \langle a^m | a^n \rangle. \quad (3.73)$$

La ecuación (3.71) con las matrices Ω y Λ definidas en (3.72) son los resultados más importantes de esta sección. La matriz Λ expresa los coeficientes de transporte a través de fórmulas de Green-Kubo, cumpliendo uno de los objetivos más importantes de la Mecánica Estadística del no equilibrio: relacionar la dinámica microscópica con los coeficientes macroscópicos (coeficientes de transporte).

La ventaja del método aquí expuesto es que la dinámica subyacente (red, reglas de colisión o cantidades conservadas) no entra en absoluto en la derivación de las ecuaciones (3.71). Las principales diferencias con el caso continuo son la suma discreta en lugar de la integral y la presencia de la llamada *parte propagante* de los coeficientes de transporte:

$$\Lambda^p = -\frac{1}{2} \langle \hat{j} | \hat{j} \rangle \chi^{-1}, \quad (3.74)$$

que es una consecuencia de que el espacio y el tiempo son discretos.

Las corrientes sustraídas, $\hat{j} = Qj$, se pueden expresar con ayuda de (3.54), (3.51) y (3.72a) como:

$$\begin{aligned}\hat{j} &= j - \langle j | a^m \rangle b^m = j - \langle j | a^m \rangle \langle a | a \rangle_{mn}^{-1} a^n \\ &= j - \Omega a,\end{aligned}\quad (3.75)$$

que son ortogonales a las variables hidrodinámicas, $\langle \hat{j} | a \rangle = 0$.

En la obtención de la ecuación de Navier–Stokes (3.71) hemos tomado el límite $t \rightarrow \infty$, suponiendo que dicho límite existe. Este no es el caso en dimensión $d = 2$, donde $\langle j(t) | j \rangle$ decae como $1/t$, como se verá en la parte IIb de esta memoria. En este caso, la hidrodinámica no existe puesto que los coeficientes de transporte divergen logarítmicamente.

La matriz Λ da cuenta de la parte irreversible; la disipación. Para que sea así, Λ ha de ser definida positiva. Esto ha sido probado por [Schmitz y Dufty 90] para gases de red. En particular, implica que el operador de colisión linealizado, del que hablaremos extensamente más tarde tiene autovalores entre 0 y 2.

Para acabar este capítulo, obtendremos las fórmulas de Green–Kubo del tensor de viscosidades en modelos atómicos isótropos (nos restringiremos a sistemas bidimensionales). Los invariantes de colisión son el número de partículas y el momento:

$$a^m(\mathbf{c}_i) = \begin{cases} a^n &= 1 \\ a^l &= \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{c} = c_l \\ a^t &= \hat{\mathbf{k}}_{\perp} \cdot \mathbf{c} = c_t, \end{cases} \quad (3.76)$$

donde hemos separado el momento en la dirección paralela a \mathbf{k} , \mathbf{k}_{\parallel} , y perpendicular, \mathbf{k}_{\perp} . En este caso la matriz de susceptibilidades, χ es diagonal, no así la matriz de Euler Ω . Tras un sencillo cálculo obtenemos las corrientes sustraídas, como:

$$\hat{j}^m(\mathbf{c}_i) = \begin{cases} \hat{j}^n &= 0 \\ \hat{j}^l &= c_l^2 - c_0^2 \\ \hat{j}^t &= c_l c_t, \end{cases} \quad (3.77)$$

donde hemos definido $\hat{j}(\mathbf{c}_i)$ como:

$$\hat{j}(\mathbf{k}, t) = \sum_i \hat{j}(\mathbf{c}_i) n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t). \quad (3.78)$$

Podemos englobar las corrientes relacionadas con el momento en (3.77) en un único tensor (que no es de traza nula), definido como:

$$\hat{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t) = \sum_i (c_{\alpha} c_{\beta} - \delta_{\alpha\beta} c_0^2) n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t), \quad (3.79)$$

El tensor de viscosidades, (1.8), se escribe entonces:

$$\eta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{\rho}{c_0^2 b \kappa} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{\tau=0}^t \langle \hat{\mathcal{J}}_{\alpha\beta}(\tau) | \hat{\mathcal{J}}_{\gamma\delta} \rangle, \quad (3.80)$$

donde el asterisco indica que el término $\tau = 0$ va afectado por un factor $1/2$. Para redes isotropas, hay como máximo dos viscosidades, (1.9), llamadas de cizalla (η) y de volumen (ζ) y sus fórmulas de Green-Kubo son:

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{\rho}{bc_0^2 \kappa} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{\tau=0}^t \langle \hat{\mathcal{J}}_{xy}(\tau) | \hat{\mathcal{J}}_{xy} \rangle \\ \zeta &= \frac{\rho}{d^2 bc_0^2 \kappa} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{\tau=0}^t \langle \hat{\mathcal{J}}_{\alpha\alpha}(\tau) | \hat{\mathcal{J}}_{\beta\beta} \rangle. \end{aligned} \quad (3.81)$$

En la expresión de la viscosidad de volumen, ζ , la corriente que aparece $\hat{\mathcal{J}}_{\alpha\alpha}$ es la misma que en el factor no galileano G_1 , ecuaciones (3.32) y (3.37). Por tanto, ζ se anula en los casos allí descritos: modelos monovelocidad o con energía conservada puramente cinética, en los que $j_{\alpha\alpha}(\mathbf{c}_i)$ coincide con una cantidad conservada. Por otra parte, la viscosidad de cizalla se anula en sistemas unidimensionales, donde no tiene sentido hablar de ella.

4

Leyes de conservación espúreas

La gran ventaja de los gases de red es que son modelos muy simples útiles para la modelación de fluidos continuos. Su simplicidad se basa en que tanto el espacio como el tiempo son discretos. Sin embargo, este hecho tiene consecuencias no deseadas. Una de ellas es la presencia de factores no galileanos, que fueron descritos extensamente en la sección 3.2. Otro efecto inesperado debido también a la estructura discreta es la aparición de nuevas cantidades conservadas, que no tienen análogo en el caso de los fluidos continuos. Las denotaremos generalmente como “invariantes espúreas”, “leyes de conservación espúreas” o “leyes de conservación no físicas”. Ya hemos comentado algunas de ellas en las secciones 2.2 y 2.3, aunque aquí trataremos otro tipo. Allí hablamos de los invariantes de línea, que aparecen cuando sólo se incluyen reglas de colisión frontales. En el modelo HPP la única colisión posible es la binaria frontal, luego los invariantes de línea siempre están presentes. En el modelo FHP se pueden eliminar incluyendo colisiones ternarias (no frontales).

El conocimiento de todas las cantidades conservadas de un sistema como el estudiado es de gran importancia. De un lado, la distribución de equilibrio (3.3) se modifica con la presencia de nuevas cantidades conservadas y, por tanto, muchas propiedades de equilibrio cambian. Por otro lado, al conjunto de las ecuaciones de evolución de las variables hidrodinámicas hay que añadir las ecuaciones de evolución de las cantidades espúreas, así como los acoplamientos entre cantidades físicas y no físicas. La influencia de los invariantes espúreas puede minimizarse en la dinámica igualando a cero los multiplicadores de Lagrange asociados, esto es, trabajando con colectividades con valor medio nulo de dichas cantidades [Kadanoff et al]. Pero incluso adoptando este mecanismo, su efecto se aprecia porque modifican propie-

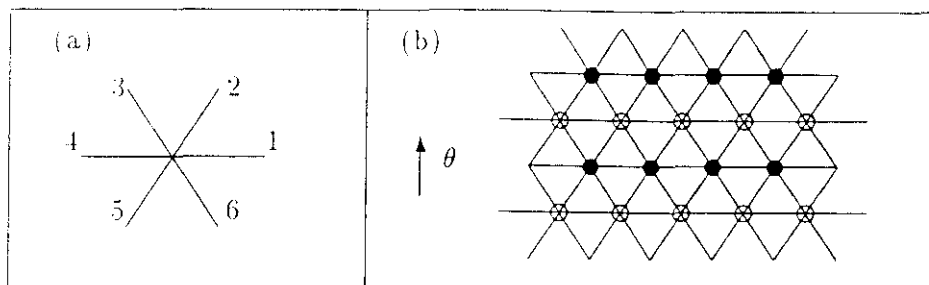


Figura 4.1: Modelo FHP. (a): Etiquetas de los canales. (b): División de la red en subredes según el vector θ_i de la red recíproca, con la propiedad $\theta \cdot c_j = 0, \pm 1$.

dades macroscópicas como el decaimiento de las funciones de correlación [Naitoh *et al* 90].

En este capítulo introduciremos dichos invariantes, ilustrándolo en detalle con el modelo FHP, calculando sus ecuaciones de evolución, las fórmulas de Green-Kubo y los términos de Euler.

4.1 Invariantes espúreos en el modelo FHP

Consideremos el modelo FHP definido en la sección 2.3, sin partícula en reposo por el momento. Está definido sobre una red triangular, con seis velocidades por nodo, etiquetadas 1, 2, ..., 6 comenzando por el eje X positivo y numeradas en sentido antihorario, como se puede ver en 4.1a. Hagamos una división de la red triangular en capas horizontales alternadas, la subred \bullet y la \circ , como se ilustra en la figura 4.1b. Están determinadas porque la componente Y de la posición es un múltiplo par o impar del espaciado de la red en la dirección y , esto es, $\theta \cdot \mathbf{r} = \text{par o impar}$, con $\theta = (0, 2/\sqrt{3})$. Puesto que $\theta \cdot \mathbf{r}$ es un entero para todo \mathbf{r} de la red, θ es un vector de la red recíproca excepto por un factor 2π . Estudiemos la evolución del momento paralelo a θ que se encuentra en el instante t en la subred \circ , esto es,

$$P_{\theta}^{\circ}(t) = \sum_{i, \mathbf{r} \in \{\circ\}} (\theta \cdot \mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t). \quad (4.1)$$

Las únicas partículas que tienen momento en la dirección θ son las dirigidas a lo largo de los canales 2, 3, 5 y 6. El paso de colisión mantiene invariante el momento total, luego también el momento a lo largo de la dirección θ . Por tanto, P_{θ}° es invariante bajo las colisiones. El paso de propagación mueve

las partículas que llevan momento en la dirección θ de la subred o a la \bullet y viceversa. Por tanto, la evolución temporal de las cantidades P_θ es:

$$\begin{aligned} P_\theta^\circ(t) &= P_\theta^\bullet(t+1) \\ P_\theta^\bullet(t) &= P_\theta^\circ(t+1). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Esto es, el momento en la dirección θ salta de la red o a la \bullet y viceversa. La suma de ambas cantidades no es más que la conservación del momento total a lo largo de la dirección θ y su diferencia se escribe como:

$$P_\theta^\circ(t+1) - P_\theta^\bullet(t+1) = -\left(P_\theta^\circ(t) - P_\theta^\bullet(t)\right), \quad (4.3)$$

que varía en el tiempo como $(-1)^t$. Por tanto, si definimos la cantidad global:

$$H_\theta(t) = (-1)^t \left[P_\theta^\circ(t) - P_\theta^\bullet(t) \right] = \sum_{i,r} (-1)^{\theta \cdot r + t} (\theta \cdot \mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t), \quad (4.4)$$

resulta ser *conservada e independiente* de las cantidades conservadas físicas. Son denominadas *staggered* (escalonadas) en la literatura.

La estructura de la cantidad conservada espúrea presentada en (4.4) es la típica de las que serán tratadas en este capítulo. De una parte, un factor $(-1)^{\theta \cdot r + t}$ con $\theta \cdot r$ entero que cambia de signo de nodo a nodo de la red. A continuación una combinación lineal de invariantes de colisión, en este caso el momento a lo largo de la dirección θ . Es precisamente la presencia del factor $(-1)^{\theta \cdot r}$ la que hace que estas cantidades sean típicas de sistemas discretos. Hacemos notar también que el número de nodos en cualquier dirección del sistema debe ser par a causa de las condiciones de contorno. Estas cantidades aparecen tanto en gases de red como en gases de Lorentz de red y en teorías gauge en el retículo [Nielsen y Ninomiya]. Su presencia ha sido observada muy claramente en gases de Lorentz de red [Frenkel y Binder 90, Binder y Ernst], en los que el decaimiento de las funciones de correlación presenta dos regímenes asintóticos, uno para tiempos pares y otro para impares.

El invariante presentado en la ecuación (4.4) está caracterizado por el vector $\theta = (0, 2/\sqrt{3})$ que es un vector paralelo a uno de la red recíproca, puesto que $\theta \cdot r$ es entero y que divide la red en capas paralelas horizontales. Otros vectores de la red recíproca que dan diferentes divisiones de la red son: $\theta_2 = (-1, -1/\sqrt{3})$ y $\theta_3 = (1, -1/\sqrt{3})$, que dividen la red triangular en capas paralelas a las direcciones de propagación rotadas 60° entre sí. La presencia de partículas en reposo ($c_7 = 0$) es irrelevante en (4.4), puesto que

$\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{c}_7 = 0$ y el paso de propagación las deja invariantes. Por tanto, estas leyes de conservación espúreas están presentes en todos los modelos FHP. Un mecanismo para eliminar estos invariantes es introducir partículas que salten a nuevos próximos vecinos. Sin embargo, no parece fácil probar que cualquier tipo de cantidades espúreas haya sido eliminada.

Resumiendo, el modelo FHP presenta tres cantidades conservadas nuevas, con densidades dadas por:

$$h_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{r}, t) = \sum_i (-1)^{\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{r} + t} (\hat{\boldsymbol{\theta}} \cdot \mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$$

$$\boldsymbol{\theta}_1 = (0, \frac{2}{\sqrt{3}}), \quad \boldsymbol{\theta}_2 = (-1, -\frac{1}{\sqrt{3}}), \quad \boldsymbol{\theta}_3 = (1, -\frac{1}{\sqrt{3}}), \quad (4.5)$$

donde $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ es un vector unitario en la dirección de $\boldsymbol{\theta}$. Estas cantidades conservadas se han obtenido mediante pura inspección de la dinámica y del modelo. Sin embargo, existe un método sistemático para buscar cantidades conservadas espúreas con la forma funcional descrita, que pasamos a explicar ahora.

Escribamos una cantidad conservada espúrea general, caracterizada por un vector $\boldsymbol{\theta}$ y un parámetro entero α , definida por

$$A(t) = \sum_{\mathbf{r}, i} a(\mathbf{c}_i | \boldsymbol{\theta}, \alpha) (-1)^{\alpha t + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{r}} n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t), \quad (4.6)$$

siendo $a(\mathbf{c}_i | \boldsymbol{\theta}, \alpha)$ una combinación lineal de invariantes de colisión, esto es:

$$\sum_i a(\mathbf{c}_i | \boldsymbol{\theta}, \alpha) I(\mathbf{c}_i | n) = 0. \quad (4.7)$$

Podemos insertar la ecuación de evolución, (2.5) para obtener:

$$\sum_i a(\mathbf{c}_i | \boldsymbol{\theta}, \alpha) (-1)^{\alpha t + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{r}} [n(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t + 1) - n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)] = 0. \quad (4.8)$$

Puesto que buscamos cantidades $A(t)$ conservadas, $A(t + 1) = A(t)$, y por tanto, la ecuación (4.8) queda, tras sumar sobre \mathbf{r} :

$$\sum_{\mathbf{r}, i} a(\mathbf{c}_i | \boldsymbol{\theta}, \alpha) (-1)^{\alpha t + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{r}} n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) [(-1)^{\alpha + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{c}_i} - 1] = 0. \quad (4.9)$$

Esta condición ha de satisfacerse para toda configuración $\{n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)\}$. Por tanto el sumando se tiene que anular:

$$(-1)^{\alpha + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{c}_i} a(\mathbf{c}_i | \boldsymbol{\theta}, \alpha) - a(\mathbf{c}_i | \boldsymbol{\theta}, \alpha) = 0. \quad (4.10)$$

Consecuentemente, $a(\mathbf{c}_i|\boldsymbol{\theta}, \alpha)$ define una cantidad conservada si:

- es combinación lineal de invariantes de colisión.
- es autovector de la matriz $(-1)^{\alpha+\boldsymbol{\theta}\cdot\mathbf{c}_i}\delta_{ij}$ con autovalor 1.

La condición (4.10) es un método útil para buscar cantidades conservadas espúreas de la forma (4.6), aunque en la práctica no da ninguna información sobre los posibles valores del vector $\boldsymbol{\theta}$ (en cuanto a los posibles valores de α , éstos son $\alpha = 1$ —cantidades espúreas *dinámicas*— y $\alpha = 0$ —*geométricas*). Sin embargo, sabemos que $\boldsymbol{\theta}\cdot\mathbf{r}$ = entero, y que tiene que ser par para algunos valores de \mathbf{r} e impar para otros, para que $(-1)^{\boldsymbol{\theta}\cdot\mathbf{r}}$ no se reduzca a un valor trivial. Ello da indicaciones sobre los posibles valores de $\boldsymbol{\theta}$. La aplicación del criterio (4.10) al modelo FHP da soluciones no nulas para 6 vectores $\boldsymbol{\theta}$, los tres indicadas en (4.5) más los mismos vectores cambiados de signo, que llevan a idénticas cantidades conservadas excepto un signo global.

4.2 Evolución de los invariantes espúreos en el modelo FHP

En esta sección derivaremos las ecuaciones de evolución de los invariantes espúreos, siguiendo los métodos del capítulo 3. Obtendremos primero la ecuación de Navier–Stokes linealizada y posteriormente la ecuación de Euler no lineal.

Para derivar las ecuaciones de evolución lineales de los invariantes espúreos podemos aplicar el método de la sección 3.3 al conjunto de las 6 variables $\{\rho(\mathbf{k}, t), \mathbf{g}(\mathbf{k}, t), h_\theta(\mathbf{k}, t)\}$. La transformada de Fourier de las nuevas cantidades conservadas espúreas es:

$$\begin{aligned} h_\theta(\mathbf{k}, t) &= \sum_{\mathbf{r}, i} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (-1)^{\boldsymbol{\theta}\cdot\mathbf{r}+t} (\hat{\boldsymbol{\theta}} \cdot \mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \\ &= \sum_i (-1)^t (\hat{\boldsymbol{\theta}} \cdot \mathbf{c}_i) n(\mathbf{k} + \pi\boldsymbol{\theta}, \mathbf{c}_i, t), \end{aligned} \quad (4.11)$$

donde hemos utilizado que $(-1)^{\boldsymbol{\theta}\cdot\mathbf{r}} = e^{-i\pi\boldsymbol{\theta}\cdot\mathbf{r}}$ y por tanto, la transformada de Fourier de h_θ no está evaluada en \mathbf{k} , sino en $\mathbf{k} + \pi\boldsymbol{\theta}$. Sin embargo, debido a la invariancia traslacional, el producto escalar $\langle \cdot | \cdot \rangle$ definido en (3.49) sólo acopla componentes de Fourier con el mismo vector de ondas:

$$\langle a(\mathbf{k}) | a'(\mathbf{k}') \rangle \propto \delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (4.12)$$

y, como consecuencia, las cantidades físicas ($\mathbf{k} \rightarrow 0$) no se acoplan con las espúreas ($\mathbf{k} \rightarrow \pi\theta_i$) ni éstas entre sí al nivel lineal. Las matrices de susceptibilidades, χ , (3.73), de Euler Ω y de Navier–Stokes Λ (3.72) se descomponen en cajas, cada una asociada con un valor de \mathbf{k} ; la caja ‘física’, con $\mathbf{k} \rightarrow 0$, y las cajas con $\mathbf{k} \rightarrow \pi\theta_i, i = 1, 2, 3$. Por otro lado, la matriz de Euler es nula en las cajas relacionadas con modos espúeos por argumentos de simetría, puesto que la densidad conservada a y su corriente asociada j para una misma cantidad conservada tienen diferente carácter tensorial, y por tanto su producto escalar $\langle a|j \rangle$ es nulo. Ello siempre sucede en cajas unidimensionales por los argumentos de simetría expuestos. En general, la matriz de Euler podrá tener elementos no nulos si hay dos o más cantidades conservadas con diferente paridad en su carácter tensorial y asociadas al mismo valor de \mathbf{k} . Esto sucede en la ‘caja física’ con $\mathbf{k} \rightarrow 0$, donde existen la densidad (escalar), el momento (vector) y, en determinados modelos, la energía (escalar).

Como consecuencia del último razonamiento, la ecuación de evolución linealizada para las cantidades espúreas en el modelo FHP no tiene término en $\mathcal{O}(k)$, reduciéndose a:

$$\left[\partial_t + k^2 \Lambda_\theta(\hat{\mathbf{k}}) \right] \langle h_\theta(\mathbf{k}, t) \rangle_{ne} = 0, \quad (4.13)$$

con difusividad $\Lambda_\theta(\hat{\mathbf{k}})$ dada por la fórmula de Green–Kubo (3.72) (nótese que $\hat{j}_\theta = j_\theta$ puesto que el elemento $\Omega_{\theta\theta} = 0$):

$$\Lambda_\theta(\hat{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\langle h_\theta | h_\theta \rangle} \left\{ \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{k \rightarrow \pi\theta} \sum_{\tau=0}^t \langle j_\theta(\mathbf{k}, \tau) | j_\theta(\mathbf{k}) \rangle - \frac{1}{2} \langle j_\theta(\mathbf{k}) | j_\theta(\mathbf{k}) \rangle \right\}$$

$$j_\theta(\mathbf{k}, \tau) = \hat{k}_\alpha \hat{\theta}_\beta \sum_i (-1)^i c_{i\alpha} c_{i\beta} n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t). \quad (4.14)$$

Podemos trabajar un poco más con esta ecuación, como se hizo en 3.4 para la viscosidad. La difusividad $\Lambda_\theta(\hat{\mathbf{k}})$ se puede escribir en función de un tensor de segundo orden, $D_{\alpha\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ que no depende de $\hat{\mathbf{k}}$, pero sí de $\hat{\boldsymbol{\theta}}$,

$$\Lambda_\theta(\hat{\mathbf{k}}) = \hat{k}_\alpha \hat{k}_\beta D_{\alpha\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}), \quad (4.15)$$

y cuya forma más general es:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) &= D_\perp \hat{\theta}_\perp \hat{\theta}_\perp + D_\parallel \hat{\theta}_\alpha \hat{\theta}_\beta \\ &= D_\perp (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\theta}_\alpha \hat{\theta}_\beta) + D_\parallel \hat{\theta}_\alpha \hat{\theta}_\beta, \end{aligned} \quad (4.16)$$

donde $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\perp$ es un vector unitario perpendicular a $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. Contiene dos escalares independientes, la difusividad transversal, D_\perp y la longitudinal, D_\parallel . La difusividad $\Lambda_\theta(\hat{\mathbf{k}})$ es por tanto:

$$\Lambda_\theta(\hat{\mathbf{k}}) = D_\perp + (D_\parallel - D_\perp)(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}})^2. \quad (4.17)$$

Los coeficientes D_\perp y D_\parallel están dados por una fórmula de Green-Kubo (4.14) con corrientes:

$$\begin{aligned} j_{D_\perp}(\mathbf{k}, t) &= (-1)^t \sum_i (\hat{\boldsymbol{\theta}} \cdot \mathbf{c}_i)(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\perp \cdot \mathbf{c}_i) n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t) \\ j_{D_\parallel}(\mathbf{k}, t) &= (-1)^t \sum_i (\hat{\boldsymbol{\theta}} \cdot \mathbf{c}_i)^2 n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Por último, la susceptibilidad $\langle h_\theta | h_\theta \rangle$ es:

$$\langle h_\theta | h_\theta \rangle = \sum_i (\hat{\boldsymbol{\theta}} \cdot \mathbf{c}_i)^2 \kappa = bc_0^2 \kappa, \quad (4.19)$$

donde c_0^2 y κ se han definido en la sección 3.1.

La ecuación (4.13) da la evolución linealizada ($\mathcal{O}(\delta, \nabla^2)$) de las cantidades espúreas, análogo a la parte disipativa de la ecuación de Navier-Stokes, ecuación (3.71). Muestra un comportamiento puramente difusivo, así como un coeficiente de difusión anisótropo, dependiendo del vector \mathbf{k} . Ello se debe a que en los modos h_θ aparece explícitamente el vector de la red recíproca $\boldsymbol{\theta}$, esto es, están íntimamente ligados a la estructura discreta de la red. Un efecto de anisotropía similar se puede ver en la ecuación no lineal de Euler, que se obtiene desarrollando la ley de conservación de las cantidades espúreas hasta orden $\mathcal{O}(\nabla)$ o hasta orden $\mathcal{O}(k)$ en variable de Fourier (sección 3.2):

$$\partial_t \rho \omega_\theta + i\mathbf{k} \cdot \langle \mathbf{J}_\theta \rangle_l = 0, \quad (4.20)$$

con

$$\begin{aligned} \rho \omega_\theta(\mathbf{k}, t) &= \langle h_\theta(\mathbf{k}, t) \rangle_l \\ \langle \mathbf{J}_\theta \rangle_l &= (-1)^t \langle \sum_i \mathbf{c}_i (\hat{\boldsymbol{\theta}} \cdot \mathbf{c}_i) n(\mathbf{k} + \pi \boldsymbol{\theta}, \mathbf{c}_i, t) \rangle_l. \end{aligned} \quad (4.21)$$

El promedio $\langle \cdot \rangle_l$ se toma sobre la colectividad de equilibrio local, ecuación (3.16) que, a causa de la presencia de las leyes de conservación espúreas ha de modificarse para incluir las cantidades h_θ con sus multiplicadores de Lagrange asociados, ξ_θ . Su desarrollo alrededor del equilibrio básico, definido ahora como $\gamma = 0$, $\xi_\theta = 0$, nos da:

$$\rho_{\gamma, \xi}(n(\cdot)) = \rho(n(\cdot)) \left\{ 1 + \gamma \cdot \mathbf{P} + \sum_\theta \xi_\theta H_\theta + \frac{1}{2} \left[\gamma \cdot \mathbf{P} + \sum_{\theta'} \xi_{\theta'} H_{\theta'} \right]^2 \right\}, \quad (4.22)$$

Al promediar (4.21) con la densidad (4.22) observamos que \mathbf{J}_θ no se acopla linealmente con \mathbf{P} ni con H_θ por tener diferente carácter tensorial: \mathbf{J}_θ es un tensor de orden dos mientras que \mathbf{P} y H_θ tienen carácter vectorial. El único acoplo posible en orden $\mathcal{O}(\delta^2)$ es con el término cruzado $\mathbf{P}H_\theta$, puesto que (utilizando (3.11)):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}_\theta \mathbf{P} \mathbf{P} \rangle &\sim \sum_{\mathbf{r} \mathbf{r}' \mathbf{r}''} \langle (-1)^{\theta \cdot \mathbf{r}} n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j) n(\mathbf{r}'', \mathbf{c}_k) \rangle = 0 \\ \langle \mathbf{J}_\theta \mathbf{P} H_{\theta'} \rangle &\sim \sum_{\mathbf{r} \mathbf{r}' \mathbf{r}''} \langle (-1)^{\theta \cdot \mathbf{r} + \theta' \cdot \mathbf{r}''} n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j) n(\mathbf{r}'', \mathbf{c}_k) \rangle \sim \delta_{\theta \theta'} \\ \langle \mathbf{J}_\theta H_{\theta'} H_{\theta''} \rangle &\sim \sum_{\mathbf{r} \mathbf{r}' \mathbf{r}''} \langle (-1)^{\theta \cdot \mathbf{r} + \theta' \cdot \mathbf{r}' + \theta'' \cdot \mathbf{r}''} n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j) n(\mathbf{r}'', \mathbf{c}_k) \rangle. \end{aligned} \quad (4.23)$$

El último acoplo es no nulo si la suma de los tres vectores θ , θ' y θ'' es igual a cero. Sin embargo, incluso este caso es nulo, debido a argumentos de simetría. Por tanto el único término que sobrevive es el producto con \mathbf{P} y H_θ :

$$\langle \mathbf{J}_\theta \rangle_{\gamma, \xi} = \langle \mathbf{J}_\theta (\gamma \cdot \mathbf{P}) \xi_\theta H_\theta \rangle = \gamma_\mu \hat{\theta}_\nu \hat{\theta}_\beta \xi_\theta \sum_i \mathbf{c}_i c_{i\beta} c_{i\nu} c_{i\mu} \kappa_i^{(3)}. \quad (4.24)$$

Los multiplicadores de Lagrange γ y ξ_θ son proporcionales a $\rho \mathbf{u}$ y $\rho \omega_\theta$, como se puede comprobar a partir de (4.22), y pueden ser reemplazados por ellos. Así, tenemos que:

$$\langle \mathbf{J}_\theta \rangle_{\gamma, \xi} = \left\{ \mathbf{u} + 2\hat{\theta}(\mathbf{u} \cdot \hat{\theta}) \right\} \rho \omega_\theta 2G(\rho), \quad (4.25)$$

con $G(\rho)$ el factor no galileano introducido en la sección 3.2. Señalemos aquí que también este término es anisótropo, por la presencia de $\hat{\theta}$.

Reuniendo las ecuaciones de Euler no lineal, (4.20) con $\langle \mathbf{J}_\theta \rangle_{\gamma, \xi}$ dado por (4.25) y la de Navier–Stokes, (4.13), obtenemos la ecuación de evolución para las cantidades conservadas espúreas h_θ a órdenes $\mathcal{O}(\delta, \nabla^2)$, $\mathcal{O}(\delta^2, \nabla)$:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho \omega_\theta + \nabla \cdot \left\{ [(\mathbf{u} + 2\hat{\theta}(\mathbf{u} \cdot \hat{\theta})) \rho \omega_\theta 2G(\rho)] \right\} \\ = \left\{ D_\perp \nabla_\perp^2 + D_\parallel \nabla_\parallel^2 \right\} \rho \omega_\theta, \end{aligned} \quad (4.26)$$

donde $\nabla_\parallel = \hat{\theta} \cdot \nabla$ y $\nabla_\perp = \hat{\theta}_\perp \cdot \nabla$. La ecuación (4.26) con $\theta = \theta_1, \theta_2, \theta_3$ para las cantidades espúreas ω_θ en los modelos atérmicos FHP de 6 y 7 bits constituyen tres ecuaciones macroscópicas adicionales. Estas ecuaciones son lineales en ω_θ . El término convectivo de orden $\mathcal{O}(\delta^2)$ en $\mathbf{u} \omega_\theta$ acopla estas ecuaciones a las ecuaciones de Navier–Stokes no lineales.

Por último, el término de Euler de la ecuación de evolución del momento, (3.36), también se modifica debido a la presencia de h_θ , puesto que ρ_l cambia. No incluiremos aquí su derivación, que se obtiene siguiendo el método presentado en 3.2 teniendo en cuenta (4.23). El resultado se obtiene cambiando $u_\alpha u_\beta$ por $u_\alpha u_\beta + \hat{\theta}_\alpha \hat{\theta}_\beta \omega_\theta^2$:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{T} \rangle_{\gamma, \xi} &= V \left\{ p_0 - \frac{1}{d} G_1(\rho) \rho \left[\mathbf{u}^2 + \sum_{\theta} \omega_\theta^2 \right] \right\} \\ &+ VG(\rho) \rho \left[\mathbf{u} \mathbf{u} + \sum_{\theta} \hat{\theta} \hat{\theta} \omega_\theta^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Esta ecuación contiene junto con la presión y la convección de momento, $\mathbf{u} \mathbf{u}$, un término (no isótropo) que depende sólo de las cantidades ω_θ .

La inspección de la ecuación de evolución de las cantidades conservadas espúreas, (4.26), muestra que no hay producción de ω_θ a no ser que se introduzca en el dato inicial: si $\omega_\theta(\mathbf{r}, 0) = 0$, resulta que $\omega_\theta(\mathbf{r}, t) = 0, \forall t$. Además, si insertamos esta solución, $\omega_\theta(\mathbf{r}, t) = 0$, en (4.27), restauramos el tensor de flujo de momento $\langle \mathbf{T} \rangle$ a su expresión original (3.36) como si no hubiera cantidades conservadas espúreas. En este caso las soluciones de las ecuaciones hidrodinámicas de gases de red lo son también de las ecuaciones de Navier–Stokes de fluidos continuos. Por tanto, si las densidades conservadas espúreas no están presentes en las condiciones iniciales, es posible utilizar los gases de red para obtener soluciones de las ecuaciones de Navier–Stokes. Este es el mecanismo utilizado en las simulaciones numéricas. Sin embargo, pueden tomarse condiciones iniciales ‘patológicas’ de tal forma que el campo de velocidades obtenido sea completamente diferente al real [Zanetti 89]. La forma de minimizar el efecto de los invariantes espúreos en las ecuaciones de evolución es utilizar colectividades con el multiplicador de Lagrange asociado, ξ_θ igual a cero. Aun así, hay funciones que “recuerdan” la existencia de modos espúreos, como son las funciones de correlación. El comportamiento a tiempos largos de dichas funciones se obtiene usualmente con la teoría del acoplamiento de los modos [Ernst *et al* 71]. La idea fundamental es que a largos tiempos, las funciones de correlación decrecen acoplándose a pares de modos. Cada par de modos aporta un decaimiento proporcional a $t^{-d/2}$. Los modos de viscosidad y sonoros dan, respectivamente, $1/\nu t^{d/2}$ y $1/\Gamma t^{d/2}$. La existencia de los modos espúreos contribuye con $1/t \sqrt{D_\perp D_\parallel}$ en sistemas bidimensionales [Naitoh *et al* 90, Ernst 91b].

Se han propuesto varios métodos sistemáticos para la determinación de las cantidades conservadas. Algunos [d’Humières *et al* 89] generan la evolución global del gas de red y buscan sus invariantes mientras que otros

buscan los puntos fijos del operador de evolución [Zanetti 91]. La aplicación de ambos al modelo FHP ha dado únicamente los invariantes: el número de partículas, el momento y las cantidades espúreas aquí presentadas.

La estructura de los invariantes espúreas presentada es bastante general: un factor $(-1)^{\theta \cdot r + t}$ más un invariante de colisión. Ello hace que estén presentes en todos los modelos de la sección 2. En el modelo FCHC aparecen 12 invariantes espúreas de tipo momento ($\theta_n \cdot c_i$), como los de la ecuación (4.5), con $2\pi\theta_n$ ($n = 1, 2, \dots, 12$) los vectores a los próximos vecinos de la red recíproca de la red FCHC. En el modelo de 9 bits hay sólo dos invariantes, de tipo momento, con vectores (0,1) y (1,0). Por último, el modelo de 8 bits es el que presenta mayor riqueza. Hay 6 cantidades conservadas, asociadas con (0,1), (1,0) y (1,1), de tipo momento y número de partículas, acoplándose entre ellas para dar modos propagantes. El último modelo, junto con el HPP no se utilizan en la práctica, por estar demasiado lejos de los fluidos reales. Todo el análisis del presente capítulo se aplica a los modelos FCHC y 9 bits con modificaciones triviales.

En cuanto a la eliminación de cantidades conservadas espúreas, puede hacerse introduciendo en el modelo partículas con velocidades mayores que 1; esto es, que saltan dentro de la misma subred en la figura 4.1b. El paso de propagación, descrito bajo la ecuación (4.1), rompe la conservación del tipo (4.2) y los invariantes espúreas desaparecen. Ello se ha hecho en el modelo FHP introduciendo partículas que saltan a los nuevos próximos $|c| = \sqrt{3}$ y a los siguientes nuevos próximos vecinos, $|c| = 2$ [Grosfils *et al* 92].

Para finalizar, y como resumen de este capítulo, diremos que aunque en los gases de red existen invariantes espúreas sin análogo físico, el comportamiento macroscópico de los gases de red es igual al de los fluidos continuos, siempre que se tomen condiciones iniciales apropiadas, como ha sido comprobado extensamente en las simulaciones numéricas [Doolen 90].

II

Teoría cinética

Ila
Teoría de Boltzmann

5

Aproximación de Boltzmann

5.1 Introducción

Para gases diluidos la ecuación de Boltzmann proporciona la base fundamental para la descripción cinética de las propiedades de no equilibrio del sistema. Es una ecuación que describe la evolución de la función de distribución de una partícula, $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ en un gas diluido, donde sólo ocurren colisiones binarias. Esta función describe el número medio de moléculas en la posición \mathbf{r} con velocidad \mathbf{v} en el tiempo t . Los cambios en $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ se producen debido a dos mecanismos, el movimiento libre y las colisiones entre partículas. Si el gas es lo suficientemente diluido estos mecanismos están claramente diferenciados y contribuyen aditivamente a la evolución de f_1 , dando lugar a la ecuación de Boltzmann. La ecuación de Boltzmann es una ecuación integrodiferencial muy compleja, y sólo soluciones en casos muy particulares se conocen. En el estado de equilibrio global su solución $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ se factoriza en posiciones y velocidades, dando $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)|_{\text{eq}} = \rho\varphi(\mathbf{v})$, donde $\varphi(\mathbf{v})$ es la distribución maxwelliana de velocidades, $(2\pi mk_B T)^{-d/2} \exp(-m\mathbf{v}^2/2k_B T)$. En estados de no equilibrio, la función $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ relaja a la distribución de equilibrio, como prueba el teorema H.

En la derivación de la ecuación de Boltzmann se admite el *stosszahlansatz* o *hipótesis del caos molecular*, que supone la ausencia total de correlaciones (tanto en posiciones como en velocidades) para dos partículas que van a colisionar. En otras palabras, las moléculas que intervienen en una colisión no han colisionado nunca ni lo harán en el futuro. Si designamos por $f_2(\mathbf{r}\mathbf{r}', \mathbf{v}\mathbf{v}', t)$ el número medio de pares de moléculas, una de las cuales está en $\{\mathbf{r}, \mathbf{v}\}$ mientras que la otra está en $\{\mathbf{r}', \mathbf{v}'\}$, la hipótesis de Boltzmann (o de campo medio) consiste en la igualdad a todo tiempo:

$$f_2(\mathbf{r}\mathbf{r}', \mathbf{v}\mathbf{v}', t) = f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)f_1(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t). \quad (5.1)$$

Mientras que f_2 contiene las correlaciones entre las moléculas en distintas posiciones y velocidades, el producto $f_1 f_1$ las ha suprimido por completo, porque en el último caso la probabilidad de encontrar partículas en $\{\mathbf{r}, \mathbf{v}\}$ y $\{\mathbf{r}', \mathbf{v}'\}$ está dada por el producto de las probabilidades individuales: los sucesos son estadísticamente independientes. Uno de los objetivos de la teoría cinética es el desarrollo de una aproximación que tenga en cuenta las correlaciones que existen en fluidos a densidades medias y altas que no están incluidas en la aproximación de Boltzmann.

La hipótesis del caos molecular es la aproximación más drástica que se hace en la derivación de la ecuación de Boltzmann [Balescu 75] porque el término de colisión en dicha ecuación, denotado por $J(f_1, f_1)$, se escribe únicamente en función de productos $f_1 f_1$:

$$J(f_1, f_1) = \int d\mathbf{c}_2 \int d\Omega \sigma(\mathbf{c}_{12} \rightarrow \mathbf{c}_{12}^*) |\mathbf{c}_{12}| \{f_1(\mathbf{c}_1^*) f_1(\mathbf{c}_2^*) - f_1(\mathbf{c}_1) f_1(\mathbf{c}_2)\}, \quad (5.2)$$

cuando lo que debía aparecer es la función f_2 (en esta ecuación, las velocidades con asterisco denotan las velocidades después de la colisión). Como consecuencia, las colisiones correlacionadas no están incluidas en la ecuación de Boltzmann y por tanto no es un punto de partida adecuado cuando se quieren estudiar propiedades del sistema en las que las correlaciones juegan un papel fundamental, como el comportamiento a largos tiempos de las funciones de correlación. Como ya se ha apuntado, las correlaciones que hacen que $f_2 \neq f_1 f_1$ vienen provocadas por colisiones previas de las partículas directamente o por colisiones indirectas mediadas por otras partículas, en resumen, encuentros previos de las moléculas.

¿Cómo se implementa la aproximación de Boltzmann en los gases de red? En este caso la función de distribución en el espacio de las fases $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ viene dada por:

$$f_1(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) = \langle n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \rangle_{ne} \quad (5.3)$$

con el promedio tomado sobre una distribución de no equilibrio. La ecuación de evolución microscópica, descrita en (2.5) se promedia con $\langle \cdot \rangle_{ne}$ para dar:

$$f_1(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t + 1) = f_1(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) + \langle I(\mathbf{c}_i | n) \rangle_{ne}. \quad (5.4)$$

En $\langle I(\mathbf{c}_i | n) \rangle_{ne}$ aparecen promedios de dos, tres, ..., b números de ocupación, debido a la forma polinómica del operador de colisión $I(\mathbf{c}_i | n)$, (2.26). Esto es, en el promedio del operador de colisión aparecen las funciones de distribución f_2, f_3, \dots, f_b . De hecho, la ecuación (5.4) es la primera ecuación de

una jerarquía para los gases de red similar a la BBGKY. Expresa la evolución de f_1 en términos de las funciones de distribución superiores, f_2, f_3, \dots, f_b , y, por tanto no es una ecuación cerrada para la función f_1 . La aproximación de Boltzmann permite escribir las funciones de distribución de p partículas como producto de p funciones de distribución de una partícula:

$$\langle n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \cdots n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j, t) \rangle_{ne} = \langle n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \rangle_{ne} \cdots \langle n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j, t) \rangle_{ne}. \quad (5.5)$$

El efecto de esta aproximación en el operador de colisión es:

$$\langle I(\mathbf{c}_i | n) \rangle_{ne} = I(\mathbf{c}_i | \langle n \rangle_{ne}), \quad (5.6)$$

esto es, obtenemos una ecuación cerrada no lineal para la función de distribución de una partícula:

$$f_1(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t + 1) = f_1(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) + I(\mathbf{c}_i | f_1), \quad (5.7)$$

que es la llamada *ecuación de Boltzmann de red*.

5.2 Ecuación de Boltzmann de red

En el desarrollo de la hidrodinámica se pueden seguir dos caminos, que llamaremos ruta A y ruta B que llevan a resultados similares pero que son conceptualmente diferentes. La ruta A es la que seguimos en esta tesis. En ella se parte de la ecuación de Liouville y se aplica el formalismo desarrollado en el capítulo 3 u otro similar para llegar a las ecuaciones de Navier-Stokes y las fórmulas de Green-Kubo, tal como se expuso en la sección 3.3, desarrollo que es exacto en el marco de la teoría de la respuesta lineal. Posteriormente, y con las fórmulas de Green-Kubo como elemento básico, se utilizan diferentes aproximaciones. Una de ellas es la aproximación de Boltzmann (colisiones descorrelacionadas) presentada en la sección anterior, que será desarrollada a lo largo de la parte IIa de esta tesis y que nos permitirá obtener explícitamente de manera sencilla los coeficientes de transporte (capítulo 6), ν_B, ζ_B, D_B .

Un primer intento para mejorar la ecuación de Boltzmann en los fluidos continuos y en gases de red es tener en cuenta un conjunto de colisiones correlacionadas, las llamadas *colisiones de anillo*. En la teoría de gases continuos moderadamente densos se ha mostrado [Dorfman y van Beijeren 77] que las colisiones de anillo son las únicas responsables de las correcciones $\mathcal{O}(\rho)$ a los resultados de Boltzmann de baja densidad. El uso de la ecuación de Boltzmann así como la ecuación de anillo a densidades *finitas* es una

aproximación *ad hoc* que puede ser justificada sólo a posteriori por los resultados obtenidos en la parte IIa a partir de la ecuación de Boltzmann y en la parte IIb por aquellos obtenidos por la ecuación de anillo. La teoría cinética de anillo incluye no sólo las colisiones descorrelacionadas sino las colisiones correlacionadas más sencillas. Esta teoría también se desarrollará tomando como base las fórmulas de Green-Kubo.

La ruta B parte también de la ecuación de Liouville como punto fundamental, pero sobre ella se realizan las diferentes aproximaciones. En particular, la misma aproximación de Boltzmann de la ruta A, cuando se aplica primeramente sobre la ecuación de evolución, nos lleva a la ecuación de Boltzmann de red, (5.7). A esta ecuación se puede aplicar un formalismo multiescala tipo Chapman-Enskog para derivar las ecuaciones de Navier-Stokes y los coeficientes de transporte en la aproximación de Boltzmann. Ambos coinciden con los obtenidos siguiendo la ruta A en la aproximación de Boltzmann. La ruta B es la seguida por la mayoría de los autores. Ecuaciones cinéticas generalizadas, que serían el análogo de la teoría cinética de anillo en la ruta A, no han sido desarrolladas todavía para gases de red. Consecuentemente, hasta el presente las explicaciones cualitativas y cuantitativas del comportamiento a tiempos largos y las correcciones a los coeficientes de transporte de Boltzmann se han obtenido únicamente a través de la ruta A.

La ventaja de la ruta A es que permite obtener propiedades que son *independientes* de la aproximación de Boltzmann. Por ejemplo, la forma de las ecuaciones de Navier-Stokes, los factores no galileanos, las partes propagantes de los coeficientes de transporte los invariantes espúreos han sido obtenidos *sin* la aproximación de Boltzmann.

En resumen, tanto la ruta A como la B consideran la ecuación de Boltzmann de red (5.7) como una primera aproximación dentro de una teoría mucho más general. Sin embargo, un desarrollo diferente ha ocurrido, al que llamaremos *simular la ecuación de Boltzmann*. En este formalismo uno no se preocupa por la existencia de un modelo microscópico subyacente siempre que la ecuación de Boltzmann de red dé las ecuaciones de Navier-Stokes en los límites apropiados. En esta línea, la ecuación de Boltzmann de red es por definición exacta. Así pues no existen correcciones a los coeficientes de transporte debido a las colisiones correlacionadas, ni tampoco el decaimiento algebraico de las funciones de correlación.

El método de simular la ecuación de Boltzmann ha sido seguida por varios grupos de autores para la simulación de las ecuaciones de fluidos no lineales [Higuera *et al*, McNamara y Zanetti 88, Succi *et al*]. Aquí no se está

interesado en describir la historia de cada partícula individualmente, sino el promedio de los números de ocupación donde toda la información concerniente a correlaciones se ha eliminado, en contraposición al tratamiento hecho en el capítulo 3. En el presente contexto, se sustituye la descripción de los gases de red en términos de variables booleanas $n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ por una descripción en términos de variables reales sobre el intervalo $[0,1]$, $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$.

Desde un punto de vista computacional, al ser f_1 una función real sobre el intervalo $[0,1]$, se pierde la descripción booleana tan conveniente en la simulación numérica, pasándose al cálculo en coma flotante, más lento en cada operación y con posibilidad de errores de redondeo. Además, almacenar las poblaciones booleanas economiza memoria en comparación con las funciones f_1 , puesto que cada variable booleana ocupa 1 bit mientras que cada f_1 ocupa 32 bits en precisión sencilla. Por el contrario, la simulación con la ecuación de Boltzmann discreta lleva implícito un promedio automáticamente, mientras que con variables booleanas hay que tomar un promedio estadístico posterior, para pasar de las variables $\{0,1\}$ a la función continua $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$, lo que conlleva sucesivas simulaciones con diferentes condiciones iniciales con la consecuente ralentización. Un análisis de la eficiencia numérica de los gases de red frente a la ecuación de Boltzmann discreta se ha presentado en [McNamara y Zanetti 88], donde se llega a la conclusión de que existe un número de Reynolds, Re_s , tal que para números de Reynolds menores que Re_s , la ecuación de Boltzmann discreta es más eficiente que los gases de red, y viceversa. Para números de Reynolds mucho mayores que Re_s y en geometrías simples los métodos tradicionales son, sin embargo, los dominantes.

5.3 Propagador cinético

Volvamos en esta sección al formalismo desarrollado en el capítulo 3, a la ruta A descrita en la sección anterior, en particular a las fórmulas de Green-Kubo. En ellas la función fundamental es la correlación en el equilibrio de los números de ocupación a diferentes tiempos:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}(\mathbf{r}, t)\kappa_j &\equiv \langle \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \delta n(0, \mathbf{c}_j, 0) \rangle_{\text{eq}} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{r}'} \langle \delta n(\mathbf{r}' + \mathbf{r}, \mathbf{c}_j, 0) \delta n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j, 0) \rangle_{\text{eq}} \end{aligned} \quad (5.8)$$

donde hemos utilizado la invariancia bajo traslaciones para escribir la segunda igualdad. Llamaremos a Γ *propagador cinético*. Los coeficientes de

transporte se escriben en función de Γ_{ij} a través de las fórmulas de Green-Kubo, ecuaciones (3.81):

$$\begin{aligned}\eta &= \frac{\rho}{\chi} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{\tau=0}^t \sum_{\mathbf{r}} c_{ix} c_{iy} \left[\Gamma_{ij}(\mathbf{r}, \tau) - \frac{1}{2} \delta_{ij} \right] c_{jx} c_{jy} \kappa_j \\ \zeta &= \frac{\rho}{\chi} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{\tau=0}^t \sum_{\mathbf{r}} \left(\frac{1}{d} c_i^2 - c_0^2 \right) \left[\Gamma_{ij}(\mathbf{r}, \tau) - \frac{1}{2} \delta_{ij} \right] \left(\frac{1}{d} c_j^2 - c_0^2 \right) \kappa_j, \quad (5.9)\end{aligned}$$

donde c_0 es la velocidad del sonido, y $\chi = \sum_j \kappa_j c_{jx}^2$, con $\kappa_j = f_j(1-f)_j$. En modelos atórmicos, como los considerados aquí, $\kappa_j = \kappa = f(1-f)$ y $\chi = \kappa b c_0^2$. Por tanto, los factores κ se cancelan en el numerador y denominador de (5.9). Igualmente la función de correlación densidad-densidad, o función de Van Hove, que aparece como ingrediente fundamental en la teoría de Landau-Placzek (sección 7.3) se escribe en términos del propagador cinético. También la teoría cinética de anillo (part IIb de esta memoria) se hará en base al propagador cinético.

Veamos cuál es el efecto de la aproximación de Boltzmann en el propagador cinético. Consideremos de nuevo la ecuación de evolución para las variables booleanas (2.5), en particular el operador de colisión $I(\mathbf{c}_i | n)$. Podemos hacer un desarrollo en función de las fluctuaciones en los números de ocupación, definidos en (3.9) como:

$$I(\mathbf{c}_i | n) = \sum_{\lambda=1}^b \frac{1}{\lambda!} \Omega_{i_1 \dots i_\lambda}^{(\lambda)} \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_{i_1}, t) \cdots \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_{i_\lambda}, t), \quad (5.10)$$

que define los coeficientes $\Omega^{(\lambda)}$ y donde se ha utilizado la relación de equilibrio $I(\mathbf{c}_i | \langle n \rangle_{\text{eq}}) = 0$. Los coeficientes $\Omega^{(\lambda)}$ se pueden reescribir como:

$$\Omega_{i_1 \dots i_\lambda}^{(\lambda)} = \left(\frac{\partial^\lambda I(\mathbf{c}_i | n)}{\partial n_{i_1} \cdots \partial n_{i_\lambda}} \right)_{n_j = \langle n \rangle_{\text{eq}}}, \quad (5.11)$$

donde n_i denota $n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$. Las leyes de conservación (2.6) se escriben en función de $\Omega^{(\lambda)}$ como:

$$\sum_i \Omega_{i_1 \dots i_\lambda}^{(\lambda)} = 0, \quad \sum_i \mathbf{c}_i \Omega_{i_1 \dots i_\lambda}^{(\lambda)} = 0, \quad \lambda = 1, 2, \dots, b. \quad (5.12)$$

Si insertamos la ecuación de evolución de los números de ocupación $n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$, definida en (2.5), con el operador de colisión escrito como (5.10), obtenemos la expresión *exacta* para el número de ocupación $\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ expresado como una suma de productos de $\delta n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_k, 0)$. Su forma concreta es muy compleja y no relevante para la discusión que nos ocupa. La escribimos como:

$$\sum_{\lambda_1 \dots \lambda_k} \Omega^{(\lambda_1)} \dots \Omega^{(\lambda_k)} \{ \delta n_1 \dots \delta n_l \}. \quad (5.13)$$

El número de factores δn dentro del paréntesis, l , varía desde 1 hasta b^l y todos están evaluados en $t = 0$. El mecanismo por el cual aparecen correlaciones tiene lugar cuando en la expresión (5.13) hay dos o más números de ocupación con las mismas variables $\{\mathbf{r}, \mathbf{c}_i\}$. De acuerdo con la ecuación (5.8) esta expresión debe ser multiplicada por $\delta n(\mathbf{r}', \bar{\mathbf{c}}_j)$ y promediada sobre una colectividad de equilibrio. Los términos en (5.13) lineales en δn dan una contribución no nula, porque al contraer con $\delta n(\mathbf{r}', \bar{\mathbf{c}}_j)$ dan: $\sum \langle \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \delta n(\mathbf{r}', \bar{\mathbf{c}}_j) \rangle = \sum \kappa_j \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \neq 0$. Para obtener una contribución no nula de un término no lineal como $\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \delta n_j(\mathbf{r}' \mathbf{c}_k)$, las condiciones $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ y $\mathbf{c}_i = \mathbf{c}_k$ deben ser satisfechas, para que al contraer con $\delta n(\mathbf{r}', \bar{\mathbf{c}}_j)$ y sumar sobre \mathbf{r}' dé una contribución no nula, de acuerdo con (3.10). Las igualdades $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ y $\mathbf{c}_i = \mathbf{c}_k$ implican que una colisión correlacionada ha debido ocurrir. Tales colisiones han sido ignoradas en la ecuación de Boltzmann, y no van a aparecer en la teoría cinética al nivel de Boltzmann. Por tanto, los únicos términos que sobreviven en (5.13) son los lineales en δn . Si volvemos a la expresión (5.10) vemos que los términos con un único δn sólo pueden provenir de $\Omega^{(1)}$ y la parte de propagación libre. Por tanto, la aproximación de Boltzmann en las funciones de correlación se obtiene formalmente partiendo de la ecuación de evolución:

$$\begin{aligned} \delta n(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t + 1) &= \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) + \Omega_{ij}^{(1)} \delta \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_j, t) \\ &= (\mathbf{1} + \Omega^{(1)})_{ij} \delta \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_j, t), \end{aligned} \quad (5.14)$$

que no es más que la ecuación de evolución (2.5) linealizada alrededor del estado de equilibrio $\langle n \rangle = f$. Por tanto, la aproximación de Boltzmann en el propagador cinético se obtiene suponiendo una evolución lineal de los números de ocupación.

5.4 Operador de colisión linealizado

Esta sección está dedicada al cálculo de los operadores de colisión $\Omega^{(\lambda)}$ en función de las probabilidades de transición $A(s \rightarrow \sigma)$ definidas en la sección 2.6. Para ello, recordemos la definición del operador de colisión no lineal en función de la matriz $A(s \rightarrow \sigma)$ (ecuación (2.26)):

$$I(\mathbf{c}_i | n) = \sum_{\sigma, s} (\sigma_i - s_i) A(s \rightarrow \sigma) \prod_{j=1}^b n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1-s_j}, \quad (5.15)$$

donde n_j denota $n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_j, t)$. Los coeficientes $\Omega^{(\lambda)}$ se obtienen desarrollando el operador de colisión en potencias de $\delta n_i = n_i - f$, según la ecuación (5.10). Puesto que s_i es una variable booleana, se verifica la siguiente identidad:

$$n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1-s_j} = f^{s_j} (1 - f)^{1-s_j} \left\{ 1 + \frac{\delta s_j \delta n_j}{\kappa} \right\}, \quad (5.16)$$

con $\kappa = f(1 - f)$. Llevando esta identidad a la expresión de $I(\mathbf{c}_i | n)$ (5.15), obtenemos:

$$I(\mathbf{c}_i | n) = \sum_{\sigma, s} (\sigma_i - s_i) A(s \rightarrow \sigma) f^{\rho(s)} (1 - f)^{b-\rho(s)} \prod_{j=1}^b \left\{ 1 + \frac{\delta s_j \delta n_j}{\kappa} \right\}, \quad (5.17)$$

con $\rho(s) = \sum_i s_i$ el número de partículas del estado s . El desarrollo del producto en (5.17) nos da una suma de productos en las variables δn_j , cuya identificación con (5.10) permite obtener los coeficientes $\Omega^{(\lambda)}$ según:

$$\begin{aligned} \Omega_{ij} = \Omega_{ij}^{(1)} &= \frac{1}{\kappa} \sum_{\sigma s} (\delta \sigma_i - \delta s_i) A(s \rightarrow \sigma) f^{\rho(s)} (1 - f)^{b-\rho(s)} \delta s_j \\ &= -\delta_{ij} + \frac{1}{\kappa} \sum_{\sigma s} \delta \sigma_i A(s \rightarrow \sigma) f^{\rho(s)} (1 - f)^{b-\rho(s)} \delta s_j \\ \Omega_{ij_1 \dots j_\lambda}^{(\lambda)} &= \frac{1}{\kappa^\lambda} \sum_{\sigma s} \delta \sigma_i A(s \rightarrow \sigma) f^{\rho(s)} (1 - f)^{b-\rho(s)} \delta s_{j_1} \delta s_{j_2} \dots \delta s_{j_\lambda}, \end{aligned} \quad (5.18)$$

y donde se ha utilizado la relación:

$$\sum_s \delta s_i \delta s_j f^{\rho(s)} (1 - f)^{b-\rho(s)} = \langle \delta n_i \delta n_j \rangle = \kappa \delta_{ij}. \quad (5.19)$$

En la segunda igualdad de la ecuación (5.18) hemos utilizado la condición de normalización (2.13), $\sum_\sigma A(s \rightarrow \sigma) = 1$.

Hemos obtenido también las expresiones para $\Omega^{(\lambda)}$ con $\lambda \geq 2$ porque, aunque no intervienen en la aproximación de Boltzmann, serán utilizadas en la parte IIb de esta memoria, cuando se desarrolle una teoría cinética para los gases de red más allá de la aproximación de Boltzmann.

6

Coeficientes de transporte en la aproximación de Boltzmann

El objetivo de este capítulo es doble: de un lado pretendemos obtener una expresión para el propagador cinético, definido en (5.8), que será utilizado con frecuencia en el resto de esta tesis, y por otro lado queremos evaluar las fórmulas de Green-Kubo para los coeficientes de transporte, tanto los físicos (viscosidades, ecuaciones (3.81)), como los no físicos (ecuación (4.14)). Todo ello lo haremos en la aproximación de Boltzmann y en la que, debido a que se ignoran las colisiones correlacionadas, la evolución pasa a ser descrita por una ecuación *lineal* en los números de ocupación, en lugar de por un polinomio de grado b^t como sucede con la evolución exacta. Dicha linealidad permite obtener expresiones simples tanto para el propagador cinético como para los coeficientes de transporte. En la literatura, prácticamente todo el desarrollo analítico de las ecuaciones de evolución y de los coeficientes de transporte se ha realizado en esta aproximación, salvo contadas excepciones [Taylor y Boghosian 91, Kirkpatrick y Ernst 91].

6.1 Propagador cinético en la aproximación de Boltzmann

Como ya hemos señalado, el propagador cinético juega un papel fundamental dentro de la teoría cinética. Nos da los coeficientes de transporte, (5.9), y sobre él desarrollaremos la teoría cinética incluyendo colisiones correlacionadas (parte IIb). El propagador se escribe como

$$\Gamma_{ij}(\mathbf{r}, t)\kappa_j = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{r}'} \langle \delta n(\mathbf{r} + \mathbf{r}', \mathbf{c}_i, t) \delta n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j, 0) \rangle_{\text{eq}} \quad (6.1)$$

esto es, es la función de correlación de los números de ocupación en diferentes tiempos y posiciones. Describe como, tras t pasos de tiempo, la población en el nodo $\mathbf{r}' + \mathbf{r}$ con velocidad i está influida por partículas en el nodo \mathbf{r}' con velocidad j . Cuando Γ_{ij} es positivo, la presencia (ausencia) de partículas en $\{\mathbf{r}', j\}$ incrementa (disminuye) la población en $\{\mathbf{r} + \mathbf{r}', i\}$ después de t pasos temporales. Γ_{ij} negativo significa que un incremento del número de partículas en $\{\mathbf{r}', j\}$ disminuye el número en $\{\mathbf{r}' + \mathbf{r}, i\}$ y viceversa. El factor $\kappa_j = f_j(1 - f_j)$ hace que a $t = 0$ es propagador esté normalizado a

$$\Gamma_{ij}(\mathbf{r}, 0) = \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}, 0), \quad (6.2)$$

donde hemos utilizado las propiedades de equilibrio de los números de ocupación, ecuaciones (3.10).

A la vista de la expresión de las viscosidades en función del propagador cinético, (5.9), donde aparece una suma sobre t y sobre \mathbf{r} , parece conveniente trabajar en transformada de Fourier para la variable \mathbf{r} y de Laplace para t , y definir

$$\tilde{\Gamma}_{ij}(\mathbf{k}, z) = \sum_{t=0}^{\infty} e^{-zt} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Gamma_{ij}(\mathbf{r}, t), \quad (6.3)$$

con lo que las viscosidades se escriben como límites de $\tilde{\Gamma}_{ij}(\mathbf{k}, z)$ cuando z y \mathbf{k} tienden a cero¹. Empleando (6.1) y la definición del producto escalar $\langle \cdot | \cdot \rangle$ (3.49), podemos escribir

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{ij}(\mathbf{k}, z)\kappa_j &= \sum_{t=0}^{\infty} e^{-zt} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{V} \langle \delta n(\mathbf{r} + \mathbf{r}', \mathbf{c}_i, t) \delta n(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j, 0) \rangle_{\text{eq}} \\ &= \langle \tilde{n}(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, z) | n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_j, 0) \rangle, \end{aligned} \quad (6.4)$$

donde $\tilde{n}(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, z)$ denota la transformada de Fourier y Laplace de los números de ocupación $\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$ que pasamos a obtener ahora. Escribamos la ecuación de evolución de los números de ocupación en la aproximación de Boltzmann como (5.14):

$$\delta n(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t + 1) = (\mathbf{1} + \Omega)_{ij} \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_j, t). \quad (6.5)$$

¹En aproximación de Boltzmann dichos límites existen. Sin embargo, un desarrollo exacto [Frenkel y Ernst] predice un decaimiento de Γ como $t^{-d/2}$, y para dimensión $d \leq 2$, $\tilde{\Gamma}_{ij}(\mathbf{k}, z = 0) \rightarrow \infty$, mostrando la *inexistencia* de la hidrodinámica en dos dimensiones. Volveremos sobre este punto posteriormente

Transformando Fourier obtenemos:

$$n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t + 1) = e^{-ik \cdot \mathbf{c}_i} (\mathbf{1} + \Omega)_{ij} n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_j, t). \quad (6.6)$$

El factor $e^{-ik \cdot \mathbf{c}_i}$ no es más que el inverso de la transformada de Fourier del operador de traslación S_i , definido en (2.4) y que desplaza el argumento \mathbf{r} a $\mathbf{r} + \mathbf{c}_i$. Podemos ahora iterar la ecuación (6.6) t veces para obtener la solución:

$$n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t) = \left[e^{-ik \cdot \mathbf{c}} (\mathbf{1} + \Omega) \right]_{ij}^t n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_j, 0), \quad (6.7)$$

donde hemos considerado $e^{-ik \cdot \mathbf{c}}$ como una matriz diagonal con elementos

$$\left(e^{-ik \cdot \mathbf{c}} \right)_{ij} = e^{-ik \cdot \mathbf{c}_i} \delta_{ij}. \quad (6.8)$$

Realizamos ahora la transformada de Laplace de la ecuación (6.7):

$$\begin{aligned} \tilde{n}(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, z) &= \sum_{t=0}^{\infty} e^{-zt} n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t) = \sum_{t=0}^{\infty} \left[e^{-ik \cdot \mathbf{c} - z} (\mathbf{1} + \Omega) \right]_{ij}^t n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_j, 0) \\ &= \left(\frac{1}{e^{ik \cdot \mathbf{c} + z} - \mathbf{1} - \Omega} e^{ik \cdot \mathbf{c} + z} \right)_{ij} n(\mathbf{k}, \mathbf{c}_j, 0). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Por último, insertamos esta expresión en la ecuación (6.4) para obtener:

$$\tilde{\Gamma}(\mathbf{k}, z) = \left(\frac{1}{e^{ik \cdot \mathbf{c} + z} - \mathbf{1} - \Omega} e^{ik \cdot \mathbf{c} + z} \right). \quad (6.10)$$

Esta es la expresión para el propagador cinético en la aproximación de Boltzmann. El término $e^{ik \cdot \mathbf{c} + z} - \mathbf{1}$ proviene de la parte de evolución libre, mientras que la contribución de las colisiones se encuentra en la matriz Ω . Como podemos observar en (6.7) es la aproximación de Boltzmann la que nos permite resolver la ecuación de evolución por su carácter lineal y, como consecuencia, hemos encontrado una expresión sencilla y cerrada para el propagador cinético. En la parte IIb veremos que la ecuación (6.10) es el primer término de un desarrollo más complejo.

Los coeficientes de transporte, en particular las viscosidades, se obtienen en función del propagador cinético en el límite $\mathbf{k} \rightarrow 0$, $z \rightarrow 0$, ecuaciones (5.9). En este caso, y puesto que $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \lim_{z \rightarrow 0} e^{ik \cdot \mathbf{c} + z} = \mathbf{1}$, resulta una expresión particularmente simple para $\tilde{\Gamma}$:

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \lim_{z \rightarrow 0} \tilde{\Gamma}(\mathbf{k}, z) = -\frac{1}{\Omega}. \quad (6.11)$$

En este límite la expresión para la matriz de Navier-Stokes A (3.72) resulta ser:

$$A_{mn} = - \sum_s \tilde{\gamma}^m \left(\frac{1}{\Omega} + \frac{1}{2} \right) \kappa \tilde{\gamma}^s (\chi^{-1})_{sn}. \quad (6.12)$$

Las etiquetas $\{m, n, s, \dots\}$ denotan el conjunto (ρ, l, t) , según se definió en (3.77), y $\tilde{\gamma}^n$ y χ_{mn} son corrientes y susceptibilidades, definidas en (3.73) y (3.75) respectivamente. Además, hemos introducido las matrices $b \times b$ $M = \{M_{ij}, i, j = 1, 2, \dots, b\}$ (por ejemplo, Ω_{ij} y $\kappa_{ij} = \kappa_i \delta_{ij}$), b -vectores $A = \{A_i\} = \{A(\mathbf{c}_i)\}$ (por ejemplo $\tilde{\gamma}_i^m = \tilde{\gamma}^m(\mathbf{c}_i)$) y el producto escalar real $AB = \sum_i A_i B_i$ y $AMB = \sum_{ij} A_i M_{ij} B_j$. Esta notación será utilizada extensamente en los siguientes capítulos. El resto de este capítulo estará dedicado a la evaluación de (6.12).

6.2 Diagonalización del operador de colisión linealizado

Como se ve en la ecuación (6.12) el cálculo de los coeficientes de transporte en la aproximación de Boltzmann requiere la inversión del operador de colisión linealizado. Un problema equivalente al de la inversión de una matriz es su diagonalización, esto es, encontrar una base de vectores propios con sus valores propios asociados. En esta sección construiremos dicha base de autovectores de Ω y veremos que es *independiente* de las reglas de colisión utilizadas, siempre que éstas sean invariantes bajo el grupo de simetría de la red.

A partir de ahora y hasta el final de esta memoria nos restringiremos a modelos atómicos, aunque todos los resultados se pueden extender a modelos térmicos sin mucha dificultad. Ilustraremos las propiedades de simetría de Ω y en particular el mecanismo de diagonalización para el modelo FHP de siete bits, con las etiquetas de los canales como se ven en la figura 4.1 y con la partícula en reposo etiquetada con el número 7. Primeramente, supongamos que las reglas de colisión satisfacen el *principio de balance detallado*,

$$A(s \rightarrow \sigma) = A(\sigma \rightarrow s) \quad (6.13)$$

que implica que la probabilidad de transición entre una configuración y otra es igual a la probabilidad inversa. Entonces, se sigue inmediatamente de (5.18) que Ω es una matriz simétrica. Además, incluso si el modelo no verifica el principio de balance detallado, los coeficientes $\Omega_{i_1 \dots i_\lambda}^{(\lambda)}$ son simétricos en los índices $i_1 \dots i_\lambda$.

En el caso que nos ocupa, FHP, las operaciones de simetría, Σ , son las soportadas por la red triangular: rotaciones de ángulo $\pi/3$, denotadas $R_{\pi/3}$, y reflexiones alrededor de los ejes X e Y , R_x , R_y . Consideremos por el momento sólo las partículas en movimiento. Si interpretamos Ω_{ij} como una cantidad proporcional a la probabilidad de salto entre los canales i y j , como consecuencia inmediata de la simetría de rotación, el elemento $\{ij\}$ de Ω sólo depende del ángulo relativo entre los canales i y j , representado por $i - j$. Por tanto Ω es una matrix *circulante*:

$$\Omega_{ij} = \Omega_{1, j-i} \quad (6.14)$$

con $i - j$ tomado módulo 6. Lo mismo sucede para todos los coeficientes $\Omega^{(\lambda)}$:

$$\Omega_{i_1 \dots i_\lambda}^{(\lambda)} = \Omega_{1, i_1 - i_2, \dots, i_\lambda - i_1}^{(\lambda)} \quad (6.15)$$

Como consecuencia todos los elementos de Ω están dados en cualquiera de sus filas o columnas. Además, la aplicación de la simetría R_x implica que

$$\Omega_{12} = \Omega_{16}, \quad \Omega_{13} = \Omega_{15}. \quad (6.16)$$

La ecuación (6.14), o más generalmente (6.15), no se aplica si uno de los índices presentes se refiere a la partícula en reposo. En tal caso la simetría bajo rotaciones implica que Ω_{7i} es independiente de i (si $i \neq 7$).

Como consecuencia de estas propiedades de simetría el modelo FHP con 7 bits sólo tiene 6 elementos independientes, dados por los pares (77), (17), (11), (12), (13) y (14). Las tres leyes de conservación (5.12) imponen tres ligaduras (la conservación del número de partículas impone dos y la conservación del momento a lo largo de y no impone ninguna), por lo que el número total de elementos independientes se reduce a 3. De forma similar en el modelo FHP con 6 bits hay 2 elementos independientes y en el modelo FCHC sólo 3.

Para encontrar una base de autovectores del operador Ω en el modelo FHP con 7 bits, construiremos previamente una base ortogonal, que probaremos posteriormente que es la base propia de Ω . Denotaremos los vectores de la base por u_i , $i = 1, \dots, b$. Los vectores asociados con las leyes de conservación (5.12) se escriben como:

$$\begin{aligned} u_1 &= \mathbf{1} = (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \\ u_2 &= c_x = \frac{1}{2}(2, 1, -1, -2, -1, 1, 0) \\ u_3 &= c_y = \frac{1}{2}\sqrt{3}(0, 1, 1, 0, -1, -1, 0), \end{aligned} \quad (6.17)$$

que son autovectores de Ω con autovalor nulo en función de (5.12). La forma de completar la base será orthogonalizando los polinomios $c_\alpha c_\beta c_\gamma \dots$, ($\alpha, \beta, \dots = x, y$). El vector u_1 es el único polinomio disponible de grado 0, y u_2 y u_3 de grado 1. Los polinomios de grado 2 son c_x^2 , c_y^2 y $c_x c_y$. De estos tres $c_x c_y$ es ortogonal a u_1 , u_2 , u_3 y a c_x^2 y c_y^2 . Por tanto, asignamos $u_4 = c_x c_y$. Con c_x^2 y c_y^2 construimos dos combinaciones lineales, $u_5 = c_x^2 - c_y^2$, que es ortogonal a los vectores existentes, y $c_x^2 + c_y^2$ que orthogonalizamos restando su proyección sobre los otros vectores (procedimiento de Gram-Schmidt), resultando un vector que etiquetamos² como u_7 , y que vale: $u_7 = \frac{1}{d}c^2 - c_0^2$ con $d = 2$ en estos modelos bidimensionales. El factor $\frac{1}{d}$ lo introducimos para que u_7 sea igual a la corriente de la viscosidad de volumen en modelos atómicos, como se verá en (6.20). Por último, para completar la base, buscamos un polinomio de grado tres ortogonal a los anteriores, que puede ser $u_6 = (4c_x^2 - 3)c_x$, o, escrito de manera más simétrica en c_x y c_y , $u_6 = c_x^3 + c_y^3 - 3c_x^2 c_y - 3c_x c_y^2$. En resumen, la base se compone de los vectores descritos en (6.17) junto con:

$$\begin{aligned}
 u_4 &= c_x c_y &= \frac{1}{4}\sqrt{3}(0, 1, -1, 0, 1, -1, 0) \\
 u_5 &= c_x^2 - c_y^2 &= \frac{1}{2}(2, -1, -1, 2, -1, -1, 0) \\
 u_6 &= (4c_x^2 - 3)c_x &= (1, -1, 1, -1, 1, -1, 0) \\
 u_7 &= \frac{1}{2}c^2 - c_0^2 &= \frac{1}{14}(1, 1, 1, 1, 1, 1, -6).
 \end{aligned} \tag{6.18}$$

Esta base de vectores es asimismo la base propia de Ω . Para probarlo estudiamos como varían los vectores u_i con las operaciones bajo las que Ω es invariante: rotaciones y reflexiones, así que $\Sigma\Omega\Sigma^{-1} = \Omega$. Entonces Ω y Σ conmutan y tienen autovectores comunes. Por ejemplo una reflexión en el eje X , R_x , cambia el signo de c_x , y deja invariantes u_1 , u_3 , u_5 y u_7 , mientras que cambia el signo de u_2 , u_4 y u_6 . El efecto de $R_{\pi/3}$ es un desplazamiento en las componente 1, ..., 6 de los vectores u_i . La actuación de todas las operaciones de simetría se muestra en la tabla 6.1. Los signos + y - indican que los vectores respectivos son autovalores de la operación de simetría con autovalores +1 y -1 respectivamente. La doble flecha indica que los dos vectores implicados forman un subespacio invariante bajo la operación de simetría. Los subespacios propios de Ω están constituidos por vectores con la misma paridad bajo las operaciones de simetría. Ya sabemos que u_1 , u_2 y u_3 son autovectores de Ω con autovalor nulo y por tanto no los consideraremos en la siguiente discusión. Analicemos las reflexiones en en eje Y (primera fila de la tabla 6.1). Los subespacios invariantes son

²Etiquetamos este vector como u_7 porque en el caso de modelos de 6 bits este vector desaparece, quedando la base como $u_1 \dots u_6$

		u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6	u_7
Reflexión Y	R_y	+	-	+	-	+	-	+
Reflexión X	R_x	+	+	-	-	+	+	+
Rotación $\pi/3$	$R_{\pi/3}$	+	\longleftrightarrow		\longleftrightarrow		-	+
Rotación $2\pi/3$	$R_{\pi/3}^2$	+	\longleftrightarrow		\longleftrightarrow		+	+
Rotación π	$R_{\pi/3}^3$	+	-	-	+	+	-	+

Tabla 6.1: Propiedades de simetría de la base de autofunciones de Ω

$\{u_4, u_6\}$ (autovectores de R_y con autovalor -1) y $\{u_5, u_7\}$ (autovalor $+1$). Los subespacios invariantes de R_x (segunda fila de la tabla 6.1) son $\{u_4\}$ y $\{u_5, u_6, u_7\}$. Puesto que R_x, R_y y Ω conmutan, los subespacios $\{u_4\}$, $\{u_6\}$ y $\{u_5, u_7\}$ son subespacios propios de estas tres matrices. La rotación de ángulo $\pi/3$, $R_{\pi/3}$ descompone el subespacio $\{u_5, u_7\}$, puesto que u_7 tiene paridad bien definida (es autovalor) pero u_5 no. Como consecuencia, u_7 es también un autovalor de Ω . Por tanto, la acción conjunta de R_x, R_y y $R_{\pi/3}$ descompone el espacio en subespacios invariantes unidimensionales y, como consecuencia, autovectores ³ de Ω .

Podemos extraer más información útil de la tabla 6.1, en particular de las rotaciones de ángulo $\pi/3$. La aplicación de $R_{\pi/3}$ sobre u_4 da una combinación lineal de u_4 y u_5 . Puesto que u_4 y u_5 son autovectores, se sigue que sus autovalores son iguales.

Para modelos FHP sin partícula en reposo el procedimiento es el mismo. Sólo hay que quitar la séptima componente de los vectores $u_1 \dots u_6$ y eliminar el vector u_7 , puesto que $\frac{1}{2}c^2 - c_0^2 = 0$ para modelos FHP de 6 bits. La tabla 6.1 permanece válida tras la exclusión de u_7 , y de nuevo u_i , $i = 1, \dots, 6$ diagonalizan Ω .

Este procedimiento de diagonalización de Ω puede aplicarse con cambios menores a los modelos descritos en el capítulo 2. El punto importante es que al ortogonalizar los vectores $c_\alpha c_\beta \dots$ hay que tratar que sean autovectores de las operaciones de simetría de la red. La utilidad de esta base radica en que la inversión de Ω se realiza *independientemente* de las reglas de colisión. Incluso en modelos en los que no existe una forma sencilla del operador de colisión linealizado éste método se aplica y permite obtener expresiones

³Los autovectores u_i son el equivalente de los polinomios de Sonine para las moléculas de Maxwell [Balescu 75].

	u_1, u_2, u_3	u_4, u_5	u_6	u_7
FHP-I	0	$3f(1-f)^3$	$6f^2(1-f)^2$	–
FHP-I'	0	$3\kappa(1+2\kappa)$	$6\kappa^2$	–
FHP-II	0	$f(1-f)^3 \times$ $(7-4f)$	$3f(1-f)^2 \times$ $(3f^2-4f+3)$	$7f(1-f)^4$
FHP-III	0	$\kappa(7-8\kappa)$	$3\kappa(3-4\kappa)$	$7\kappa(1-2\kappa)$

Tabla 6.2: Autovalores del operador de colisión Ω para los diferentes modelos FHP. Los modelos I' y III son autoduales, y en ellos los autovalores dependen de $\kappa = f(1-f)$. Ver en la referencia [d'Humières y Lallemand 87] o en la sección 2.3 las definiciones de los modelos FHP-I, I', II y III.

compactas para los coeficientes de transporte.

Los autovalores para los modelos FHP se dan en la tabla 6.2, definidos como:

$$\Omega u_n = -\lambda_n u_n. \quad (6.19)$$

Se han encontrado cotas para los autovalores $0 \leq \lambda_n \leq 2$ [Schmitz y Dufty 90] independientemente de las reglas de colisión. Estas cotas garantizan la existencia de la hidrodinámica en la aproximación de Boltzmann, puesto que implica la existencia y positividad de los coeficientes de transporte y por tanto el decaimiento de las excitaciones del fluido, como sucede en la realidad.

Una vez que hemos construido la base propia de Ω , pasamos al cálculo de los coeficientes de transporte.

6.3 Coeficientes de transporte en la aproximación de Boltzmann

6.3.1 Viscosidades

En esta subsección obtendremos la expresión de las viscosidades en función de los autovalores de Ω . Sus expresiones se pueden obtener de (5.9) susti-

tuyendo el propagador cinético por $-1/\Omega$, como se obtuvo en (6.11), para obtener:

$$\begin{aligned}\eta &= -\frac{\rho}{bc_0^2}c_xc_y\left(\frac{1}{\Omega} + \frac{1}{2}\right)c_xc_y \\ \zeta &= -\frac{\rho}{bc_0^2}\left(\frac{1}{d}c^2 - c_0^2\right)\left(\frac{1}{\Omega} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{d}c^2 - c_0^2\right),\end{aligned}\quad (6.20)$$

donde c_xc_y y $\frac{1}{d}c^2 - c_0^2$ son considerados como vectores con elementos $(c_xc_y)_i = c_{ix}c_{iy}$ y $(\frac{1}{d}c^2 - c_0^2)_i = \frac{1}{d}c_i^2 - c_0^2$ respectivamente que corresponden a las corrientes $\hat{j}(\mathbf{c}_i)$ definidas en la sección 3.3, ecuación (3.77) ($d = 2$ para los modelos en esta sección). Observemos que ambas corrientes son autovectores del operador de colisión Ω , con autovalores $-\lambda_4$ y $-\lambda_7$ respectivamente. Por tanto, la viscosidad de cizalla en la aproximación de Boltzmann resulta

$$\frac{\eta}{\rho} = \nu = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\lambda_4} - \frac{1}{2}\right),\quad (6.21)$$

mientras que la viscosidad de volumen es nula para los modelos FHP-I y I' ($d = 2$) y FCHC ($d = 4$). Estos modelos tienen sólo una velocidad, $|\mathbf{c}_i| = c$, y la corrientes asociada a la viscosidad de volumen en (6.20) se anula idénticamente. Por otro lado,

$$\frac{\zeta}{\rho} = \frac{1}{14}\left(\frac{1}{\lambda_7} - \frac{1}{2}\right),\quad (6.22)$$

para los modelos FHP-II y III, con los autovalores λ_i dados en la tabla 6.2. Hemos utilizado el valor de la velocidad del sonido para modelos FHP, $c_0^2 = 3/b$.

En la figura 6.3.1 hemos representado la viscosidad de cizalla frente a la densidad reducida f , para los modelos FHP-I, II y III (de arriba a abajo). Como ya mencionamos, al incrementar el número de colisiones activas se disminuye la viscosidad. Como se aprecia, la viscosidad es mínima en el modelo FHP-III, puesto que es el modelo que mayor número de colisiones incluye. Este efecto es particularmente claro cuando se compara el modelo FHP-I con el III a altas densidades; es una situación en la que casi no hay colisiones activas en el modelo FHP-I, siendo su comportamiento el de un gas ideal, con viscosidad tendiendo a infinito. Asimismo la viscosidad de cizalla también tiene el comportamiento de un gas diluido cuando la densidad tiende a cero, $\nu \sim 1/f$. Por último, comentar que en el caso de gases de red en la aproximación de Boltzmann, la llamada *primera aproximación de Enskog* [Resibois 77] es exacta, porque las corrientes c_xc_y y $\frac{1}{d}c^2 - c_0^2$ son

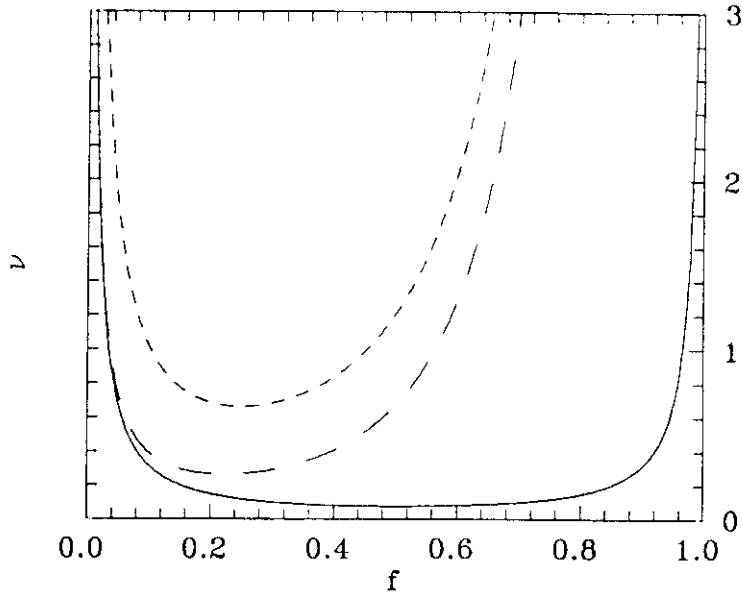


Figura 6.1: Viscosidades de cizalla para los modelos FHP-I, II y III (de arriba a abajo).

autofunciones del operador de colisión. Sin embargo, en el modelo unidimensional de 3 velocidades con 5 bits [Ernst 90a] o en el modelo térmico de 19 bits con cuatro velocidades en la red triangular [Boon *et al*] éste ya no es el caso.

6.3.2 Difusividades espúreas

En este caso el cálculo es algo más elaborado porque el grupo de simetría queda restringido al depender las difusividades de las direcciones externas θ .

Comenzamos reescribiendo la fórmula para las difusividades espúreas (4.14) en función del propagador cinético,

$$\Lambda_{\theta}(\hat{\mathbf{k}}) = \frac{1}{bc_0^2} c_{\theta} c_l \left\{ \tilde{\Gamma}(\pi\theta, i\pi) - \frac{1}{2} \right\} c_{\theta} c_l, \quad (6.23)$$

donde hemos utilizado que $\langle h_{\theta} | h_{\theta} \rangle = \kappa bc_0^2$ con h_{θ} y θ_i definidos en (4.5). Aquí el propagador cinético ha de ser evaluado en $\mathbf{k} = \pi\theta$ y $z = i\pi$. Ello es debido a la presencia de los factores $(-1)^{\theta_r}$ y $(-1)^t$, que pueden escribirse como $e^{i\pi\theta_r}$ y $e^{i\pi t}$ respectivamente y que desplazan el argumento de

la transformada de Fourier en $\pi\theta$ y el de Laplace en $i\pi$. Empleando (6.10) obtenemos

$$\tilde{\Gamma}(\pi\theta, i\pi) = \frac{1}{\Delta + \Omega}(\Delta - \mathbf{1}), \quad (6.24)$$

donde la matriz Δ se ha definido como

$$\Delta = e^{i\pi\theta \cdot c} + \mathbf{1} = (-1)^{\theta \cdot c} + \mathbf{1}, \quad (6.25)$$

que, como consecuencia de que $\theta \cdot c_i = \pm 1, 0, \forall i$, es una matriz diagonal con elementos 0 y +2. Aunque la difusividad $\Lambda_\theta(\hat{\mathbf{k}})$ (6.23) depende de la dirección de $\hat{\theta}$, los coeficientes escalares D_\perp y D_\parallel , definidos en (4.18), no. Evaluamos dichos coeficientes para el vector $\theta_1 = (0, 2/\sqrt{3})$ para el que los argumentos de simetría se pueden aplicar de manera más simple. Para este vector, Δ resulta:

$$\Delta_{ii} = (2, 0, 0, 2, 0, 0, 2), \quad (6.26)$$

y las corrientes de D_\perp y D_\parallel son tomando $\hat{\theta} = \hat{y}$ y $\hat{\theta}_\perp = \hat{x}$:

$$\begin{aligned} j_{D_\perp}(c_i) &= c_x c_y = \frac{\sqrt{3}}{4}(0, 1, -1, 0, 1, -1, 0) \\ j_{D_\parallel}(c_i) &= c_y^2 = \frac{3}{4}(0, 1, 1, 0, 1, 1, 0). \end{aligned} \quad (6.27)$$

Ambas corrientes son autovectores *nulos* del operador Δ , con lo que puede eliminarse del numerador de (6.24). Asimismo, $j_{D_\perp}(c_i)$ es autovector simultáneo de Δ y Ω ,

$$(\Omega + \Delta)u_4 = \Omega u_4 = -\lambda_4 u_4, \quad (6.28)$$

y como consecuencia

$$D_\perp = \nu \quad (6.29)$$

esto es, la viscosidad de cizalla y el coeficiente D_\perp son iguales para todos los modelos FHP.

El cálculo de D_\parallel es más complicado porque c_y^2 no es autofunción de Ω . Asimismo, la base que diagonaliza Ω no diagonaliza $\Delta + \Omega$, puesto que Δ y Ω no conmutan. Los argumentos de simetría aplicados en la sección (7.2) ya no son válidos, puesto que Δ no es invariante bajo rotaciones, aunque sí bajo reflexiones en ambos ejes. Dichas simetrías nos permiten dividir el conjunto $\{u_1, \dots, u_b\}$ en subespacios invariantes de $\Delta + \Omega$, a la vista de las

dos primeras filas de la tabla 6.1. Son $\{u_3\}$, $\{u_4\}$, $\{u_2, u_6\}$ y $\{u_1, u_5\}$ para el modelo FHP-I y $\{u_3\}$, $\{u_4\}$, $\{u_2, u_6\}$ y $\{u_1, u_5, u_7\}$ para el FHP-II y III. El vector c_y^2 pertenece a los subespacios $\{u_1, u_5\}$ y $\{u_1, u_5, u_7\}$ respectivamente. El problema de cálculo de $(\Delta + \Omega)^{-1} c_y^2$ se reduce a la inversión de una matriz 2×2 y 3×3 según el modelo, con resultados

$$D_{\parallel} = \frac{9}{4} \left(\frac{1}{\lambda_5} - \frac{1}{2} \right) = 9\nu \quad (\text{FHP - I})$$

$$D_{\parallel} = \frac{63}{8} \frac{(2 - \lambda_5)(2 - \lambda_7)}{14\lambda_5 + 4\lambda_7 - 9\lambda_5\lambda_7} = 441 \frac{\nu\zeta/\rho}{49\zeta/\rho + 4\nu} \quad (\text{FHP-II, III}). \quad (6.30)$$

La primera aproximación de Enskog para D_{\perp} coincide con el valor exacto (6.25) puesto que la corriente $c_x c_y$ es autovector de $\Delta + \Omega$. No sucede así en D_{\parallel} , porque c_y^2 ya no es autovector de $\Delta + \Omega$. Cuando la densidad tiende a cero el valor (6.30) y la primera aproximación de Enskog coinciden, pero no a densidades medias, donde puede llegar a ser 80% mayor que el valor (6.30).

Las simulaciones numéricas [Zanetti 89] parecen concluir que fuera de la aproximación de Boltzmann, la igualdad entre D_{\perp} y ν deja de ser válida.

La aproximación de Boltzmann para los coeficientes de transporte proporciona valores bastante buenos para los coeficientes de transporte, con diferencias menores del 20% en todo el rango de densidades [d'Humières y Lallemand 87][Zanetti 89][Gerits]. Para el coeficiente de difusión, los resultados son incluso mejores, con discrepancias menores del 1% [van der Hoef y Frenkel 91a]. La razón básica es que las funciones de correlación temporales en (5.9) están dadas hasta $t = 3$ de manera exacta por la aproximación de Boltzmann que predice un rápido decaimiento exponencial. Por tanto los coeficientes de transporte están dominados por la contribución de Boltzmann y ello hace que su predicción cuantitativa esté muy aproximada a los valores obtenidos numéricamente. Sin embargo, como se verá más adelante, la aproximación de Boltzmann es cualitativamente errónea. Sin embargo en otros modelos de red como los gases de Lorentz, la aproximación de Boltzmann no predice correctamente los coeficientes de transporte a ninguna densidad si se permite el retroceso de las partículas [van Velzen 90]. En la parte IIb de esta memoria desarrollaremos una teoría que cubrirá prácticamente toda la diferencia que existe entre los coeficientes de transporte en la aproximación de Boltzmann y los valores obtenidos por simulación.

7

Factor de estructura

En el capítulo anterior hemos estudiado las propiedades del propagador cinético $\Gamma(\mathbf{k}, z)$ en los límites de grandes separaciones espaciales $\mathbf{k} \rightarrow 0$ y grandes tiempos $z \rightarrow 0$, régimen en el que aparece el comportamiento hidrodinámico. Allí fuimos capaces de diagonalizar $\Gamma(0, 0)$ independientemente de las reglas de colisión, basándonos únicamente en las propiedades de simetría de la red y de expresar los coeficientes de transporte como autovalores de $\Gamma(0, 0)$. En este capítulo pretendemos obtener propiedades de $\Gamma(\mathbf{k}, z)$ cuando \mathbf{k} y z son no nulos, lo que nos permitirá pasar de una escala puramente macroscópica o hidrodinámica ($\mathbf{k} \rightarrow 0$) a una escala donde la estructura microscópica juega un papel importante ($\mathbf{k} \neq 0$). Entraremos así en el terreno de la *hidrodinámica generalizada*, donde se supone que las ecuaciones de la hidrodinámica siguen teniendo la misma forma pero en donde los coeficientes de transporte dependen de \mathbf{k} (ver [Alder y Alley 84] para una introducción al tema o [Resibois 77, Boon y Yip 80, Hansen y McDonald 86] para un tratamiento formal).

En particular este capítulo estará centrado en el estudio de la función de correlación densidad–densidad para valores finitos de \mathbf{k} y z que se expresa en términos del propagador cinético $\tilde{\Gamma}(\mathbf{k}, z)$. La función de correlación densidad–densidad es una de las funciones más importantes en el estudio de las propiedades de no equilibrio de un fluido, porque contiene toda la información relevante sobre la dinámica del sistema. A partir de ella se pueden extraer propiedades termodinámicas, así como coeficientes de transporte. Asimismo, en fluidos reales puede ser medida experimentalmente utilizando técnicas de scattering inelástico de neutrones o scattering de luz. Para ello se incide con un haz de neutrones o fotones sobre el sistema y se estudia la energía depositada $\hbar\omega$ en función del cambio en su vector de on-

das \mathbf{k} . Puesto que tal cambio depende de las fluctuaciones de la densidad, podemos obtener información de la función de correlación de la densidad y de las relaciones de dispersión $\omega(\mathbf{k})$. El análogo de los experimentos de scattering en sistemas reales son las simulaciones numéricas en los gases de red. Ellas nos permiten obtener el factor de estructura y las relaciones de dispersión. Nosotros obtendremos el comportamiento analítico de las fluctuaciones densidad–densidad a \mathbf{k} , z pequeño en la aproximación de Boltzmann como un desarrollo perturbativo.

7.1 Teoría de perturbaciones

Como paso previo al estudio de la función de correlación densidad–densidad, diagonalizaremos el propagador cinético $\tilde{\Gamma}(\mathbf{k}, z)$ desarrollando los autovectores y autovalores en serie de potencias alrededor del punto $\mathbf{k} = 0$, $z = 0$ lo que fue tratado extensamente en el capítulo anterior.

La aproximación de Boltzmann desarrollada en los capítulos anteriores nos permite escribir el propagador cinético en el tiempo t como el producto de sí mismo t veces:

$$\Gamma(\mathbf{k}, t) = \left[e^{-ik \cdot c} (\mathbf{1} + \Omega) \right]^t = \left[\Gamma(\mathbf{k}, 1) \right]^t. \quad (7.1)$$

Denotaremos por $\psi_\mu(\mathbf{k}, \mathbf{c})$ (un b -vector con componentes $\psi_{\mu i}(\mathbf{k}) = \psi_\mu(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i)$ ($\mu = 1, \dots, b$)) a los autovectores normalizados de $\Gamma(\mathbf{k}, t = 1)$ a los que llamaremos *modos* y por $e^{z_\mu(\mathbf{k})}$ sus correspondientes autovalores. Por tanto,

$$e^{-ik \cdot c} (\mathbf{1} + \Omega) \psi_\mu(\mathbf{k}) = e^{z_\mu(\mathbf{k})} \psi_\mu(\mathbf{k}). \quad (7.2)$$

La matriz $\Gamma(\mathbf{k}, t)$ en (7.1) y (7.2) *no es simétrica*, aunque $\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{c})$ y Ω son simétricas (ver ecuación (6.13)). La razón es que $\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{c})$ y Ω no conmutan. Los autovectores $\psi_\mu(\mathbf{k})$ son llamados autovectores por la derecha, y los autovectores $\phi_\mu(\mathbf{k})$ de la ecuación traspuesta

$$(\mathbf{1} + \Omega) e^{-ik \cdot c} \phi_\mu(\mathbf{k}) = e^{z_\mu(\mathbf{k})} \phi_\mu(\mathbf{k}), \quad (7.3)$$

son llamados autovectores por la izquierda. Comparando las ecauciones (7.2) y (7.3) obtenemos que

$$\phi_\mu(\mathbf{k}) = e^{ik \cdot c} \psi_\mu(\mathbf{k}). \quad (7.4)$$

Las funciones $\{\phi_\mu, \psi_\mu\}$ con $\mu = 1, 2, \dots, b$ forman un conjunto biortonormal completo, normalizado según:

$$\phi_\mu(\mathbf{k}) \psi_\lambda(\mathbf{k}) \equiv \sum_i \phi_{\mu i}(\mathbf{k}) \psi_{\lambda i}(\mathbf{k}) = \sum_i e^{ik \cdot c} \psi_{\mu i}(\mathbf{k}) \psi_{\lambda i}(\mathbf{k}) = \delta_{\mu\lambda}, \quad (7.5)$$

donde hemos utilizado el producto escalar definido bajo la ecuación (6.12). Por tanto, el propagador cinético en la aproximación de Boltzmann resulta ser,

$$\Gamma_{ij}(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mu} e^{z_{\mu}(\mathbf{k})t} \psi_{\mu i}(\mathbf{k}) \psi_{\mu j}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}_j} \quad (7.6)$$

donde la suma sobre μ se extiende sobre todos los modos. Esta ecuación es la descomposición espectral de Γ , similar a la empleada en muchas ramas de la Física, incluyendo la Mecánica Cuántica. En ella podemos ver explícitamente el decaimiento *exponencial* de las funciones de correlación, que es consecuencia de la aproximación de Boltzmann. A partir de ahora utilizaremos una representación equivalente de (7.2):

$$\left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c} + z_{\mu}(\mathbf{k})} - \mathbb{1} - \Omega \right] \psi_{\mu}(\mathbf{k}) = 0. \quad (7.7)$$

La comparación con la ecuación (6.10) muestra que $[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c} + z_{\mu}(\mathbf{k})} - \mathbb{1} - \Omega]$ es proporcional a $1/\tilde{\Gamma}(\mathbf{k}, z)$, y que los autovalores $z_{\mu}(\mathbf{k})$ son los polos de $\tilde{\Gamma}(\mathbf{k}, z)$ en el plano complejo z .

El siguiente paso consiste en encontrar $\psi_{\mu}(\mathbf{k})$ y $z_{\mu}(\mathbf{k})$. En el capítulo anterior obtuvimos los valores de ψ_{μ} y z_{μ} cuando $\mathbf{k} = 0$, puesto que en este caso el factor $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}}$ en la ecuación (7.1) es igual a 1 y el análisis espectral de Γ se reduce al de Ω . Por tanto, tenemos que $\psi_{\mu}(0) = u_{\mu}$ dados en la expresiones (6.17) y (6.18) y $z_{\mu}(0) = \log(1 - \lambda_{\mu})$ con los valores de λ_{μ} , $i = 1, \dots, b$ de la tabla 6.2. En dicha tabla podemos ver que hay dos tipos de autovectores de Ω , aquellos con autovalor nulo y el resto que tienen autovalor positivo ($0 < \lambda_{\mu} < 2$, ver ecuación (6.19)). Agruparemos los modos atendiendo a este criterio, su valor $z_{\mu}(0)$, puesto que según sea éste, su comportamiento es cualitativamente diferente para valores pequeños de \mathbf{k} .

- Si $\text{Re}(z_{\mu}(0)) = 0$ cuando $\mathbf{k} \rightarrow 0$. El factor $e^{z_{\mu}} \simeq 1$, así que los modos con este autovalor casi no se amortiguan en la evolución. Sólo decaen más lentamente con órdenes superiores de \mathbf{k} . Corresponden a cantidades conservadas en la evolución y son, por tanto, modos que sobreviven a largos tiempos. Estos serán los modos en los que estaremos principalmente interesados, puesto que son ellos los que dan el comportamiento hidrodinámico. Debido a sus características los llamaremos *modos lentos o hidrodinámicos*.
- Si $\text{Re}(z_{\mu}(0)) \neq 0$ cuando $\mathbf{k} \rightarrow 0$. En este caso el modo corresponde a una excitación que decae rápidamente con un tiempo medio $(z_{\mu}(0))^{-1}$,

por lo que en pocos pasos temporales su amplitud es despreciable. Los llamaremos modos *rápidos* o *cinéticos*.

Existe otro tipo de modos, los modos *espúreos*, tratados en el capítulo 4, que corresponden a $\text{Re}(z_\mu(\mathbf{k})) \rightarrow 0$ pero no cuando $\mathbf{k} \rightarrow 0$, sino cuando $\mathbf{k} \rightarrow \pi\theta$. Como corresponden a modos muy rápidamente oscilantes, verifican que $\text{Im}(z_\mu(\mathbf{k})) \rightarrow i\pi$ cuando $\mathbf{k} \rightarrow \pi\theta$. No los trataremos en detalle, pero volveremos sobre ellos más adelante.

A continuación obtendremos $\psi_\mu(\mathbf{k})$ y $z_\mu(\mathbf{k})$ para los modos hidrodinámicos como un desarrollo en serie alrededor de $\mathbf{k} = 0$. A causa de que el autovalor $z_\mu(0) = 0$ es $(d+1)$ veces degenerado, $\psi_\mu^{(0)} = \{1, \mathbf{c}\}$, tenemos que utilizar teoría de perturbaciones para valores degenerados. Por tanto, escribimos $\psi_\mu(\mathbf{k})$ y $z_\mu(\mathbf{k})$ como:

$$\begin{aligned} z_\mu(\mathbf{k}) &= ikz_\mu^{(1)} + (ik)^2 z_\mu^{(2)} + \dots \\ \psi_\mu(\mathbf{k}) &= \psi_\mu^{(0)} + ik\psi_\mu^{(1)} + (ik)^2 \psi_\mu^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (7.8)$$

donde cada vector $\psi_\mu^{(n)}$ es un vector de componentes $\psi_\mu^{(n)i}$. El orden cero de $\psi_\mu(\mathbf{k})$, $\psi_\mu^{(0)}$ es igual a $\psi_\mu(0)$, y coincide con los vectores u_i definidos en (6.17) y (6.18). Modos con $\text{Im}(z_\mu(\mathbf{k})) \neq 0$ (o bien, $z_\mu^{(1)} \neq 0$ en la ecuación (7.8)) representan modos amortiguados propagantes con velocidad de propagación $|\text{Im}(z_\mu(\mathbf{k}))|$, mientras que si $\text{Im}(z_\mu(\mathbf{k})) = 0$ los modos son puramente difusivos. El coeficiente $\text{Re}(z_\mu(\mathbf{k}))$ (o $z_\mu^{(2)}$ en (7.8)) es la difusividad del modo o constante de amortiguamiento. Tal como se ha escrito en (7.8) $z_\mu^{(2)}$ tiene que ser positiva, para que la amplitud del modo decrezca, o bien $\text{Re}(z_\mu(\mathbf{k})) < 0$.

El método de obtener $z_\mu^{(i)}$ y $\psi_\mu^{(i)}$ consiste en incluir las expresiones (7.8) en la ecuación (7.7) y diagonalizar la ecuación resultante orden por orden en k , multiplicando donde sea necesario por las $(d+1)$ autofunciones nulas de Ω , $\psi_\mu(0)$. La ecuación en orden k^l permite obtener $z_\mu^{(l)}$ y $\psi_\mu^{(l)}$. A partir de ellas y con la ecuación en orden k^{l+1} se puede obtener $z_\mu^{(l+1)}$ que dependerá de $z_\mu^{(m)}$ con $m \leq l$. Este desarrollo es formalmente igual a la teoría de perturbaciones en Mecánica Cuántica [Schiff] y permite obtener $\psi_\mu(\mathbf{k})$ y $z_\mu(\mathbf{k})$ hasta el orden deseado en k .

Como ejemplo, aplicaremos el método a uno de los modos hidrodinámicos, el modo de cizalla o de densidad de momento transversal ($\mu = t$). En este caso la ecuación (7.7) con las sustituciones (7.8) da en orden $\mathcal{O}(1)$:

$$\Omega\psi_\mu^{(0)} = 0. \quad (7.9)$$

como ya sabíamos, puesto que estamos haciendo el desarrollo alrededor del punto $\mathbf{k} = 0$, donde conocemos el espectro de Γ . A partir de la teoría de perturbaciones en primer orden determinamos los $(d+1)$ autovalores $z_\mu(\mathbf{k})$ y las combinaciones lineales adecuadas de los $(d+1)$ autovectores nulos, $\{1, \mathbf{c}\}$. De esta forma encontramos $z_t^{(1)} = 0$ y para el modo de cizalla hasta orden $\mathcal{O}(1)$, $\psi_t^{(0)} = c_t \equiv \hat{\mathbf{k}}_\perp \cdot \mathbf{c}$, donde $\hat{\mathbf{k}}_\perp$ representa el vector unitario ortogonal al vector \mathbf{k} , obtenemos la ecuación

$$(z_t^{(1)} + c_t)\psi_t^{(0)} - \Omega\psi_t^{(1)} = 0, \quad (7.10)$$

con $c_t \equiv \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{c}$. Por tanto, la función hasta orden k resulta sin normalizar:

$$\psi_t^{(1)} = \psi_t^{(0)} + ik\frac{1}{\Omega}c_t\psi_t^{(0)} = c_t + \frac{1}{\Omega}ikc_t c_t. \quad (7.11)$$

El hecho de que $z_t^{(1)} = 0$ implica que el modo de cizalla es puramente difusivo, como ya se obtuvo en el capítulo 3. El siguiente orden, $\mathcal{O}(k^2)$ es:

$$(z_t^{(2)} + \frac{1}{2}c_t^2)\psi_t^{(0)} + c_t\psi_t^{(1)} - \Omega\psi_t^{(2)} = 0. \quad (7.12)$$

Multiplicando de nuevo por $\psi_t^{(0)}$, tenemos para la difusividad:

$$\begin{aligned} z_t^{(2)} &= -c_t\psi_t^{(0)}\left[\frac{1}{\Omega} + \frac{1}{2}\right]c_t\psi_t^{(0)}/\psi_t^{(0)}\psi_t^{(0)} \\ &= -\frac{1}{bc_0^2}c_t c_t \left(\frac{1}{\Omega} + \frac{1}{2}\right) c_t c_t. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Pero sabemos que, de acuerdo a (6.20) y (6.21), la difusividad del modo de cizalla es precisamente la viscosidad ν . Por tanto, obtenemos de nuevo la fórmula de para la viscosidad (6.20) en la aproximación de Boltzmann: la corriente asociada a la cantidad conservada, sobre la que actúa el inverso del operador de colisión Ω^{-1} que multiplica de nuevo a la corriente. El factor $1/2$ es la parte propagante y el factor $\psi_t^{(0)}\psi_t^{(0)} = bc_0^2$ en el denominador no es más que el elemento de la matriz de susceptibilidades χ de la ecuación (3.73).

Para los modos sonoros obtenemos similarmente,

$$\begin{aligned} \psi_\sigma(\mathbf{k}) &= (c_t + \sigma c_0) + \frac{1}{\Omega}ik(c_t^2 - c_0^2) \\ z_\sigma(\mathbf{k}) &= -i\sigma c_0 k - \frac{1}{2}\Gamma k^2. \end{aligned} \quad (7.14)$$

En este caso c_0 es la velocidad del sonido y Γ es la constante amortiguadora del sonido (no confundir con el propagador cinético), que en el caso de modelos atérmicos valen

$$\begin{aligned} c_0 &= \sqrt{3/b} \\ \Gamma &= 2(c_t^2 - c_0^2) \left[\frac{1}{\Omega} - \frac{1}{2} \right] (c_t^2 - c_0^2) / \psi_\sigma^{(0)} \psi_\sigma^{(0)} = \nu + \zeta/\rho, \end{aligned} \quad (7.15)$$

donde hemos usado que $\chi_{\sigma\sigma} = \psi_\sigma^{(0)} \psi_\sigma^{(0)} = 2bc_0^2$. El procedimiento presentado se puede aplicar igualmente a los modos cinéticos. También se pueden obtener los modos espúeos, cambiando el límite $\mathbf{k} \rightarrow 0$ por $\mathbf{k} \rightarrow \pi\theta$. Ello lleva esencialmente a reemplazar la matriz Ω por $\Delta + \Omega$, como se describió en la sección 6.3.2.

El análisis aquí presentado es muy atractivo desde el punto de vista teórico porque permite obtener el comportamiento cualitativo de los modos (oscilantes, puramente difusivos, ...) así como las constantes de amortiguamiento y la velocidad del sonido. En la práctica, el cálculo de órdenes elevados en k resulta muy tedioso y es más sencillo recurrir a la obtención numérica de los autovalores y autovectores de (7.1). Además, como ya veremos, las funciones $z_\mu(\mathbf{k})$ no son funciones analíticas de \mathbf{k} , y un esquema como el descrito nunca dará valores correctos más allá del límite de analiticidad.

Los resultados perturbativos hasta orden k^2 se muestran en (7.13) y (7.14). Los autovalores hasta $\mathcal{O}(k^2)$ son isótropos, esto es, $z_\mu(\mathbf{k}) = z_\mu(|\mathbf{k}|)$ en la red triangular, pero no en una red con simetría cubica. Las correcciones en órdenes superiores dependen de la dirección de \mathbf{k} . Dibujamos en la figura 7.1 la parte real (a) e imaginaria (b) de los polos $z_\mu(\mathbf{k})$ para el modo de cizalla $\mu = t$ (superior) y los modos sonoros $\mu = \pm$ (inferior) para el modelo FHP-I a densidad $f = 0.4$ cuando \mathbf{k} forma un ángulo $\theta_k = \pi/12$ (ver discusión posterior acerca de la dependencia angular). Las líneas de trazos corresponden a los resultados perturbativos (7.13) y (7.14), mientras que las líneas continuas son los resultados numéricos de (7.1). Como era de esperar el acuerdo se produce cuando \mathbf{k} es pequeño, mientras que cuando \mathbf{k} crece los órdenes superiores en \mathbf{k} desvían el comportamiento de las parábolas (7.13) y (7.14).

Otro efecto observable es el de la dependencia del espectro con la dirección del vector de ondas \mathbf{k} , caracterizado por un ángulo θ_k . Se produce debido a la estructura anisótropa de la red, en particular cuando se estudia a valores finitos de k . La isotropía está garantizada sólo hasta orden $\mathcal{O}(k^2)$ cuando se consideran grandes regiones espaciales, que implican $\mathbf{k} \rightarrow 0$, pero no a valores finitos de \mathbf{k} . Como consecuencia, para cada valor del ángulo θ_k

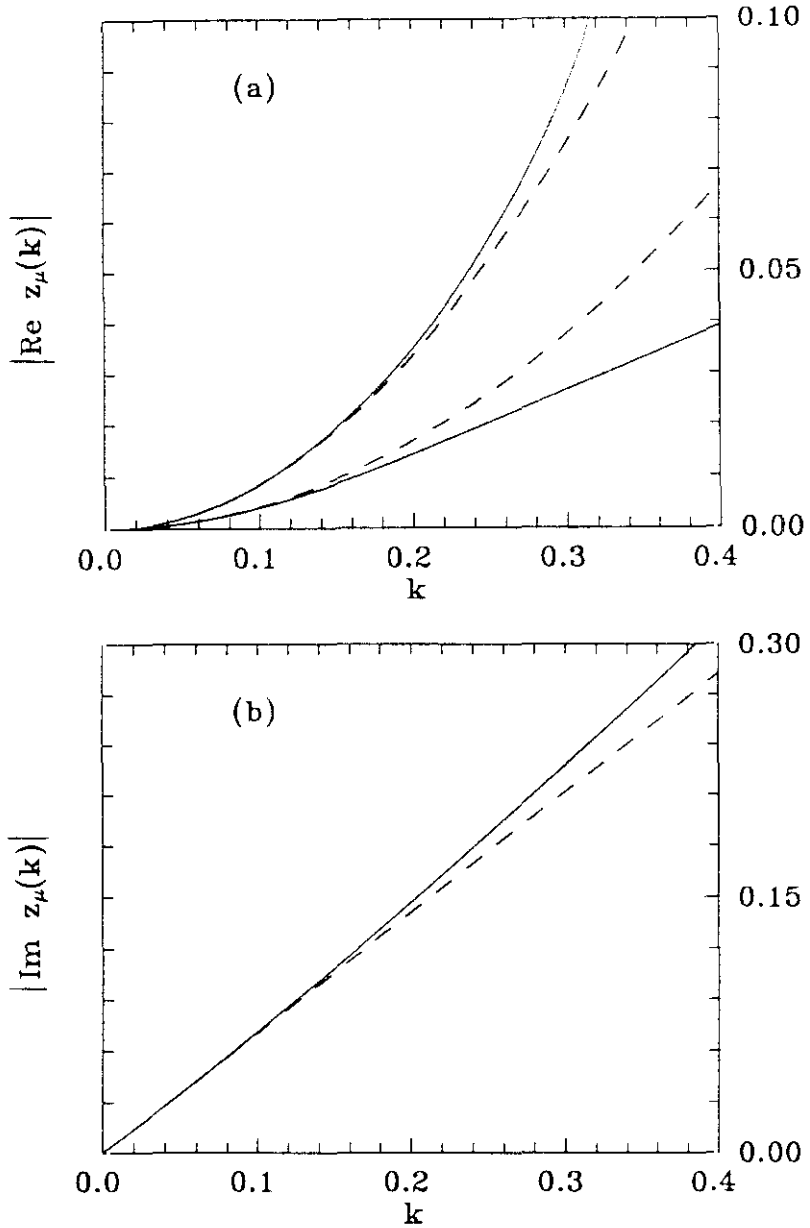


Figura 7.1: Espectro de los modos hidrodinámicos del modelo FHP-I a densidad $f = 0.4$, en la dirección de k con $\theta_k = \pi/12$ en función de k . La figura (a) muestra la parte real de $z_\mu(k)$ cambiada de signo para el modo de cizalla ($\mu = t$, líneas superiores) y para los modos sonoros ($\mu = \sigma$, líneas inferiores). La figura (b) muestra la parte imaginaria. Las líneas discontinuas corresponden al análisis perturbativo, mientras que las continuas a la resolución numérica.

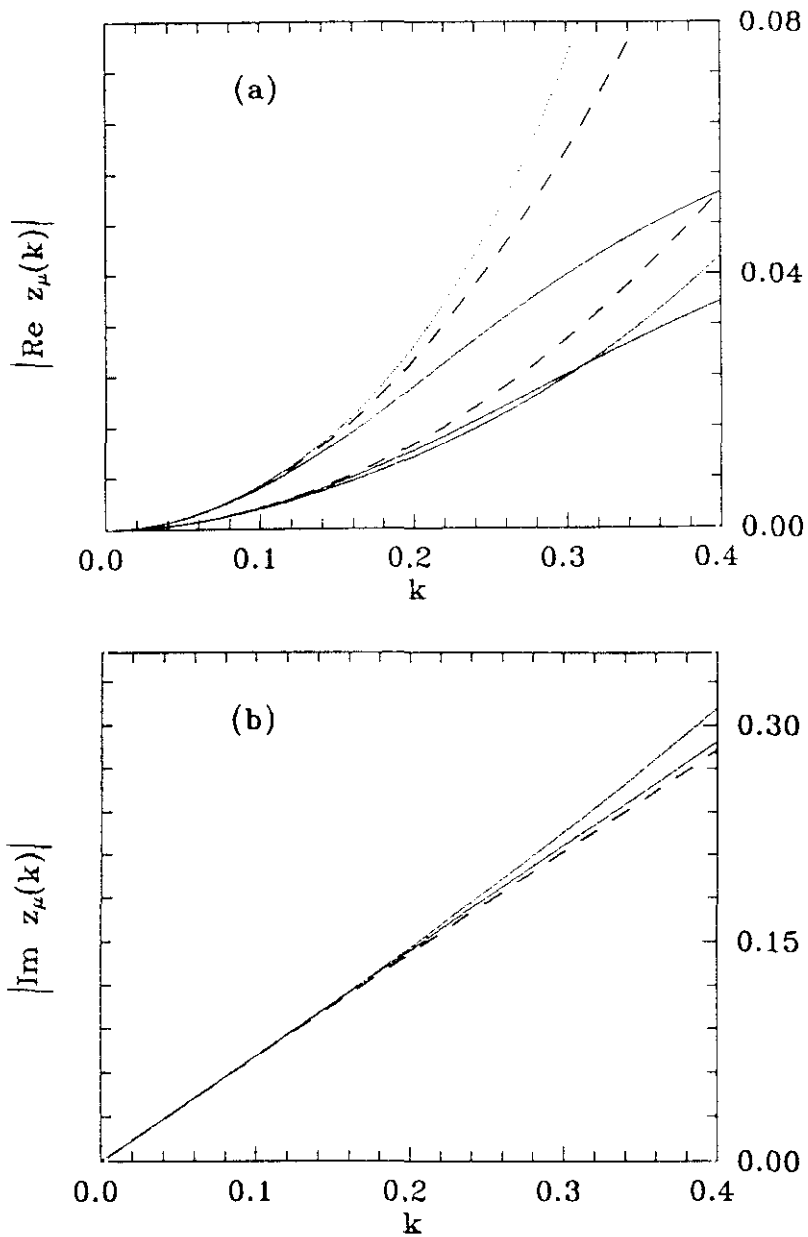


Figura 7.2: Espectro de los modos hidrodinámicos como función de k para diferentes direcciones de k en el modelo FHP-I a densidad $f = 0.25$. La parte real se muestra en (a) y la imaginaria en (b). La banda superior en la figura (a) se refiere al modo de cizalla y el inferior a los modos sonoros.

existe un espectro, y los autovalores varían dentro de una banda. Ello se ha dibujado en la figura 7.2, para el modelo FHP-I con $f = 0.25$. La línea de trazos representa los valores obtenidos mediante teoría de perturbaciones (7.13) y (7.14), mientras que las zonas rayadas son las bandas a las que pertenecen los autovalores de los modos hidrodinámicos. La superior está asociado al modo de cizalla, que es más anisótropo que el modo sonoro (curva inferior). El efecto de la anisotropía es poco importante para los valores de k en los que estamos interesados ($k \rightarrow 0$), aunque cuando k es moderado modifica cualitativamente el espectro. Si mantenemos válidas las fórmulas de Green-Kubo para las viscosidades en términos de λ_i , ecuaciones (6.21) y (6.22), la dependencia en el ángulo θ_k de λ se transmite a las viscosidades, obteniendo ahora la dependencia $\nu(\hat{k})$ y $\zeta(\hat{k})$. Así entramos en el régimen de la hidrodinámica generalizada, donde los coeficientes de transporte dependen del módulo y, para gases de red, del ángulo de k . El efecto de anisotropía es típico de los gases de red, que se definen sobre una malla discreta. En fluidos continuos e isotropos la dependencia en θ_k del espectro desaparece. A la vista de esta gráfica, podemos dar una explicación [Das *et al* 92] a un resultado encontrado en las simulaciones [d'Humières y Lallemand 87] [Rivet y Frisch 90], la aparición de una viscosidad de volumen negativa en el modelo FHP-I. Dicha negatividad es imposible porque se ha probado [Schmitz y Dufty 90] que los coeficientes de transporte son positivos o nulos. Las simulaciones se han realizado para vectores de ondas con módulo del orden de 0.3. Para estos valores, las desviaciones entre los valores perturbativos y los exactos (numéricos) son apreciables. Si la dirección del vector de ondas es paralela a uno de las direcciones de la red (que es la dirección más comunmente utilizada), resulta que la viscosidad de cizalla exacta es mayor que la perturbativa. Sin embargo, la constante amortiguadora del sonido exacta es más cercana a la perturbativa. La viscosidad de volumen, ζ , se obtiene como diferencia de ambas. Por tanto, como el valor perturbativo de la viscosidad de volumen es nulo, el exacto resulta ser negativo. Pero todo ello es un efecto del tamaño finito del vector de ondas utilizado en las simulaciones.

En la figura siguiente 7.3 representamos el espectro del modelo FHP-I a densidad $f = 0.5$ y dirección de k , $\theta_k = \pi/12$, incluyendo modos hidrodinámicos y cinéticos. El espectro tiene un comportamiento bastante complejo, puesto que los modos se acoplan para dar pares de modos propagantes y más tarde se desacoplan de nuevo. Con la vista puesta en la figura 7.3 podemos distinguir varias regiones. Cuando k es muy pequeño ($k < 0.1$) existe una clara separación entre modos lentos y rápidos. Estamos en las cercanías de $k = 0$ y los modos están bien descritos por la aproximación

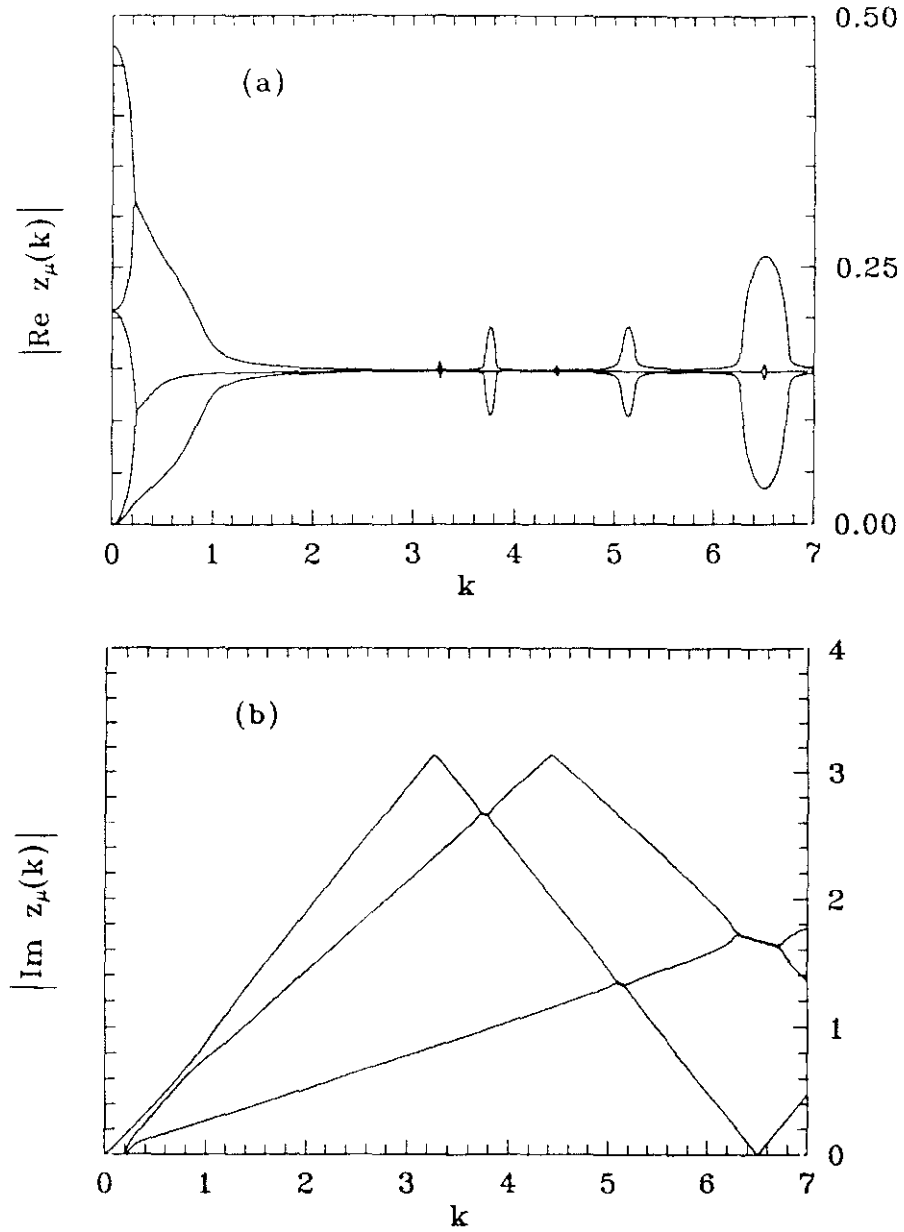


Figura 7.3: Espectro del propagador cinético para el modelo FHP-I a densidad $f = 0.5$ y ángulo $\theta_k = \pi/12$. Los diferentes regímenes, hidrodinámico, cinético y partícula libre (ver texto) se observan claramente. Nótese que $\text{Im} z_\mu(k)$ está definido módulo 2π .

perturbativa hasta orden k^2 , ecuaciones (7.13) y (7.14). Es el régimen de la hidrodinámica clásica. Para valores de k mayores que 0.1 pero menores que 0.2 todavía existe distinción entre modos lentos y rápidos, pero los autovalores dejan de coincidir con los obtenidos con la teoría de perturbaciones. Entramos en la hidrodinámica generalizada, que supone que las densidades conservadas son todavía los modos lentos. Aquí se asume que la forma funcional de las ecuaciones hidrodinámicas se conserva, pero que sus coeficientes $z_\mu^{(1)}(\mathbf{k})$ y $z_\mu^{(2)}(\mathbf{k})$ son funciones que varían lentamente con el vector de ondas \mathbf{k} [Luo *et al* 91]. En el rango que nos ocupa ($0.1 < k < 0.2$) estamos dentro de los límites de aplicabilidad de dicha teoría. Si seguimos incrementando k , cuando llegamos a $k \simeq 0.21$ dos modos cinéticos se mezclan¹ formando un par de modos complejos conjugados propagantes, como se ve en la figura 7.3b, donde aparece un modo con $\text{Im}z_\mu(\mathbf{k}) \neq 0$. Asimismo, cuando $k \simeq 2.3$ el modo cinético restante se mezcla con el modo de cizalla² para dar otro par de modos propagantes. En este momento deja de tener sentido hablar de los modos hidrodinámicos o cinéticos, e incluso la hidrodinámica generalizada ya no es válida. Estos puntos definen el radio de convergencia de los desarrollos perturbativos en k , puesto que en ellos los autovalores cruzan por un punto de no analiticidad. A partir de ese punto los autovalores se acercan a un único valor, descrito en buena aproximación por Ω_{ii} (ver discusión en la sección 7.4), que aproximadamente alcanzan cuando $k \simeq 1.5$. A partir de ahí el espectro está dominado por el factor $e^{ik \cdot c}$, que corresponde a la propagación libre. Los autovalores casi no varían, hasta que se llega a $k \simeq 3.7$, $k \simeq 5.1$ y $k \simeq 6.5$, donde los modos se separan momentáneamente, volviéndose a unir posteriormente [Das *et al* 92].

La forma del espectro que se ilustra en la figura 7.3 no es universal, sino que varía con la densidad y el ángulo del vector \mathbf{k} . A densidades mayores que $1/3$ los dos modos cinéticos degenerados a $k = 0$ se localizan entre los modos hidrodinámicos y el modo cinético no degenerado. Para densidades menores que $1/3$ este orden se altera, aunque la descripción dada sigue siendo válida. Respecto a la dependencia angular, el espectro presentado corresponde a $\theta_k = \pi/12$, cuando sólo existe la simetría $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$. Hay otras elecciones de θ_k que poseen más simetrías, que son cuando \mathbf{k} se dirige a lo largo de los enlaces de la red ($\theta_k = n\pi/3$, $n = 0, \dots, 5$) o bien cuando se dirige a lo largo

¹Son los que corresponden a $\psi_\mu^{(0)} = c_x c_y$ y $\psi_\mu^{(0)} = c_x^2 - c_y^2$. Aunque los consideraciones de simetría del capítulo 6 ya no son válidas porque $k \neq 0$, sí tenemos la simetría $\{x, y\} \rightarrow \{-x, -y\}$, y las dos funciones anteriores forman un subespacio invariante. Dicho subespacio se mantiene invariante para todo k .

²Los modos que se mezclan ahora son los relacionados con $\psi_\mu^{(0)} = c_t$ y $\psi_\mu^{(0)} = (4c_x^2 - 3)c_x$.

de la bisectriz de dos enlaces ($\theta_k = n\pi/3 + \pi/6$, $n = 0, \dots, 5$). En el primer caso, una vez que los modos se acoplan por pares, estos no se agrupan, sino que tienden a tres valores independientes dados aproximadamente por $-\Omega_{11} \pm \Omega_{13}$ y Ω_{11} [Das *et al* 92]. El segundo caso es el de mayor simetría, y en él el modo de cizalla y el cinético no se acoplan, sino que tienden a 4 valores diferentes.

El espectro también depende del modelo. En el modelo FHP-III, con muchas más colisiones activas, el régimen hidrodinámico es más amplio y prácticamente no hay regiones de partícula libre (excepto a densidades extremas), que corresponden a modelos con pocas colisiones activas, donde la propagación libre es relevante a densidades medias.

7.2 Factor de Estructura

En la sección anterior hemos analizado el espectro de $\Gamma(\mathbf{k}, t)$. Ahora trabajaremos con el llamado *factor de estructura*, transformada de Fourier de la función de correlación densidad-densidad. La importancia de esta función radica en que se puede medir experimentalmente o mediante simulación numérica, y a partir de ella obtener propiedades termodinámicas y de transporte de forma experimental. Permite realizar el paso de la microdinámica a la macrodinámica, puesto que a partir de mediciones de las fluctuaciones de la densidad (microscópico) podemos obtener parámetros termodinámicos y coeficientes de transporte (macroscópicos).

El factor de estructura se define como la doble transformada de Fourier en posiciones y tiempos [Resibois 77]:

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{r}} \sum_{t=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle \delta\rho(\mathbf{r}, t) \delta\rho(0, 0) \rangle, \quad (7.16)$$

donde ρ es la densidad total, $\rho = bf$ y $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$ es la fluctuación de la densidad local definida como:

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t), \quad (7.17)$$

Así pues el factor de estructura es (utilizando (5.8)):

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{r}} \sum_{t=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{ij} \Gamma_{ij}(\mathbf{r}, t) \kappa. \quad (7.18)$$

(recordemos que para modelos atérmicos $\kappa_j = \kappa$). La transformada de Fourier de la función de correlación a igual tiempo define el factor de estructura estático,

$$\rho S(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{ij} \Gamma_{ij}(\mathbf{r}, 0) \kappa = \sum_j \kappa, \quad (7.19)$$

donde hemos utilizado las propiedades a tiempo cero del propagador cinético (6.2). Si empleamos ahora la simetría del propagador cinético³ $\Gamma(\mathbf{k}, t) = \Gamma(\mathbf{k}, -t)$, podemos escribir el factor de estructura como

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{t=0}^{\infty} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \sum_{ij} \Gamma_{ij}(\mathbf{r}, t) \kappa - \rho S(\mathbf{k}), \quad (7.20)$$

donde el factor $\rho S(\mathbf{k})$ aparece para compensar la presencia de dos términos en $t = 0$ en esta ecuación. Por tanto,

$$\begin{aligned} \rho S(\mathbf{k}, \omega) &= 2\text{Re} \sum_{ij} \tilde{\Gamma}_{ij}(\mathbf{k}, i\omega) \kappa - \rho S(\mathbf{k}) \\ &= 2\text{Re} \sum_{ij} \left(\frac{1}{e^{i\omega + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}} - \mathbf{1} - \Omega} \right)_{ij} e^{i\omega + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}_j} \kappa - \rho S(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (7.21)$$

En esta última ecuación hemos sustituido el propagador cinético por su aproximación de Boltzmann, ecuación (6.10). Podemos reemplazar a continuación el factor $e^{i\omega + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}}$ en el numerador de (7.21) por $(e^{i\omega + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}} - \mathbf{1} - \Omega + \mathbf{1} + \Omega)$, para obtener:

$$\begin{aligned} \rho S(\mathbf{k}, \omega) &= 2\text{Re} \sum_{ijl} \left(\frac{1}{e^{i\omega + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}} - \mathbf{1} - \Omega} \right)_{il} \frac{(e^{i\omega + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}} - \mathbf{1} - \Omega)_{lj} \kappa}{il} \\ &\quad + \left(\frac{1}{e^{i\omega + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}} - \mathbf{1} - \Omega} \right)_{il} (\mathbf{1} + \Omega)_{lj} \kappa - \rho S(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (7.22)$$

Recordamos que el operador Ω satisface que $\sum_i \Omega_{ij} = \sum_j \Omega_{ij} = 0$, como consecuencia de la conservación del número de partículas, (5.12) y de la simetría $\Omega_{ij} = \Omega_{ji}$ si se verifica (6.13). Por tanto, el factor de estructura se reduce a:

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = 2\text{Re} \sum_{ij} \left(\frac{1}{e^{i\omega + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{c}} - \mathbf{1} - \Omega} \right)_{ij} \kappa + \rho S(\mathbf{k}). \quad (7.23)$$

³Para gases de red con dinámica estocástica tenemos únicamente evolución temporal hacia adelante. Entonces definimos para $t < 0$, $\Gamma(\mathbf{k}, t) = \Gamma(\mathbf{k}, |t|)$.

Esta será la expresión que utilizaremos para la evaluación numérica del factor de estructura.

En fluidos continuos, y debido a la total isotropía, $S(\mathbf{k}, \omega)$ no depende de la dirección de \mathbf{k} , no siendo así en gases de red. Podemos estudiar $S(\mathbf{k}, \omega)$ con su dependencia angular o bien hacer un promedio sobre $\theta_{\mathbf{k}}$.

7.3 Método de Landau–Placzek

La inversión analítica de (7.1) es muy compleja para todo valor de \mathbf{k} y ω . Nosotros lo haremos numericamente exponiendo los resultados en la sección 7.4. Sin embargo, existe un método debido a Landau y Placzek que permite evaluar $S(\mathbf{k}, \omega)$ en el régimen hidrodinámico, *pequeño* vector de ondas y pequeña frecuencia. Su argumento se basa en que en el régimen hidrodinámico sólo los modos lentos son relevantes en el factor de estructura. Hacemos esta idea más precisa partiendo de la ecuación (7.18), donde realizamos sólo la transformada de Fourier en la variable τ , obteniendo,

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \sum_{ij} \Gamma_{ij}(\mathbf{k}, t) \kappa. \quad (7.24)$$

Insertamos ahora la descomposición espectral de Γ_{ij} dada en la ecuación (7.6), que nos lleva a

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} \sum_{\mu} e^{z_{\mu}(\mathbf{k})t} \sum_{ij} \psi_{\mu i} \psi_{\mu j} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_j} \kappa, \quad (7.25)$$

donde la suma sobre μ se extiende tanto sobre modos hidrodinámicos como sobre modos cinéticos. En el régimen hidrodinámico, en el que estamos interesados, los modos lentos tienen autovalores que se comportan como $|\text{Re}z_{\mu}(\mathbf{k})| = \mathcal{O}(k^2)$ mucho menores que 1, mientras que para los cinéticos como $|\text{Re}z_{\mu}(\mathbf{k})| = \mathcal{O}(1)$. Por tanto los modos cinéticos se amortiguan rápidamente y son despreciables tras pocos pasos temporales, en contraposición a los hidrodinámicos que decaen muy lentamente. La aproximación de Landau–Placzek consiste precisamente en ignorar los modos rápidos o cinéticos, restringiendo la suma en μ en (7.25) a los modos hidrodinámicos únicamente. Esta aproximación está perfectamente justificada cuando $|\text{Re}z_{\text{hidro}}(\mathbf{k})| \ll |\text{Re}z_{\text{cinet}}(\mathbf{k})|$. Aun dentro del grupo de modos lentos, el modo transversal o de cizalla no contribuye, puesto que verifica que $\sum_i \psi_{ti} = 0$ y, por tanto, no se acopla con la densidad. Así pues sólo queda el par de modos sonoros, $\mu = \pm$. Por tanto, el factor de estructura en la aproximación de Landau–Placzek resulta:

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{t=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \sum_{\mu=\pm} e^{z_{\mu}(k)t} \sum_{ij} \psi_{\mu i} \psi_{\mu j} e^{ik \cdot c_j} \kappa. \quad (7.26)$$

Podemos realizar la transformada de Fourier en t , obteniendo,

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = 2\text{Re} \sum_{\mu=\pm} \left[\frac{1}{1 - e^{-i\omega + z_{\mu}(k)}} - 1 \right] \sum_{ij} \psi_{\mu i} \psi_{\mu j} e^{ik \cdot c_j} \kappa. \quad (7.27)$$

Si empleamos las expresiones válidas hasta orden k^2 de $z_{\pm}(\mathbf{k})$ obtenidas en (7.14) y (7.15), y recordamos que estamos en el régimen hidrodinámico (k, ω pequeños), obtenemos que:

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = b \sum_{\sigma=\pm} \frac{\Gamma/2k^2}{(\omega + \sigma kc_0)^2 + (\Gamma/2)^2 k^4} \kappa, \quad (7.28)$$

donde hemos utilizado que $\sum_i \psi_{\mu i}^{(0)} = \sqrt{b/2}$ (propriadamente normalizado). La ecuación (7.28) es la famosa fórmula de Landau–Placzek. Un ejemplo típico de $S(\mathbf{k}, \omega)$ se da en la figura 7.4. La ecuación (7.28) muestra que en el límite hidrodinámico el factor de estructura tiene dos picos, llamados *picos de Brillouin*, lorentzianas centradas alrededor de $\omega = \pm c_0 k$, que se asocian al decaimiento de las ondas sonoras. La constante de amortiguamiento, Γk^2 , viene dada por la anchura de la lorentziana en su semialtura.

En fluidos en los que la energía es conservada aparece un tercer pico, llamado *pico de Rayleigh*, que corresponde al modo térmico o fluctuaciones de entropía. Como es un modo puramente difusivo está localizado en $\omega = 0$. En el modelo FHP que nos ocupa no aparece puesto que no hay conducción térmica ya que no se conserva la energía. En modelos térmicos tal pico ha sido observado en las simulaciones numéricas [Grosfils *et al* 92] en acuerdo con los resultados que se obtienen al hacer la teoría de Landau–Placzek con modos térmicos. En ellos, tanto la anchura de los picos de Brillouin como el de Rayleigh y la velocidad del sonido dependen de la densidad y de la temperatura.

En lo que resta de capítulo compararemos el resultado del método de Landau–Placzek con la resolución numérica de $S(\mathbf{k}, \omega)$ obtenida a partir de (7.17).

7.4 Análisis de diferentes regímenes del factor de estructura

Esta sección estará dedicada al análisis del factor de estructura $S(\mathbf{k}, \omega)$ en diferentes regímenes de (\mathbf{k}, ω) , con $\omega \simeq \mathcal{O}(k)$. Nos limitaremos al modelo

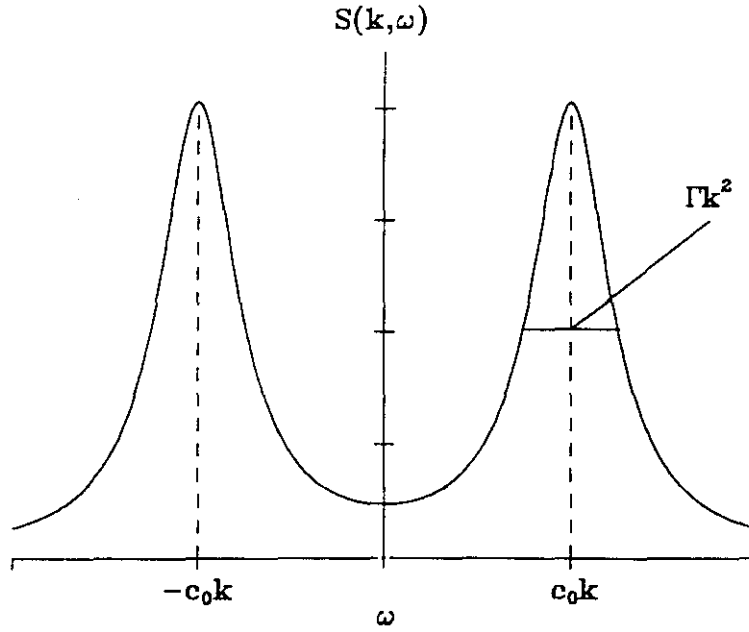


Figura 7.4: Factor de estructura en el límite hidrodinámico. Los picos de Brillouin se localizan en $\pm c_0 k$ con anchura Γk^2 .

FHP-I, por ser el más sencillo y el que presenta todas las características esenciales. Asimismo nos concentraremos en los modos sonoros, puesto que los modos de cizalla no contribuyen a $S(\mathbf{k}, \omega)$. Hemos encontrado tres tipos de comportamiento, relacionados con la estructura del espectro discutida en la sección 7.1. Los llamaremos régimen hidrodinámico, régimen de partícula libre y régimen cinético, caracterizados por diferentes valores de k . Pasamos a analizar cada uno separadamente.

7.4.1 Régimen hidrodinámico

Este régimen se obtiene cuando k es pequeño. En él se recupera la hidrodinámica clásica, y la fórmula de Landau-Placzek es válida. Sucede cuando hay una clara separación de escalas entre modos hidrodinámicos y cinéticos (corresponde, para hacernos una idea, a $k < 0.1$ en la figura (7.3)), esto es,

$$|\operatorname{Re}(z_{\text{hidro}}(\mathbf{k}))| \ll |\operatorname{Re}(z_{\text{cinet}}(\mathbf{k}))|. \quad (7.29)$$

En el orden más bajo en k reemplazamos la parte real de los polos de los modos hidrodinámicos por su expresión perturbativa, $\operatorname{Re}(z_{\text{hidro}}(\mathbf{k})) = -\Gamma k^2/2$,

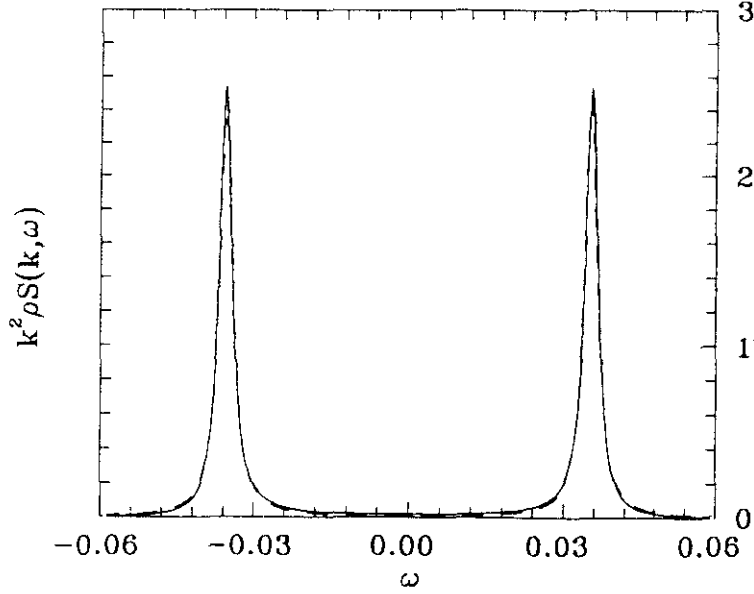


Figura 7.5: Factor de estructura para el modelo FHP-I a densidad $f = 0.5$ con $k = 0.05$ y $\theta_k = \pi/12$. La línea continua es la evaluación numérica de $S(k, \omega)$ y la discontinua (superpuesta) la fórmula de Landau-Placzek

con $\Gamma = \nu \simeq 1/\lambda_4$ (ver ecuación (6.21)) y los cinéticos por $\log(1 - \lambda_i) \simeq -\lambda_i$. Así pues, si suponemos que todos los autovalores son aproximadamente iguales (lo que sucede en un amplio rango central de densidades), obtenemos la condición que se satisface en el régimen hidrodinámico:

$$k \ll \lambda_4, \lambda_6. \quad (7.30)$$

Esto es, k ha de ser mucho menor que un elemento típico de Ω , y por tanto, $i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c} + \omega)$ se puede considerar como una pequeña perturbación de Ω en la ecuación (7.23). En el modelo FHP-I a densidad $f = 0.5$ los autovalores valen (ver tabla 6.2) $\lambda_4 = 0.1875$ y $\lambda_6 = 0.375$. Así pues el rango de validez del régimen hidrodinámico es $k \ll 0.2$, como se obtuvo analizando el espectro dibujado en la figura 7.3.

Una vez que se ha fijado la condición (7.29), el método de Landau-Placzek está perfectamente justificado, y sus resultados se ajustan muy bien a la evaluación numérica de $S(\mathbf{k}, \omega)$. Ello se puede ver en la figura 7.5, donde se ha representado $k^2 \rho S(\mathbf{k}, \omega)$ a densidad $f = 0.5$, con $k = 0.05$ y con $\theta_k = \pi/12$. El factor de escala k^2 se introduce porque en los máximos la función de estructura es de orden $\sim (\Gamma k^2)^{-1}$. La línea continua muestra la

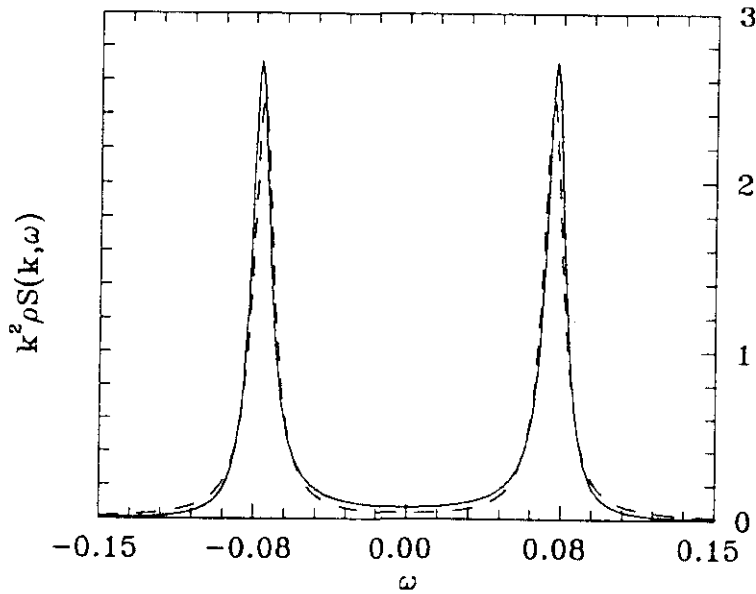


Figura 7.6: Igual que en la figura 7.5 pero con $k = 0.1$

evaluación numérica de $S(\mathbf{k}, \omega)$ a partir de (7.23) mientras que la de trazos corresponde a la fórmula de Landau-Placzek, ecuación (7.28). El acuerdo es magnífico, superponiéndose ambas curvas. Para valores más pequeños el resultado es aún mejor, como cabe esperar. Asimismo, en este régimen la isotropía está garantizada, como se observa en las figuras 7.2. Según incrementamos k , nos alejamos del rango de validez del régimen hidrodinámico. En la figura 7.6 se representa el factor de estructura para la misma densidad y θ_k , pero con vector de ondas $k = 0.1$. Aquí se empiezan a notar pequeñas diferencias entre el resultado exacto y la fórmula de Landau-Placzek, aunque el acuerdo todavía es muy bueno.

7.4.2 Régimen de partícula libre

El régimen opuesto al hidrodinámico es el llamado *régimen de partícula libre* o de alta frecuencia, que se obtiene cuando la desigualdad (7.30) cambia de sentido, esto es, cuando

$$k \gg \lambda_4, \lambda_6, \quad (7.31)$$

pero manteniendo k pequeño. Este régimen se obtiene a densidades extremas, porque en ambos autovalores hay factores f y $1 - f$, que hacen los

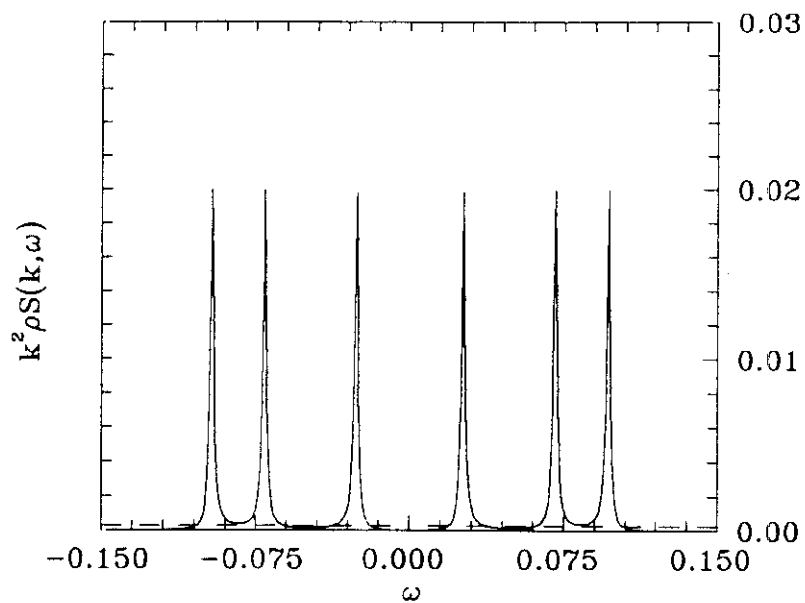


Figura 7.7: Factor de estructura para el modelo FHP-I a densidad $f = 0.001$ y con $k = 0.1$ ilustrando el régimen de partícula libre. Los picos se localizan en $k \cdot c_i$, con anchura $\Omega_{ii} = 0.001$.

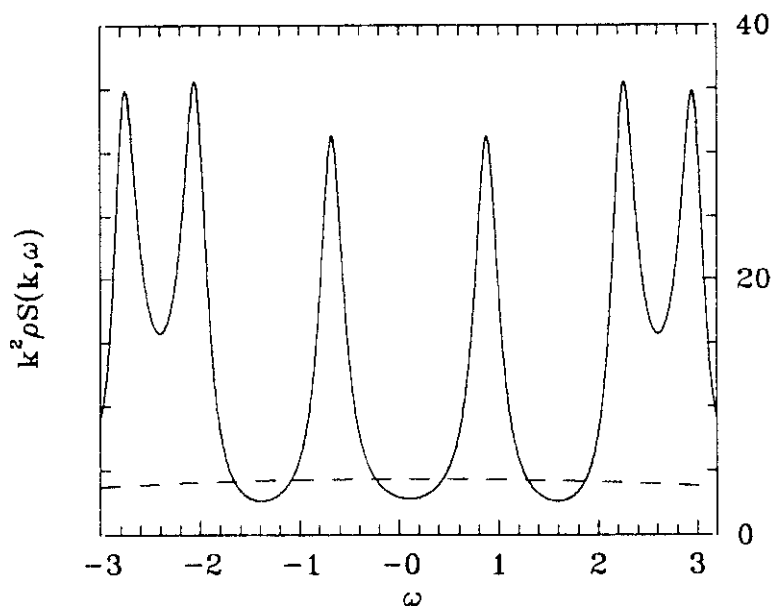


Figura 7.8: Igual que en la figura 7.5 pero con $k = 3$

autovalores muy pequeños. En este caso Ω se puede considerar como una pequeña perturbación de $i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{c} + \omega)$ en (7.23). Podemos hacer un desarrollo perturbativo alrededor de $f = 0$ o $f = 1$ ($\Omega = 0$) [Das *et al* 92], para obtener que los polos se localizan en:

$$z_\mu(\mathbf{k}) = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_\mu + \Omega_{\mu\mu}, \quad \mu = 1, \dots, 6, \quad (7.32)$$

con lo que la función de estructura resulta

$$\rho S(\mathbf{k}, \omega) = 2\text{Re} \sum_{i=1}^6 \frac{1}{i(\omega + \mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_i) + \Omega_{ii}} \kappa \quad (7.33a)$$

$$= 2 \sum_{i=1}^6 \frac{\Omega_{ii}}{(\omega + \mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_i)^2 + \Omega_{ii}^2} \kappa. \quad (7.33b)$$

En el límite de densidad nula ($f \rightarrow 0$) podemos aplicar el resultado:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{i(\omega - \omega_0) + \epsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{i\omega} + \pi \delta(\omega - \omega_0), \quad (7.34)$$

(donde \mathcal{P} denota la parte principal) a la ecuación (7.33a) para concluir que en este régimen aparecen picos con forma de δ , localizados en $\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_i$. Ello se ilustra en la figura 7.7 a densidad $f = 0.001$, $k = 0.1$ y $\theta_k = \pi/12$. En ella se aprecian los picos localizados en $\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}_i$, en este caso en los valores $\pm 0.26, \pm 0.707, \pm 0.966$. Igualmente la anchura y la altura de los picos es similar para todos ellos, dada en buena aproximación por $2\Omega_{ii}$ y $2\kappa/\Omega_{ii}$, respectivamente, como se obtiene de (7.33b). Por supuesto, en este régimen la aproximación de Landau-Placzek es completamente errónea.

Si se analizara el espectro para el caso representado en la figura 7.7, a densidad $f = 0.001$, se observaría que los autovalores $z_\mu(\mathbf{k})$ convergen a un valor constante para valores muy pequeños de k ($k \gtrsim 0.005$). Es un espectro muy similar al presentado en la figura 7.3 pero la convergencia de los autovalores se produce para $k \simeq 0.005$. A partir de ahí se entra en el régimen de partícula libre. En este sentido, también existe régimen de partícula libre a densidades más altas cuando los autovalores han convergido a uno sólo. Por ejemplo, a densidad $f = 0.5$ (figura 7.3) para $k > 1.5$ los autovalores han convergido a uno único, dado en buena aproximación por Ω_{ii} . En la figura 7.8 se ha ilustrado este efecto para $k = 3$ y densidad $f = 0.5$, donde se aprecian los picos centrados en $\pm 0.78, \pm 2.12, \pm 2.90$ y con anchura aproximadamente igual a 0.29 mientras que $\Omega_{ii} = 0.25$.

Cuanto menor es la probabilidad de que ocurra una colisión antes se alcanza la transición al régimen de partícula libre. Ello se puede hacer

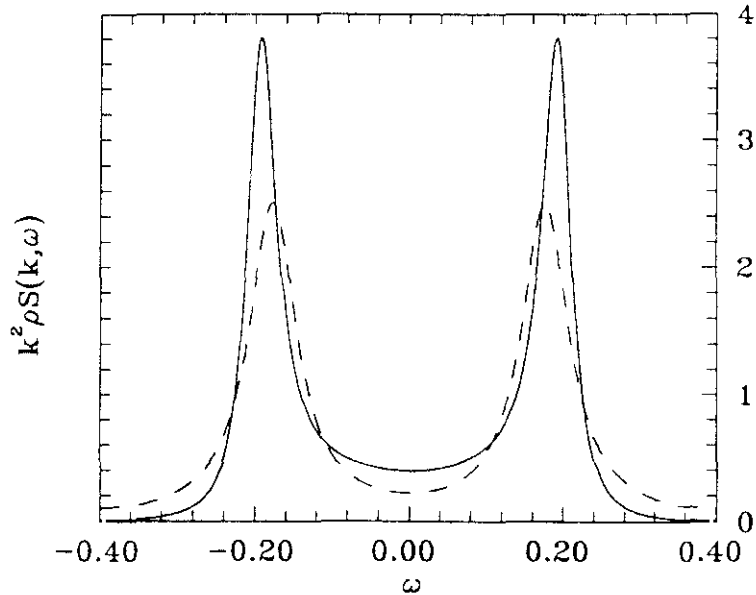


Figura 7.9: Igual que en la figura 7.5 pero con $k = 0.25$

de dos maneras: disminuyendo (o aumentando) la densidad hasta valores extremos (figura 7.7) o bien trabajando con modelos con pocas colisiones efectivas, como el modelo que nos ocupa, el FHP-I (figura 7.8). En un modelo con muchas más colisiones activas como el modelo FHP-III el régimen de partícula libre no se alcanza sino para valores extremos de la densidad [Das *et al* 92].

7.4.3 Régimen cinético

Es un régimen intermedio entre los dos anteriores. Los modos cinéticos e hidrodinámicos no están claramente diferenciados, pero todavía no se han fundido en un único valor. La teoría de Landau-Placzek ya no es válida, porque su hipótesis de separación entre autovalores falla. Ello se ve en la figura 7.9, a densidad $f = 0.5$ y $k = 0.25$. El cociente entre z_{cinet} y z_{hidro} es del orden de 15, y aunque la teoría de Landau-Placzek da todavía un acuerdo cualitativo, es cuantitativamente diferente⁴. Cuando aumentamos el vector de ondas hasta $k = 0.75$ (figura 7.10) el cociente entre autovalores

⁴La teoría de Landau-Placzek daría resultados mejores si se utilizaran en (7.28) los valores $c_0(k)$ y $\Gamma(k)$ obtenidos tras resolver numéricamente la ecuación (7.7).

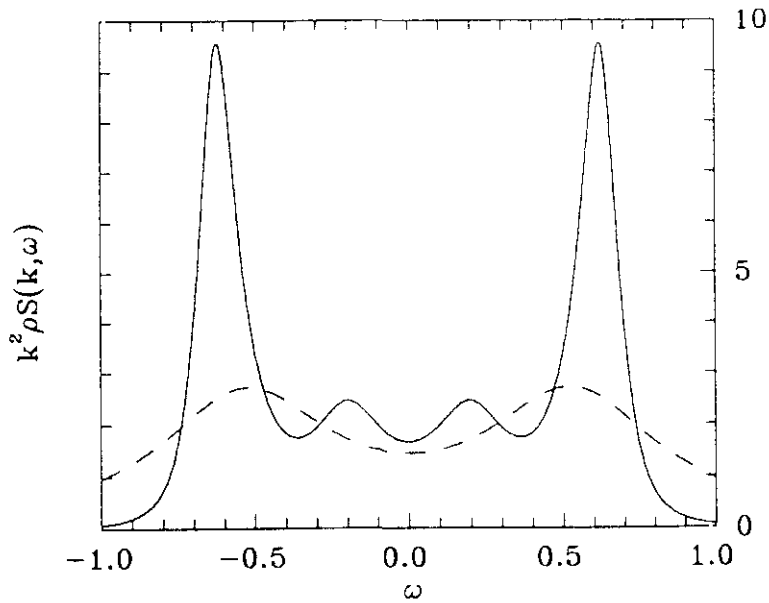


Figura 7.10: Igual que en la figura 7.5 pero con $k = 0.75$

cinéticos e hidrodinámicos decrece hasta 3 y la teoría de Landau-Placzek ya no es ni cualitativamente correcta. En la línea sólida de 7.10 se empieza a vislumbrar un comportamiento de partícula libre, con dos picos centrales y dos laterales que se descompondrán en dos picos tipo δ cada uno para dar un espectro como el de la figura 7.8. Obsérvese la variación del factor de estructura según se incrementa k (compárese las figuras 7.5, 7.6, 7.9, 7.10 y 7.8).

Una vez acabado el análisis de los diferentes regímenes del factor de estructura, algunos comentarios son necesarios. La dependencia del factor de estructura con el ángulo es importante cuando estamos fuera del límite hidrodinámico. Por ejemplo, para la densidad a la que estamos trabajando, $f = 0.5$ la localización de los picos de Brillouin varía menos de un 0.2% cuando el módulo de k vale 0.1. Cuando k crece hasta 0.2 (ya fuera del que hemos llamado régimen hidrodinámico) la variación es del 2%. Para la constante de amortiguamiento la dependencia es mayor, como se puede intuir comparando la dependencia del espectro con la dirección, figura 7.2. Por ello en el régimen hidrodinámico podemos prescindir de la dependencia del ángulo en $S(\mathbf{k}, \omega)$, y suponer que $S(\mathbf{k}, \omega) = S(k, \omega)$. Cuando se está interesado en otros regímenes de k , $S(\mathbf{k}, \omega)$ depende del ángulo fuertemente,

en particular en el régimen de partícula libre. Por ello es importante especificar con que ángulo se trabaja. Ello es decisivo si queremos comparar la teoría con las simulaciones numéricas.

Para el modelo FHP-III, como ya hemos comentado a lo largo del capítulo, las cosas son algo diferentes. El resultado más importante es que el régimen de partícula libre no se alcanza para muchas densidades, extendiéndose el régimen hidrodinámico (clásico o generalizado) hasta valores muy altos de k . Ello es muy bueno puesto que estamos interesados en los gases de red para modelar las ecuaciones de la hidrodinámica, y cuanto mayor sean estos rangos, mayor será la aplicabilidad del modelo.

Hemos así analizado el espectro y el factor de estructura para gases de red. Ambos proporcionan información muy importante acerca del comportamiento hidrodinámico de dichos modelos. En particular, hemos estudiado la isotropía y las regiones en las que son válidas la hidrodinámica clásica y la generalizada.

Hasta aquí se ha desarrollado la teoría cinética en la aproximación de Boltzmann, donde debido a la simplicidad de la evolución hemos sido capaces de obtener muchas propiedades de la cinética de los gases de red. En la parte siguiente de esta memoria nos dedicaremos a un tema mucho más difícil: elaborar una teoría para estudiar cómo las secuencias de colisiones correlacionadas modifican las propiedades del sistema. Será mucho más compleja que la aquí presentada, pero seremos capaces de obtener resultados muy importantes y que se ajustan muy bien a los resultados obtenidos por simulación.

IIb
Teoría Cinética de Anillo

8

Desarrollo de la Teoría

8.1 Introducción

En esta última parte de la tesis vamos a continuar desarrollando la teoría cinética de gases de red. En la parte anterior hicimos un estudio exhaustivo de la teoría cinética en la aproximación de Boltzmann, cuya suposición fundamental es la ausencia de colisiones correlacionadas, esto es, las partículas colisionan en un punto pero no se vuelven a encontrar nunca ni lo hicieron antes. Esta aproximación es muy buena cuando la densidad es muy baja (o también muy alta), porque entonces es muy improbable que se produzcan secuencias de colisiones correlacionadas, que requieren al menos tres partículas. Las contribuciones de tales eventos son de orden relativo $\mathcal{O}(\rho)$ cuando se comparan con colisiones descorrelacionadas binarias, que son las tenidas en cuenta en la ecuación de Boltzmann. Sin embargo, a densidades medias la probabilidad de que tal evento ocurra no es despreciable y a esas densidades la descripción de las propiedades cinéticas del gas de red en la aproximación de Boltzmann no es correcta.

En particular, la aproximación de Boltzmann predice una evolución de las fluctuaciones de los números de ocupación (ecuación (5.14)) que lleva a que el propagador cinético (y con él todas las correlaciones a dos cuerpos) decaiga temporalmente de manera exponencial, según obtuvimos en (7.1), o más explícitamente en (7.6). Sin embargo sabemos que tanto en fluidos continuos [Alder y Wainwright 70] como en gases de red [Frenkel y Ernst] las funciones de correlación, tanto las de fluidos como las de partícula marcada, muestran decaimientos temporales *algebraicos*, las llamadas *colas a largos tiempos*. Estas funciones de correlación decrecen como $t^{-d/2}$, donde d es la dimensión del sistema. La deducción de este resultado se hace a partir de la

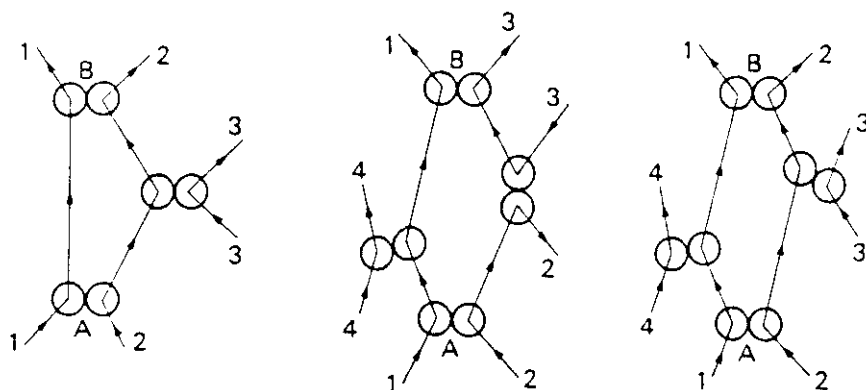


Figura 8.1: Ejemplos de colisiones correlacionadas. Fuente: [Hansen y McDonald 86].

teoría del acoplamiento de los modos, desarrollada para fenómenos críticos [Kadanoff y Swift 68] y aplicada posteriormente a fluidos [Ernst *et al* 76]. En ella se supone que las fluctuaciones de densidad no decaen como una combinación lineal de modos, como se escribió en (7.6), sino que lo hacen acoplándose a *pares* de modos con diferentes vectores de onda [Ernst 91b]. Físicamente representa que las recoliciones, que son responsables de las colas a largos tiempos, se producen por el movimiento de vórtices o modos de cizalla, ilustrados en [Alder y Alley 84]. Este mecanismo se extiende sobre distancias mucho mayores que el recorrido libre medio (distancia media entre colisiones), y por ello la teoría del acoplamiento de los modos es válida para tiempos largos. Este argumento puramente fenomenológico está en excelente acuerdo con los resultados obtenidos por simulación numérica. Para las implicaciones de la existencia de colas a largos tiempos, referimos a [Ernst 91b]. Aquí sólo citaremos la *no existencia de hidrodinámica en dos dimensiones*. Como ya vimos en capítulos anteriores, los coeficientes de transporte vienen dados por sumas temporales de las funciones de correlación. Para sistemas bidimensionales el sumando es una función que decae como t^{-1} , y la suma diverge como $\log t$. Por tanto los coeficientes de transporte en dos dimensiones no existen, ni tampoco la hidrodinámica. En sistemas unidimensionales tal divergencia es aun mayor. Sólo para sistemas con $d > 2$ los coeficientes de transporte y la hidrodinámica clásica existen.

En esta parte de la tesis desarrollaremos una teoría que tenga en cuenta las recoliciones más sencillas que se pueden producir, las del tipo descrito en la figura 8.1. En ellas tenemos dos partículas que colisionan en el punto A,

evolucionan cada una separadamente, realizando colisiones descorrelacionadas, tipo Boltzmann, y al final colisionan de nuevo en el punto B. Por su estructura las llamaremos *colisiones de anillo* y a la teoría cinética resultante *teoría cinética de anillo*. Sólo teniendo en cuenta este tipo de colisiones y en el límite de tiempos mucho mayores que el tiempo libre medio seremos capaces de obtener la teoría del acoplamiento de los modos y por tanto el decaimiento algebraico de las funciones de correlación descrito. Mostraremos como se produce la transición del decaimiento exponencial predicho por Boltzmann al algebraico.

Estrictamente hablando los coeficientes de transporte no existen en sistemas bidimensionales: son divergentes como $\log t$. Sin embargo se miden en las simulaciones numéricas con bastante precisión y resultan ser finitos. Esta aparente paradoja es debida a que en las simulaciones tanto los tamaños del sistema como los tiempos simulados son finitos. La divergencia como $\log t$ se puede escribir asimismo como una divergencia $\log L$, con L el tamaño lineal del sistema. Sin embargo, las contribuciones de $A \log t$ o de $B \log L$ a los coeficientes de transporte en gases de red es pequeña a tiempos finitos comparada con los valores de Boltzmann de los coeficientes de transporte. Pero si queremos comparar los resultados numéricos con los obtenidos mediante las fórmulas de Green-Kubo, hemos de sumar dichas fórmulas sólo hasta el tiempo en el que se realizan las simulaciones. Ello no era de importancia en la aproximación de Boltzmann, puesto que allí el decaimiento exponencial daba unos coeficientes de transporte finitos. Sin embargo, en nuestra teoría, que predice el comportamiento correcto a largos tiempos, el truncamiento de la suma es de vital importancia. Cuando se trabaja así la teoría cinética de anillo reduce en más del 60% la diferencia entre los valores dados por la aproximación de Boltzmann y los valores obtenidos por simulación. La débil dependencia temporal de los coeficientes de transporte, como $\log t$ cuando $t \gg 1$, hace que dichos coeficientes no sean muy sensibles a la extensión temporal de la simulación. Así, cálculos detallados que serán expuestos, muestran que al pasar de 150 a 500 pasos temporales las sumas en las fórmulas de Green-Kubo se incrementan en menos del 4%. Por tanto, la divergencia de los coeficientes de transporte es extremadamente débil. Igual sucede con el coeficiente de difusión.

La teoría cinética de anillo nos permitirá también explicar de forma exacta un fenómeno observado en las simulaciones numéricas de los sistemas tridimensionales, como son las desviaciones de la aproximación de Boltzmann tras dos pasos temporales [van der Hoef y Frenkel 90]. En sistemas discretos el tiempo mínimo para que se produzca una colisión correlacio-

nada es $t = 3$ [Kirkpatrick y Ernst 91]. Ello es debido a que las partículas necesitan al menos *dos* pasos de tiempo para ir al nodo vecino y volver. Así pues, para tiempo $t = 1, 2$ las funciones de correlación están descritas de manera exacta por la aproximación de Boltzmann. Sin embargo, en sistemas tridimensionales aparecen desviaciones de la aproximación de Boltzmann tras sólo dos pasos temporales, no así en sistemas en una, dos [Naitoh *et al* 91b] y cuatro dimensiones [Dijkstra *et al* 92]. ¿Qué es lo que hace a los sistemas tridimensionales comportarse de forma distinta? Como ya expusimos, no hay red tridimensional regular con isotropía de tensores de cuarto orden. La forma de simular redes en tres dimensiones es a partir de una red cuatridimensional (FCHC) en la que una de las dimensiones se ha hecho periódica tras sólo dos intervalos espaciales [Frisch *et al* 86]. A través de dicha condición periódica las partículas pueden encontrarse tras sólo dos pasos temporales y producir colisiones correlacionadas. Por tanto es un efecto puramente geométrico que la teoría aquí presentada explicará cuantitativamente. Este, junto con la deducción de la teoría del acoplamiento de los modos y las correcciones de los coeficientes de transporte, son los principales resultados de la teoría cinética de anillo.

8.2 Difusión de una partícula marcada

En este capítulo y en el siguiente no estudiaremos los coeficientes de transporte de fluidos, las viscosidades, sino que estaremos interesados en el *coeficiente de difusión*. Para la determinación de este coeficiente existen magníficas simulaciones numéricas [van der Hoef y Frenkel 90], con errores menores del 0.1%, que permiten comprobar la validez de la teoría y que han corroborado con excelente precisión la teoría del acoplamiento de los modos [Frenkel y Ernst].

Para estudiar procesos de difusión en fluidos hemos de registrar la trayectoria de una partícula del fluido. Sin embargo, en gases de red nos encontramos con el problema de que las partículas son indistinguibles. Su identidad se pierde en cada colisión y tras ella nos es imposible decir cuál es la partícula que estábamos siguiendo. Por ello, no nos es posible definir la trayectoria de una partícula del fluido. Para solventar este problema se toma una partícula del fluido y se hace distinta al resto: se marca. Para que no perturbe al fluido, se impone que la dinámica de la partícula marcada sea igual a la de cualquier partícula del fluido. Así pues, el paso de colisión se realiza de acuerdo a las reglas de colisión del fluido, independientemente de

la presencia o ausencia de la partícula marcada. Una vez que se ha realizado la colisión, la marca se distribuye entre las partículas presentes según unas reglas especificadas.

Hay muchas formas de elegir las reglas de distribución de la marca entre las partículas [Ernst y Naitoh 91]. Nosotros sólo consideraremos las llamadas *reglas de colisión máximamente aleatorias*, MAXRCR, introducidas por Frenkel y colaboradores en sus simulaciones numéricas. En ellas la marca se asocia aleatoriamente a cualquiera de las partículas presentes en un nodo tras la colisión, independientemente de que se haya producido una colisión activa o no. Con estas reglas de colisión la partícula marcada tiene un movimiento balístico (línea recta) cuando la red está vacía (densidad $f \rightarrow 0$), y por tanto un coeficiente de difusión D infinito, y realiza un camino aleatorio cuando la red está completamente llena ($f \rightarrow 1$). Con estas reglas de colisión de la partícula marcada se pueden obtener muchos resultados sin especificar las reglas de colisión de las partículas del fluido, sino sólo sabiendo las características básicas del modelo: número de bits y tipo de red. Volveremos sobre ello más adelante.

Una vez definida la dinámica de la partícula marcada, el coeficiente de difusión D viene dado por la relación de Einstein [Einstein 65] entre el desplazamiento cuadrático medio y el tiempo transcurrido (supuesto $t \gg 1$):

$$\langle (r_x(t) - r_x(0))^2 \rangle = 2Dt, \quad (8.1)$$

con $r_x(t)$ la coordenada x de la partícula marcada en el instante t . Si tomamos la derivada temporal discreta, Δ_t , definida como:

$$\mathbf{v}(t) = \Delta_t \mathbf{r}(t) \equiv \mathbf{r}(t+1) - \mathbf{r}(t), \quad (8.2)$$

y utilizamos el carácter estacionario del promedio en (8.1), llegamos a un fórmula de Green-Kubo para el coeficiente de difusión [Ernst 91a]:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{\tau=0}^t \langle v_x(\tau) v_x(0) \rangle - \frac{1}{2} \langle v_x(0)^2 \rangle, \quad (8.3)$$

similar a las fórmulas de Green-Kubo para los coeficientes de transporte obtenidas en el capítulo 3. Al sumando se le llama *función de autocorrelación de la velocidad*, abreviada de su nombre anglosajón como VACF, $\phi_x(t)$:

$$\phi_x(t) = \langle v_x(t) v_x(0) \rangle. \quad (8.4)$$

Este será el objeto de estudio de este capítulo y el siguiente. Su comportamiento cualitativo es similar a cualquiera de las funciones de correlación del fluido.

8.3 Ecuaciones de evolución de la partícula marcada

Una vez que hemos dado las reglas de colisión de la partícula marcada podemos efectivamente conocer su trayectoria, que será en general de tipo estocástico, puesto que las reglas de colisión empleadas, las MAXRCR, así lo son. De manera similar a como se hizo para las partículas del fluido, definimos un número de ocupación de la partícula marcada como $\nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$, cuyo valor es 1 si hay partícula marcada en el nodo \mathbf{r} con velocidad \mathbf{c}_i en el tiempo t y 0 en el caso contrario. Sus propiedades de equilibrio son muy sencillas. Puesto que sólo hay una partícula en todo el sistema, el valor medio de ν es:

$$\langle \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \rangle = \langle \nu \rangle = \frac{1}{bV}, \quad (8.5)$$

con V en número de nodos en la red. Asimismo, las correlaciones a igual tiempo son:

$$\begin{aligned} \langle \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_j) \nu(\mathbf{r}', \mathbf{c}_i) \rangle &= \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \nu \rangle \\ \langle \nu(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j) \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \rangle &= \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \nu \rangle (1 - f) \\ \langle \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i) \nu(\mathbf{r}', \mathbf{c}_j) \delta n(\mathbf{r}'', \mathbf{c}_k) \rangle &= \delta_{ij} \delta_{jk} \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \langle \nu \rangle (1 - f). \end{aligned} \quad (8.6)$$

Las correlaciones a dos y tres puntos diferentes se anulan a no ser que todas las posiciones y velocidades sean iguales. Estas propiedades se obtienen teniendo en cuenta que si $\nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i)$ es igual a 1, necesariamente $n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i)$ también es 1, puesto que la partícula marcada es una partícula del fluido que transporta la marca.

En cuanto a la ecuación de evolución de la partícula marcada, es exactamente igual a la de una partícula del fluido, pero reemplazando los números de ocupación del fluido n por números de ocupación de la partícula marcada ν , y con la salvedad de que ahora el operador de colisión depende tanto de n como de ν . Lo denotamos por \bar{I} . La ecuación de evolución se escribe:

$$\nu(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, t + 1) = \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) + \bar{I}(VEC_i | n(t), \nu(t)). \quad (8.7)$$

Esta es una ecuación de evolución *hacia adelante*, porque expresa el número de ocupación en $t+1$ en términos de números de ocupación en t , así que define la dinámica usual del sistema. Sin embargo, para el desarrollo de la teoría necesitaremos también una ecuación de evolución *hacia atrás*, que partiendo de $t = 0$ exprese los números de ocupación en $-t - 1$ en función de los

números de ocupación en $-t$. La dinámica es ahora la inversa: composición de propagación inversa y colisión inversa. Cada paso descrito se escribe como (sólo para $t < 0$):

$$\begin{aligned}\nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, -t) &= \nu'(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, -t) + \bar{I}(\mathbf{c}_i | n'(-t), \nu'(-t)) \\ \nu'(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, -t) &= \nu(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, \mathbf{c}_i, -t + 1) = S_i \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, -t + 1).\end{aligned}\quad (8.8)$$

La combinación de ambas expresiones nos da la *ecuación de evolución hacia atrás*, que resulta ser:

$$\nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, -t - 1) = S_i \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, -t) + \bar{I}(\mathbf{c}_i | S n(-t), S \nu(-t)), \quad (8.9)$$

donde el operador S actúa según:

$$(S\nu)_j = S_j \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_j, t) = \nu(\mathbf{r} + \mathbf{c}_j, \mathbf{c}_j, t). \quad (8.10)$$

En esta ecuación, a diferencia de las ecuaciones de evolución hacia adelante, ecuaciones (2.5) y (8.7), los números de ocupación en el operador de colisión no están evaluados en el nodo \mathbf{r} , sino en los nodos adyacentes al nodo \mathbf{r} .

Algunos comentarios surgen aquí. Los argumentos anteriores para construir una ecuación de evolución hacia atrás son sólo válidas para gases de red con dinámica *determinista e invertible*, donde la ecuación dinámica microscópica es invariante bajo inversión temporal. Este es el caso para el modelo HPP y para el modelo determinista FHP en el que las reglas de colisión se alternan en el tiempo (ver capítulo 2). Sin embargo, la mayoría de los modelos de gases de red tienen reglas de colisión estocásticas, donde *sólo dinámica hacia adelante* puede ser definida, esto es, $v(t) = \mathcal{G}(t)v(0)$. la dinámica hacia atrás se define formalmente a través de:

$$\begin{aligned}\langle v(t)v(0) \rangle &= \langle (\mathcal{G}(t)v(0))v(0) \rangle \\ &= \langle v(0)\tilde{\mathcal{G}}(t)v(0) \rangle \equiv \langle v(0)v(-t) \rangle.\end{aligned}\quad (8.11)$$

En estos casos el nombre de *dinámica hacia atrás*, $v(-t) = \hat{\mathcal{G}}(t)v(0)$ sencillamente significa la *dinámica adjunta* en el sentido del producto escalar (promedio de equilibrio) en la ecuación (8.11). Si la ecuación microdinámica es invariante bajo inversión temporal, la *dinámica adjunta* se reduce a la *dinámica hacia atrás*.

El operador de colisión para la partícula marcada, \bar{I} , requiere también algunos comentarios. Como hay una única partícula marcada en el sistema, el operador \bar{I} ha de ser *lineal* en ν , manteniendo su no linealidad en los números de ocupación de las partículas del fluido, n . El operador de colisión

se puede desarrollar en fluctuaciones alrededor del equilibrio, como se hizo en (5.10):

$$\begin{aligned}\bar{I}(\mathbf{c}_i | \mathbf{n}, \nu) &= \sum_{\lambda=1}^b \frac{1}{(\lambda-1)!} \bar{\Omega}_{i_1 \dots i_\lambda}^{(\lambda)} \nu_{i_1} \delta n_{i_2} \dots \delta n_{i_\lambda} \\ &\equiv \bar{\Omega}_{i_j}^{(1)} \nu_j + \bar{\Omega}_i[\nu n \dots n].\end{aligned}\quad (8.12)$$

En la obtención de esta ecuación hemos usado la relación de equilibrio $\bar{I}(\mathbf{c}_i | \langle \nu \rangle, \langle \mathbf{n} \rangle) = 0$. También se utiliza el convenio de suma y la notación abreviada $\nu_i = \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$, $\delta n_i = \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$. El segundo subíndice de $\bar{\Omega}^{(\lambda)}$ siempre está asociado con un número de ocupación de partícula marcada, mientras que el tercero, cuarto, ... (si existen) se refieren a partículas de fluido. En lo que sigue utilizaremos frecuentemente la notación definida en (8.12) $\bar{\Omega}[\dots]$ para denotar todos los términos en la ecuación de evolución no lineales, que son los que nos darán las secuencias de colisiones correlacionadas. Algunas propiedades de los coeficientes $\bar{\Omega}$ son:

- (P1) $\bar{\Omega}_{i_1 i_2 \dots i_\lambda}^{(\lambda)}$ es simétrico en los índices ($i_2 \dots i_\lambda$) de las partículas de fluido.
- (P2) $\bar{\Omega}_{i_1 \dots i_\lambda}^{(\lambda)}$ se anula si al menos un par del conjunto ($i_1 \dots i_\lambda$) son iguales.
- (P3) $\bar{\Omega}_{i_j}^{(1)} = \bar{\Omega}_{ij}$ es el operador de colisión linealizado, que nos da la aproximación de Boltzmann. Además, $\bar{\Omega}_{ij}$ es simétrico en i y j .

8.4 Teoría cinética de anillo

Una vez obtenidas las propiedades más importantes de la dinámica de la partícula marcada desarrollaremos la teoría cinética propiamente. Se hará en base al propagador cinético para la partícula marcada, definido como:

$$\bar{\Gamma}_{ij}(\mathbf{r}, t) = bV \langle \nu(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \nu(0, \mathbf{c}_j, 0) \rangle, \quad (8.13)$$

con la normalización $\bar{\Gamma}_{ij}(\mathbf{r}, 0) = \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}, 0)$, teniendo en cuenta las propiedades (8.5). En este sentido, el factor bV juega el mismo papel en el propagador cinético para la partícula marcada que el inverso del factor κ en el propagador cinético normal. Su transformada de Fourier se define como:

$$\bar{\Gamma}_{ij}(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \bar{\Gamma}_{ij}(\mathbf{r}, t) = b \langle \nu(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t) \nu^*(\mathbf{k}, \mathbf{c}_j, 0) \rangle, \quad (8.14)$$

y en función del propagador, la VACF se escribe en notación vectorial como:

$$\phi_x(t) = \frac{1}{b} \sum_{\mathbf{r}} c_x \bar{\Gamma}(\mathbf{r}, t) c_x = \frac{1}{b} c_x \bar{\Gamma}(\mathbf{k} = 0, t) c_x. \quad (8.15)$$

La teoría cinética de anillo que desarrollaremos es bastante complicada y la notación bastante compleja. Conlleva asimismo un número de aproximaciones. Por ello antes de continuar vamos a dar una descripción del plan que seguiremos. Hemos hecho un esquema que se representa en la figura 8.2. En él se representan por líneas continuas los desarrollos exactos y por discontinuas las diferentes aproximaciones. Se parte del propagador cinético definido en (8.13), sobre el que se desarrollará toda la teoría. En él se insertan las ecuaciones de evolución hacia adelante y hacia atrás expresadas en (8.7) y (8.9), respectivamente. Ello nos lleva a una ecuación no cerrada para $\bar{\Gamma}$, que expresa $\bar{\Gamma}$ en términos de funciones de correlación a más de dos cuerpos y que por tanto no puede ser resuelta. Sin embargo, a partir de ella podemos obtener el comportamiento exacto para el propagador a tiempo $t = 2$ en los sistemas tridimensionales explicados anteriormente. En particular podemos calcular las correlaciones de tipo geométrico que describíamos y que tienen su origen en las condiciones de contorno. Para cerrar la ecuación que obtuvimos anteriormente introducimos el llamado *esquema de desacoplamiento Gaussiano*. El resultado es una ecuación integral para $\bar{\Gamma}$ cerrada. De entre todos los términos que aparecen en ella nos quedaremos únicamente con aquellos que provienen del desarrollo del operador de colisión hasta orden cuadrático, esto es, los afectados por $\bar{\Omega}^{(2)}$, con lo que obtenemos la *ecuación cinética de anillo* para $\bar{\Gamma}$. Esta es todavía una ecuación integral de la forma $\bar{\Gamma} = \int \bar{\Gamma} \bar{\Gamma}$ que contiene recoliciones dentro de las recoliciones y que se puede resolver de forma exacta para $t = 3$. Por último, realizaremos la aproximación de Boltzmann en los propagadores del integrando, con lo que ignoramos las colisiones correlacionadas que se puedan producir después de la primera y antes de la última colisión correlacionada. Así deduciremos la *ecuación cinética de anillo simple*, que será la que evaluaremos numéricamente y de la que obtendremos su comportamiento a tiempo largos, y, a partir de ella la teoría del acoplamiento de los modos. En este capítulo desarrollaremos la columna de la izquierda de la figura 8.2, dejando para el capítulo siguiente el análisis de los diferentes tiempo, $t = 2$, $t = 3$ y $t \rightarrow \infty$.

Comenzamos escribiendo la ecuación de evolución hacia adelante como:

$$\nu_i(t+1) = S_i^{-1} (\mathbf{1} + \bar{\Omega})_{ij} \nu_j(t) + S_i^{-1} \bar{\Omega}_i [\nu(t) \dots n(t)], \quad (8.16)$$

donde hemos suprimido la dependencia espacial \mathbf{r} . De hecho, esta ecuación es válida tanto en el espacio real como en el espacio de Fourier. En el último,

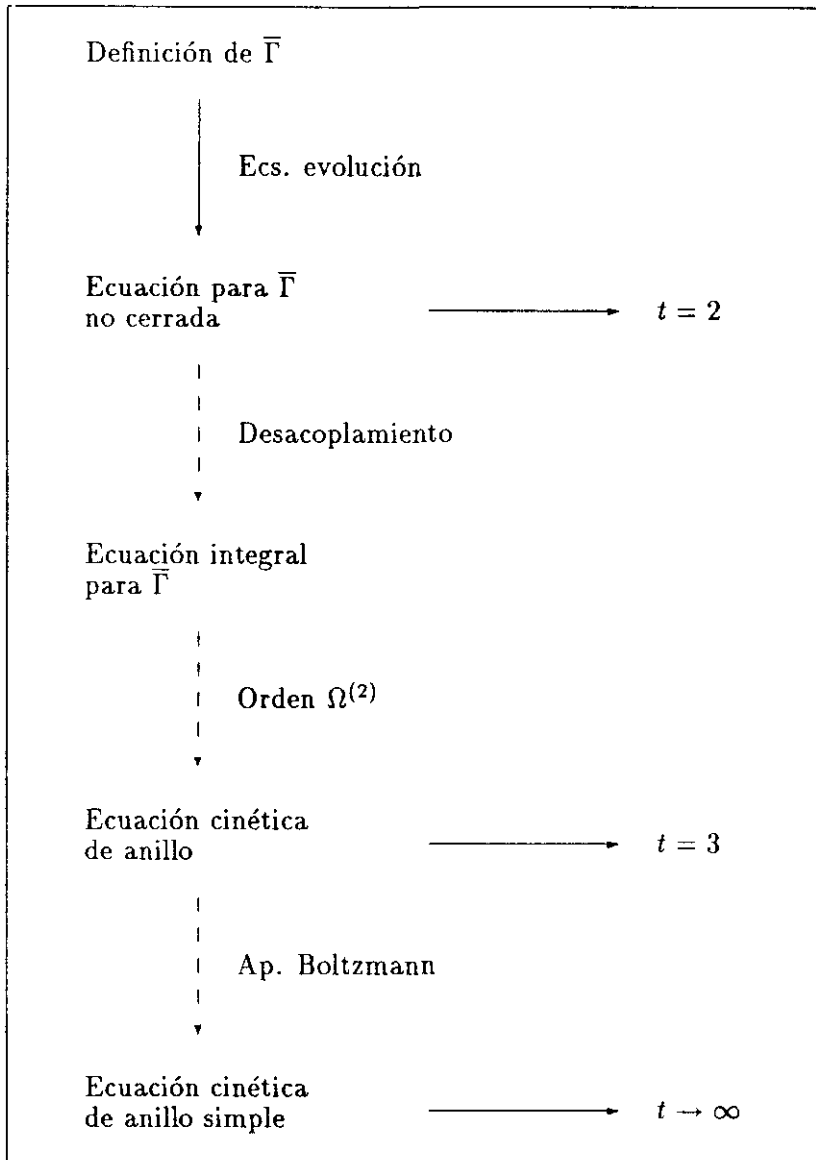


Figura 8.2: Esquema de la teoría cinética de anillo. Se parte de la definición del propagador para concluir en la llamada ecuación de anillo simple. Las flechas continuas representan desarrollos exactos mientras que las discontinuas son aproximaciones

$\nu_i(t)$ representa $\nu(\mathbf{k}, \mathbf{c}_i, t)$ y el término $\bar{\Omega}[\dots]$ es:

$$\bar{\Omega}_i[\nu\dots n] \equiv \sum_{\lambda=2}^b \frac{V^{1-\lambda}}{(\lambda-1)!} \sum_{\mathbf{k}_1\dots\mathbf{k}_\lambda} \delta(\mathbf{k}, \sum_p \mathbf{k}_p) \bar{\Omega}_{i_1\dots i_\lambda}^{(\lambda)} \nu_{i_1}(\mathbf{k}_1, t) \dots n_{i_\lambda}(\mathbf{k}_\lambda, t). \quad (8.17)$$

Además, frecuentemente eliminaremos el subíndice i de ν_i y lo consideraremos un vector de b componentes. Procedemos ahora con la solución de la ecuación (8.17). Para resolverla formalmente, reemplazamos $\nu(t)$ en la parte lineal de la ecuación (8.16) por su expresión en términos de $\nu(t-1)$ y $n(t-1)$ dada por la propia expresión. Así, obtenemos que:

$$\begin{aligned} \nu(t+1) &= S^{-1}(\mathbf{1} + \bar{\Omega}) \left\{ S^{-1}(\mathbf{1} + \bar{\Omega})\nu(t-1) + S^{-1}\bar{\Omega}[\nu\dots n](t-1) \right\} \\ &\quad + S^{-1}\bar{\Omega}[\nu\dots n](t) \\ &= \left[S^{-1}(\mathbf{1} + \bar{\Omega}) \right]^2 \nu(t-1) + \left[S^{-1}(\mathbf{1} + \bar{\Omega}) \right] S^{-1}\bar{\Omega}[\nu\dots n](t-1) \\ &\quad + S^{-1}\bar{\Omega}[\nu\dots n](t). \end{aligned} \quad (8.18)$$

Repetimos esta operación t veces, para obtener la solución formal de (8.16) como:

$$\nu(t) = \bar{\Gamma}^0 \nu(0) + \bar{\Gamma}^0 \otimes S^{-1}\bar{\Omega}[\nu\dots n], \quad (8.19)$$

donde el operador $\bar{\Gamma}^0$ es el propagador cinético de la partícula marcada en la aproximación de Boltzmann, similar al dado en (7.1):

$$\bar{\Gamma}^0(\mathbf{k}, t) = \left[e^{-ik \cdot c} (\mathbf{1} + \bar{\Omega}) \right]^t, \quad (8.20)$$

y la convolución se define a la vista de (8.18) como

$$(f \otimes g)(t) = \sum_{\tau=0}^{t-1} f(t-1-\tau)g(\tau). \quad (8.21)$$

La sustitución de la ecuación (8.19) en la definición del propagador, (8.13), nos da:

$$\bar{\Gamma}(\mathbf{k}, t) = b \langle \nu(\mathbf{k}, t) \nu^\dagger(\mathbf{k}, 0) \rangle = \bar{\Gamma}^0 + b \bar{\Gamma}^0 S^{-1} \otimes \langle \bar{\Omega}[\nu\dots n] \nu^\dagger(0) \rangle, \quad (8.22)$$

donde el vector $\nu^\dagger(\mathbf{k}, 0)$ con componentes $\nu_j^*(\mathbf{k}, 0)$, denota el hermítico de $\nu(\mathbf{k}, t)$. Hemos usado la relación de equilibrio (8.6) $b \langle \nu(\mathbf{k}, 0) \nu^\dagger(\mathbf{k}, 0) \rangle = \mathbf{1}$. En la ecuación (8.22) $\bar{\Omega}[\nu\dots n]$ contiene productos de λ números de ocupación. Por tanto, dicha ecuación no es una ecuación cerrada para $\bar{\Gamma}$, porque expresa una función de correlación (1,1) ($\bar{\Gamma}$) en términos de funciones

de correlación $(\lambda, 1)$, $\langle \nu_1(t) \dots n_\lambda(t) \nu_j^*(0) \rangle$. Estas funciones de correlación se pueden escribir, utilizando la propiedad de que los promedios de equilibrio son estacionarios, como:

$$\langle \nu_1(t) \dots n_\lambda(t) \nu_j^*(0) \rangle = \langle \nu_1(0) \dots n_\lambda(0) \nu_j^*(-t) \rangle. \quad (8.23)$$

Ahora entra en juego la ecuación de evolución hacia atrás (8.9), escrita como:

$$\nu(-t-1) = (\mathbf{1} + \bar{\Omega}^{(1)})S\nu(-t) + \bar{\Omega}[S\nu(-t) \dots Sn(-t)], \quad (8.24)$$

que resolvemos en términos del propagador de Boltzmann adjunto, $\bar{\Gamma}^{0\dagger} = [(\mathbf{1} + \bar{\Omega}^{(1)})S]^t$ como se hizo anteriormente con la ecuación de evolución hacia adelante. La solución es:

$$\nu^\dagger(-t) = \nu^\dagger(0)\bar{\Gamma}^0(t) + \sum_{\tau=0}^{t-1} \bar{\Omega}[S^{-1}\nu^*(-\tau) \dots S^{-1}n^*(-\tau)]\bar{\Gamma}^0(t-\tau-1). \quad (8.25)$$

Definamos ahora el adjunto actuando sobre $\bar{\Omega}[\dots]$ como:

$$\left(\bar{\Omega}^\dagger[S\nu \dots Sn] \right)_i \equiv \bar{\Omega}_i[S^{-1}\nu^* \dots S^{-1}n^*]. \quad (8.26)$$

Podemos sustituir la expresión para el número de ocupación de la partícula marcada en el tiempo $-t$, (8.25), en el promedio (8.23), lo que nos lleva a una expresión para el propagador:

$$\bar{\Gamma}(t) = \bar{\Gamma}^0 + b\bar{\Gamma}^0 S^{-1} \otimes \langle \bar{\Omega}[\nu \dots n] \bar{\Omega}^\dagger[S\nu \dots Sn] \rangle \otimes \bar{\Gamma}^0, \quad (8.27)$$

donde hemos utilizado la relación $\langle \bar{\Omega}[\nu(0) \dots n(0)] \nu^\dagger(0) \rangle = 0$ (consecuencia de la propiedad (P2)) para eliminar los productos cruzados $\bar{\Omega}[\dots]\bar{\Gamma}^0$. La ecuación (8.27) expresa la función de correlación (1,1) como suma de la parte de Boltzmann dada por $\bar{\Gamma}^0$ más términos que contienen funciones de correlación de órdenes más altos (μ, λ) con $\mu, \lambda = 2, \dots, b-1$,

$$\begin{aligned} & \bar{\Gamma}(12 \dots \lambda; 1'2' \dots \mu'; t) \\ &= \left\langle \nu_1(t) \delta n_2(t) \dots \delta n_\lambda(t) [S_1^{-1} \nu_1^*(0) S_2^{-1} \delta n_2^*(0) \dots S_{\mu'}^{-1} \delta n_{\mu'}^*(0)] \right\rangle \end{aligned} \quad (8.28)$$

y por tanto la ecuación (8.27) no es una ecuación cerrada para $\bar{\Gamma}$. El mecanismo de cierre lo da el llamado esquema de desacoplamiento Gaussiano [Kirkpatrick y Ernst 91], cuya idea básica es que las componentes de Fourier de los números de ocupación se distribuyen de manera gaussiana, al menos cuando el vector de ondas es pequeño, como consecuencia del teorema del límite central [Van Kampen]. Con esta aproximación todos los cumulantes

de orden mayor que dos son despreciados, y las funciones de correlación de orden mayor que dos se factorizan en términos de funciones de orden dos. Como consecuencia de esta aproximación, necesariamente la contribución (λ, μ) es no nula sólo si $\lambda = \mu$. En el caso contrario el promedio sería nulo en virtud de las propiedades de equilibrio de los números de ocupación, ecuaciones (3.10) y (8.6). Además, siempre hemos de acoplar $\nu_1(t)$ and $\nu_1^*(0)$ en un único promedio $\langle \nu_1(t)\nu_1^*(0) \rangle$; otros acoplamientos como $\langle \nu_1(t)\delta n_2^*(0) \rangle$, dan contribuciones que son de orden $\mathcal{O}(1/V)$, en virtud de (8.6). Los números de ocupación de las partículas de fluido se pueden acoplar en todos los pares posibles $\langle \delta n_k(t)\delta n_l(0) \rangle$, donde el índice k pertenece al conjunto $\{1, 2, \dots, \lambda\}$ y el índice l a $\{1', 2', \dots, \mu'\}$, de $(\lambda - 1)!$ formas posibles. Acoplamientos de δn dentro del mismo conjunto se anulan inmediatamente en virtud de la propiedad (P2) y de los promedios (3.10). Nótese que la aplicación del esquema de desacoplamiento Gaussiano a (8.22) nos hubiera dado un resultado nulo. Hemos tenido que insertar la ecuación de evolución hacia atrás para poder aplicarlo.

Así pues, el esquema de desacoplamiento Gaussiano da para el término más simple en (8.27), aquel con $\lambda = \mu = 2$ (recuérdese que $\lambda = \mu = 1$ está incluido en la aproximación de Boltzmann),

$$\begin{aligned} & \langle \nu_i(\mathbf{k}, t)n_j(\mathbf{k}_1, t)\nu_k^*(\mathbf{k}', 0)n_l^*(\mathbf{k}', 0) \rangle \\ &= \langle \nu_i(\mathbf{k}, t)\nu_k^*(\mathbf{k}', 0) \rangle \langle n_j(\mathbf{k}_1, t)n_l^*(\mathbf{k}', 0) \rangle \\ &= \langle \nu \rangle V \delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \kappa V \delta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1) \Gamma_{jl}(\mathbf{k}_1, t) \bar{\Gamma}_{ik}(\mathbf{k}, t). \end{aligned} \quad (8.29)$$

Si sólo consideramos este término dentro de todos los posibles en (8.27), llegamos a la *ecuación cinética de anillo*:

$$\bar{\Gamma}_{ij}(t) = \bar{\Gamma}_{ij}^0 + \bar{\Gamma}_{im}^0 S_m^{-1} \otimes \bar{\Omega}_{mi i_2}^{(2)} R_{i_1 i_2, j_1 j_2} \bar{\Omega}_{l_1 j_2}^{(2)} \otimes \bar{\Gamma}_{lj}^0, \quad (8.30)$$

donde $R_{i_1 i_2, j_1 j_2}$ es la *integral de anillo*, que se obtiene multiplicando dos ecuaciones (8.17), considerando sólo los términos $\lambda = 2$, tomando el promedio y factorizando según se escribió en (8.29):

$$R_{i_1 i_2, j_1 j_2}(\mathbf{k}, \tau) = \frac{\kappa}{V} \sum_q \bar{\Gamma}_{i_1 j_1}(\mathbf{q}, \tau) S_{j_1}^{-1}(\mathbf{q}) \Gamma_{i_2 j_2}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) S_{j_2}^{-1}(\mathbf{k} - \mathbf{q}). \quad (8.31)$$

Nótese que sólo los términos con $i_1 \neq i_2$ y $j_1 \neq j_2$ aparecen en (8.31) a causa de la propiedad (P2) de los elementos de $\bar{\Omega}$. La estructura del término de anillo en la ecuación (8.30) es un propagador de Boltzmann, $(\bar{\Gamma}^0)$, una colisión (en este caso descrita por $\bar{\Omega}^{(2)}$), seguida por dos partículas que se propagan independientemente, una marcada (descrita por $\bar{\Gamma} S^{-1}$) y

una del fluido (ΓS^{-1}), para acabar con una recolisión ($\bar{\Omega}^{(2)}$) seguida por una propagación de Boltzmann. Esta es la estructura normal del término de colisión en fluidos continuos [Ernst y Dorfman 79]. Obsérvese que en la integral de anillo está el propio propagador de la partícula marcada $\bar{\Gamma}$. Por tanto, la ecuación (8.30) es una ecuación integral para $\bar{\Gamma}$. Asimismo, en (8.31) también aparece el propagador de las partículas de fluido, que obedece una ecuación similar a (8.30), con ambos propagadores reemplazados por propagadores de partículas de fluido. Por tanto, las partículas de fluido realizan recolisiones descritas de la misma forma.

Cada factor en la convolución de (8.30) implica un paso temporal, de acuerdo con (8.21), esto es, en la evaluación de $\bar{\Gamma}(t)$ sólo necesitamos la integral de anillo hasta $t - 2$. Por tanto, para $t = 1$ no hay términos en la convolución y el propagador está dado exactamente por la expresión de Boltzmann. Para $t = 2$ necesitamos la integral de anillo en $\tau = 0$, que es nula excepto en redes con sólo dos espaciados de ancho. Volveremos sobre ello en detalle en el capítulo siguiente.

Si hubiéramos tomado en la ecuación (8.28) todos los términos en λ y μ , tras aplicar el esquema de desacoplamiento Gaussiano hubiéramos obtenido:

$$\Gamma_{ij}(t) = \bar{\Gamma}_{ij}^0 + \bar{\Gamma}_{im}^0 S_m^{-1} \otimes \sum_{\lambda=2}^{b-1} \frac{1}{(\lambda-1)!} \bar{\Omega}_{m12\dots\lambda}^{(\lambda)} R_{12\dots\lambda,1'2'\dots\lambda'}^{(\lambda)} \bar{\Omega}_{1'1'2'\dots\lambda'}^{(\lambda)} \otimes \bar{\Gamma}_{ij}^0, \quad (8.32)$$

donde la integral $R^{(\lambda)}$ es una extensión de la integral de anillo, y lleva el producto de $(\lambda - 1)$ propagadores Γ de partículas de fluido y un propagador de partícula marcada, $\bar{\Gamma}$,

$$R_{12\dots\lambda,1'2'\dots\lambda'}^{(\lambda)}(\mathbf{k}, t) = (\kappa/V)^{\lambda-1} \times \sum_{k_1\dots k_\lambda} \delta(\mathbf{k}, \sum_p \mathbf{k}_p) \bar{\Gamma}_{11'}(\mathbf{k}_1, t) e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{c}_{1'}} \times \prod_{j=2}^{\lambda} [\Gamma_{jj'}(\mathbf{k}_j, t) e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{c}_{j'}}]. \quad (8.33)$$

Los términos con $\lambda > 2$ no contribuyen a tiempos cortos ($t \leq 2$) en geometrías regulares (sin correlaciones geométricas) ni a tiempos largos, aunque pueden ser relevantes a tiempos intermedios. El término dominante cuando $t \rightarrow \infty$ es aquél con $\lambda = 2$, que es el que da el comportamiento algebraico $t^{-d/2}$ que predice la teoría del acoplamiento de los modos.

Una vez obtenida la expresión del propagador para la partícula marcada, vamos a estudiar la VACF en el marco de esta teoría. Para ello, recordamos la ecuación (8.15), en la que la VACF se escribe como $\bar{\Gamma}(\mathbf{k} = 0, t)$ multiplicado por la componente x de la velocidad. En la expresión (8.30) para

el propagador, tenemos la parte de Boltzmann más las contribuciones de la integral de anillo, que llevan en ambos extremos los propagadores de Boltzmann, (8.19), a vector de ondas $\mathbf{k} = 0$. Para la mayoría de los modelos estudiados, FHP, 8 y 9 bits, FCHC, el vector \mathbf{c} resulta ser un autovector de $\bar{\Gamma}^0(\mathbf{k} = 0)$ por las razones de simetría expuestas en el capítulo 6¹. El cálculo del autovalor, al que llamaremos $1 - w$ está expuesto en el apéndice B. Para las reglas de colisión MAXRCR, es independiente del modelo, de la dimensión y de las reglas de colisión del gas de red subyacente. La explicación [Ernst y Naitoh 91] se basa en la conservación del momento en cualquier colisión. Sean $\{\mathbf{c}\}$ y $\{\mathbf{c}^*\}$ el conjunto de $[p]$ velocidades iniciales y finales, respectivamente en una colisión con p partículas. La velocidad esperada tras la colisión es $(1/p) \sum_i \mathbf{c}_i^*$, de acuerdo a las MAXRCR. Sin embargo, a causa de la conservación del momento, es también igual a $(1/p) \sum_i \mathbf{c}_i$, independientemente de las reglas de colisión del fluido. Ello es cierto incluso para un fluido en el que las partículas del fluido no interaccionan y sólo la marca salta de una partícula a otra. Por tanto, podemos “apagar” las colisiones y calcular w para un fluido no interaccionante. El resultado es un polinomio cuyos coeficientes son números combinatorios que se suman para dar (apéndice B):

$$1 - w = \frac{1 - f}{(b - 1)f} [1 - (1 - f)^{b-1}]. \quad (8.34)$$

Por tanto la parte de Boltzmann de la VACF y del coeficiente de difusión vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \phi_B(t) &= \frac{1}{b} c_x \left(\mathbf{1} + \bar{\Omega}^{(1)} \right)^t c_x = c_0^2 (1 - w)^t \\ D_B &= c_0^2 \left(\frac{1}{w} - \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (8.35)$$

donde c_0 es la velocidad del sonido, definida bajo la ecuación (3.15). Como ya comentamos, aunque la aproximación de Boltzmann predice el comportamiento a largos tiempos de forma incorrecta, su valor para el coeficiente de difusión es muy bueno, con discrepancias con el valor simulado menores del 1% [van der Hoef y Frenkel 91a]. En particular, el valor de Boltzmann para ϕ es exacto para $t = 1, 2$.

Definamos ahora la cantidad $A_{x,kl}$ como la componente x de:

¹Para la dinámica de la partícula marcada \mathbf{c} no es un autovector nulo del operador de colisión, puesto que la velocidad de la partícula marcada no es un invariante de colisión.

$$A_{kl} = \sum_i c_i \bar{\Omega}_{ikl}^{(2)}, \quad (8.36)$$

que asimismo sólo depende del número de bits del modelo y de su densidad para MAXRCR, pero no de la red ni de las reglas de colisión del fluido. Su cálculo se ha hecho explícitamente en el apéndice B y será utilizado en detalle en el capítulo siguiente. Sustituimos ahora el propagador actuando sobre c_x por $\bar{\Gamma}^0(\mathbf{q} = 0, t)\mathbf{c} \equiv g_0(t)\mathbf{c} = (1 - w)^t \mathbf{c}$ y llegamos a:

$$\phi_x(t) = c_0^2 g_0 + b^{-1} g_0 \otimes A_{x,ij} R_{ij,kl}(0) A_{x,kl} \otimes g_0. \quad (8.37)$$

Podemos ahora sumar una de las convoluciones, utilizando que $(g_0 \otimes g_0)(t) = t(1 - w)^{t-1}$, para obtener la VACF en la aproximación de anillo,

$$\phi_x(t) = \phi_B(t) + b^{-1} \sum_{\tau=1}^{t-2} \tau (1-w)^{\tau-1} A_{x,ij} R_{ij,kl}(0, t-\tau-1) A_{x,kl}. \quad (8.38)$$

Para resolver esta ecuación, hemos de obtener primero los propagadores para la partícula marcada, dado por (8.30), y otro similar para el propagador de la partícula de fluido [Kirkpatrick y Ernst 91]. Una vez calculados, se llevan a la ecuación (8.38) para así determinar la VACF.

Como consecuencia de la estructura de la ecuación (8.30), en la que el propagador aparece dentro de la integral, tenemos una ecuación implícita para $\bar{\Gamma}$, y por tanto, tenemos colisiones de anillo *dentro* de las colisiones de anillo. Ello la hace muy difícil de resolver. Una aproximación posible es considerar que las colisiones intermedias no están correlacionadas, sino que son de tipo Boltzmann. Ello nos lleva a sustituir los propagadores en la expresión de la integral de anillo por sus valores de Boltzmann, obteniendo la llamada *integral de anillo simple*,

$$R_{i_1 i_2, j_1 j_2}^0(\mathbf{k}, \tau) = \frac{\kappa}{V} \sum_{\mathbf{q}} \bar{\Gamma}_{i_1 j_1}^0(\mathbf{q}, \tau) S_{j_1}^{-1}(\mathbf{q}) \Gamma_{i_2 j_2}^0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) S_{j_2}^{-1}(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad (8.39)$$

y a la teoría cinética resultante la llamaremos teoría cinética de anillo simple. La ventaja de esta aproximación es que la ecuación para ϕ y para $\bar{\Gamma}$ se convierten en explícitas, puesto que sólo necesitamos Γ^0 y $\bar{\Gamma}^0$, que están dados en (7.1) y (8.13). Como ya veremos en el capítulo siguiente, esta teoría nos da el comportamiento exacto a largos tiempos, permitiéndonos justificar la teoría del acoplamiento de los modos. Asimismo, las evaluaciones numéricas para estudiar la transición del decaimiento exponencial de Boltzmann al algebraico $t^{-d/2}$ se harán en base a esta teoría (capítulo 10).

Hasta aquí el desarrollo de la teoría. En los dos próximos capítulos estudiaremos sus implicaciones y los resultados principales. Concretamente, los límites a cortos y largos tiempos se darán en el capítulo siguiente, mientras que la evaluación numérica de los coeficientes de transporte se analizará en el capítulo 10.

9

Análisis de la teoría cinética de anillo

Una vez desarrollada la teoría cinética de anillo vamos a estudiar sus consecuencias. Primeramente analizaremos el caso de tiempos cortos, con el objetivo de explicar las correlaciones geométricas observadas en sistemas tridimensionales a $t = 2$. Posteriormente estudiaremos la estructura de las colisiones correlacionadas presentes en la teoría, evaluando la integral de anillo para $t = 3$. Finalmente y mucho más interesante es el caso de tiempos largos, $t \rightarrow \infty$, puesto que derivaremos la teoría del acoplamiento de los modos (abreviada MCT). En este capítulo seguiremos trabajando con problemas de difusión, con una partícula marcada sumergida en un fluido.

9.1 Tiempos cortos, correlaciones geométricas

Como ya explicamos, la simulación de sistemas tridimensionales se realiza tomando una red en cuatro dimensiones, la red FCHC, con los puntos $(\pm 1, \pm 1, 0, 0)$, $(\pm 1, 0, \pm 1, 0)$, $(\pm 1, 0, 0, \pm 1)$, $(0, \pm 1, \pm 1, 0)$, $(0, \pm 1, 0, \pm 1)$, $(0, 0, \pm 1, \pm 1)$, proyectándola a tres dimensiones e imponiendo condiciones periódicas en la cuarta dimensión, u , tras dos espaciados de la red. Visto como un sistema tridimensional, consta de partículas con velocidades $(\pm 1, \pm 1, 0)$, $(\pm 1, 0, \pm 1)$, $(0, \pm 1, \pm 1)$, $(\pm 1, 0, 0)$, $(0, \pm 1, 0)$ y $(0, 0, \pm 1)$. Los canales con $|c| = 1$ están doblemente ocupados, pero son distinguibles de acuerdo a su componente u ($u = \pm 1$). Nosotros mantendremos la imagen cuatridimensional. Un ejemplo similar con el que se puede comprender esta construcción se obtiene a partir de la red triangular FHP, haciéndola periódica en la dirección y tras dos espaciados. Lo ilustramos en la figura 9.1, donde, con las

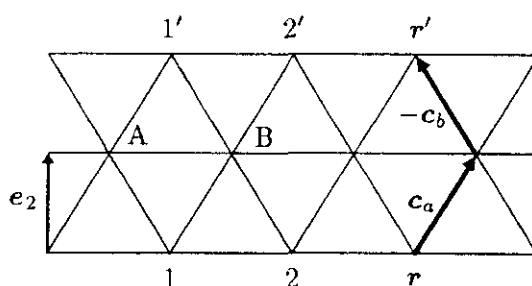


Figura 9.1: Geometría del modelo FHP con condiciones de contorno periódicas tras 2 espaciados en la dirección y . Los puntos 1 y 1', 2 y 2', r y r' están identificados.

condiciones periódicas expuestas, se identifican los puntos 1 y 1', 2 y 2', o, en general puntos que satisfagan

$$r' = r \bmod (c_a - c_b). \quad (9.1)$$

La proyección de los vectores de esta red a un sistema unidimensional nos da partículas cuyas velocidades son 1, 1/2, -1 y -1/2. Los canales con velocidades $\pm 1/2$ están doblemente ocupados, porque tanto las partículas con $c_y = \sqrt{3}/2$ como aquellas con $c_y = -\sqrt{3}/2$ van a parar a esos canales.

Con esta geometría podemos explicar la existencia de correlaciones tras dos pasos de tiempo. Supongamos que dos partículas, una de ellas marcada, se encuentran el punto $r = A$ en el tiempo $t = 0$, con direcciones c_2 y c_6 . La evolución consiste en una colisión seguida de la propagación. Por tanto las partículas colisionan (intercambian la marca) en el tiempo $t = 0' = 0 + \epsilon$ con ($\epsilon \rightarrow 0$). Posteriormente se propagan hasta los puntos 1' y 1 respectivamente. Pero estos puntos están identificados a causa de las condiciones de contorno, por lo que las partículas se vuelven a encontrar en $t = 1$. La dinámica continúa, y las partículas chocan de nuevo en $t = 1'$. La evolución se completa con una nueva propagación, que nos lleva a $t = 2$. Por tanto, se han producido recolisiones en *dos* pasos temporales. Si el sistema no fuera periódico tras dos espaciados de la red, las partículas habrían de colisionar en 1 y 1' con terceras partículas para volver al punto B, donde se produciría la recolisión. En tiempo invertido en este caso sería $t = 3$. El mecanismo de recolisiones a través de la frontera es el que crea las correlaciones. Son de tipo geométrico, no dinámico, puesto que son las condiciones de contorno las que las producen. En la visión unidimensional del modelo (o tridimensional, para el modelo FCHC) estas colisiones se deben a la doble ocupación de ciertos canales.

El exceso sobre el valor de Boltzmann de la función de correlación debido a las recoliciones a $t = 2$ fue encontrado numéricamente en la VACF por Frenkel y colaboradores en las simulaciones de sistemas tridimensionales [van der Hoef y Frenkel 91a]. No tenían lugar en sistemas cuatridimensionales puros y por ello su presencia se achacó a las condiciones de contorno. Ellos realizaron simulaciones numéricas muy precisas de la función de correlación a tiempo $t = 2$. Nosotros obtendremos *exactamente* tal función de correlación y la compararemos con sus resultados numéricos.

Comenzaremos escribiendo la VACF tras dos pasos temporales, (8.15), utilizando el carácter estacionario del estado de equilibrio:

$$\phi_x(2) = V \sum_{\mathbf{r}, ij} c_{ix} c_{jx} \langle \nu_i(\mathbf{r}, 1) \nu_j(0, -1) \rangle. \quad (9.2)$$

Observemos que si escribimos la VACF en función de $\nu_i(\mathbf{r}, 2)$ e insertamos dos veces la ecuación de evolución hacia adelante, obtenemos un número enorme de términos, del orden de b^b , 10^4 y 10^5 para los modelos FHP de 6 y 7 bits respectivamente. Utilizando las ecuaciones de evolución hacia adelante y hacia atrás generamos únicamente del orden de b^2 términos, muchos de los cuales, además, serán nulos. Por tanto, utilizamos la ecuación de evolución (8.7) para $\nu_i(\mathbf{r}, 1)$ y la ecuación de evolución hacia atrás (8.9) para $\nu_j(0, -1)$, con lo que la ecuación (9.2) resulta,

$$\begin{aligned} \phi_x(2) = & V \sum_{\mathbf{r}, ij} c_{ix} c_{jx} \left\{ (\delta_{ik} + \bar{\Omega}_{ik}^{(1)}) (\delta_{jl} + \bar{\Omega}_{jl}^{(1)}) \langle S_i^{-1} \nu_k(\mathbf{r}) S_l \nu_l(0) \rangle \right. \\ & + \sum_{\lambda, \mu=2}^b \frac{1}{(\lambda-1)! (\mu-1)!} \bar{\Omega}_{i_1 \dots i_\lambda}^{(\lambda)} \bar{\Omega}_{j_1 \dots j_\mu}^{(\mu)} \\ & \left. \times \langle S_i^{-1} \nu_{i_1}(\mathbf{r}) \dots S_i^{-1} \delta n_{i_\lambda}(\mathbf{r}) S_{j_1} \nu_{j_1}(0) \dots S_{j_\mu} \delta n_{j_\mu}(0) \rangle \right\}, \quad (9.3) \end{aligned}$$

con todos los números de ocupación evaluados en $t = 0$. Si tenemos en cuenta la propiedad (P2), definida en el capítulo 9 y los promedios de los números de ocupación a igual tiempo, (8.6), concluimos que los términos en (9.3) con $\lambda \neq \mu$ son nulos. Por tanto, podemos sustituir μ por λ y sumar únicamente sobre $\lambda = 2, \dots, b$. Asimismo, hemos separado la parte de Boltzmann, $(\mathbf{1} + \bar{\Omega})$, que, puesto que c es autovector de $\bar{\Omega}$ con autovalor $-w$, nos da:

$$\phi_B(2) = c_0^2 (1 - w)^2. \quad (9.4)$$

Consideremos a continuación el término $\lambda = 2$ en el desarrollo (9.3) donde, de acuerdo con la propiedad (P2) se ha de verificar que $i_1 \neq i_2$ y $j_1 \neq j_2$. Contiene el promedio

$$\begin{aligned} & \langle \nu_{i_1}(\mathbf{r} - \mathbf{c}_i) \delta n_{i_2}(\mathbf{r} - \mathbf{c}_i) \nu_{j_1}(\mathbf{c}_{j_1}) \delta n_{j_2}(\mathbf{c}_{j_2}) \rangle \\ & = \left\{ \kappa \langle \nu \rangle \delta_{i_1 j_1} \delta_{i_2 j_2} + \langle \nu \rangle^2 (1 - f)^2 \delta_{i_1 j_2} \delta_{i_2 j_1} \right\} \delta(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i + \mathbf{c}_{j_1}) \delta(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i + \mathbf{c}_{j_2}), \quad (9.5) \end{aligned}$$

que se ha evaluado de acuerdo a los valores medios dados en (8.6). Esta igualdad es exacta. El término que contiene $\langle \nu \rangle^2$ es de orden $1/V$ respecto al que contiene $\langle \nu \rangle$, y será despreciado. Las deltas de Kronecker espaciales en (9.5) se pueden escribir como $\delta(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i + \mathbf{c}_{j_1}) \delta(\mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{j_2})$, que implica que $\mathbf{c}_{j_1} = \mathbf{c}_{j_2}$ para sistemas mayores de dos espaciados en todas las dimensiones. Sin embargo, de acuerdo con la propiedad (P2), $\bar{\Omega}_{i_1 j_1}$ es cero. El mismo argumento se aplica a todos los términos con $\lambda > 2$. Por tanto, la aproximación de Boltzmann, la única superviviente en (9.3) es exacta para $t = 2$ en sistemas mayores que 2 espaciados.

Supongamos ahora que se consideran los sistemas antes expuestos, con dos espaciados de ancho en una de las dimensiones. Entonces, la condición de las deltas de Kronecker en (9.5), $\delta(\mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{j_2})$, se puede satisfacer a través de la condición periódica. En el ejemplo ilustrado en la figura 9.1, la delta es no nula con vectores dirigidos verticalmente. Por ejemplo, si consideramos $\mathbf{c}_{j_1} = \mathbf{c}_2$ y $\mathbf{c}_{j_2} = \mathbf{c}_6$, puesto que los puntos 1 y 1' están identificados, tenemos que $\delta(\mathbf{c}_2, \mathbf{c}_6) = 1$. Los pares posibles que dan contribución no nula son: $(\mathbf{c}_2, \mathbf{c}_6)$, $(\mathbf{c}_6, \mathbf{c}_2)$, $(\mathbf{c}_3, \mathbf{c}_5)$ y $(\mathbf{c}_5, \mathbf{c}_3)$, y, en general, todos aquellos que satisfagan la condición

$$\mathbf{c}_{j_1} = \mathbf{c}_{j_2} \text{ mod } (2\mathbf{e}), \quad (9.6)$$

donde $2\mathbf{e}$ es el periodo espacial ($2\mathbf{e} = \mathbf{c}_a - \mathbf{c}_b$ en el caso representado en la figura 9.1). Si definimos la VACF de exceso como

$$\delta\phi_\alpha(t) = \phi_\alpha(t) - \phi_B(t), \quad (\alpha = x, y, z, u) \quad (9.7)$$

la contribución de todos los pares $(\mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{j_2})$ que satisfacen (9.6) es:

$$\delta\phi_x(2) = \frac{\kappa}{b} \sum_{j_1 j_2} \left(\sum_i c_{ix} \bar{\Omega}_{i j_1 j_2}^{(2)} \right)^2 \delta(\mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{j_2}), \quad (9.8)$$

que resulta ser siempre positiva.

Los términos con $\lambda > 2$ en (9.3) se pueden analizar de manera similar, con el resultado: $\delta(\mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{j_2}) \dots \delta(\mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{j_\lambda}) \delta(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i + \mathbf{c}_{j_1})$. Este conjunto de deltas

no puede ser satisfecho a la vez puesto que ello implicaría tres vectores \mathbf{c}_j distintos llevando al mismo punto. Consecuentemente la ecuación (9.8) se convierte en una expresión *exacta* para la VACF de exceso. Como se ha visto claramente en su derivación, el origen de $\delta\phi$ no es dinámico, sino un puro efecto geométrico de las particulares condiciones de contorno de nuestra red.

Para el modelo FCHC proyectado a tres dimensiones, definido en una red x, y, z, u de tamaño $L \times L \times L \times 2$ existen 12 pares de vectores que satisfacen la relación (9.6), todos aquellos con las mismas componentes x, y, z , y que difieren en la componente u . La cantidad $\sum_i c_{i\alpha} \bar{\Omega}_{i,j_1 j_2}^{(2)}$ que aparece en (9.8) es la componente α de la cantidad $\mathbf{A}_{j_1 j_2}$ definida en (8.36), que se ha calculado en el apéndice B con el resultado

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{kl} &= \frac{1}{2}(\mathbf{c}_k + \mathbf{c}_l)g(f, b) + \frac{1}{2}(\mathbf{c}_k - \mathbf{c}_l)h(f, b), & k \neq l \\ \mathbf{A}_{kl} &= 0, & k = l, \end{aligned} \quad (9.9)$$

con g y h dados en términos de α y β , definidos en (B.17) ($g = \alpha + \beta$ y $h = \alpha - \beta$), siendo su valor

$$\begin{aligned} g(f, b) &= - [(b-1)(b-2)f^2]^{-1} \\ &\quad \times \{2 - bf - b(1-f)^{b-1} + (b-2)(1-f)^b\} \\ h(f, b) &= - [(b-1)f]^{-1} \{1 - (1-f)^{b-1}\}, \end{aligned} \quad (9.10)$$

que sólo dependen de la densidad y del número de bits. Podemos ahora realizar la suma en (9.8), obteniendo el resultado *exacto* para la VACF de exceso en el modelo FCHC,

$$\delta\phi_\alpha(2) = \frac{1}{6}f(1-f)[g(f, 24)]^2 \quad (\alpha = x, y, z), \quad (9.11)$$

para las dimensiones no periódicas x, y, z y obteniendo

$$\begin{aligned} \delta\phi_u(2) &= \frac{1}{2}f(1-f)[h(f, 24)]^2 \\ \phi_u(2) &= \frac{1}{2}(1-w)^2/(1-f), \end{aligned} \quad (9.12)$$

para la dirección periódica u .

En la figura 9.2 hemos dibujado la VACF de exceso sobre Boltzmann normalizada, $\delta\phi_x(2)/c_0^2$ frente a la densidad f . Los círculos son las simulaciones numéricas [van der Hoef y Frenkel 91a], y los cuadrados son simulaciones numéricas a las densidades $f = 0.1$ y $f = 0.2$ con muy alta precisión. La línea de puntos muestra el valor de Boltzmann, $\phi_B(2)/c_0^2 = (1-w)^2$. Para densidades bajas ($f \lesssim 0.4$) la contribución de Boltzmann es mucho mayor que las correcciones, $\phi_B(2) \gg \delta\phi_x(2)$. Para densidades intermedias,

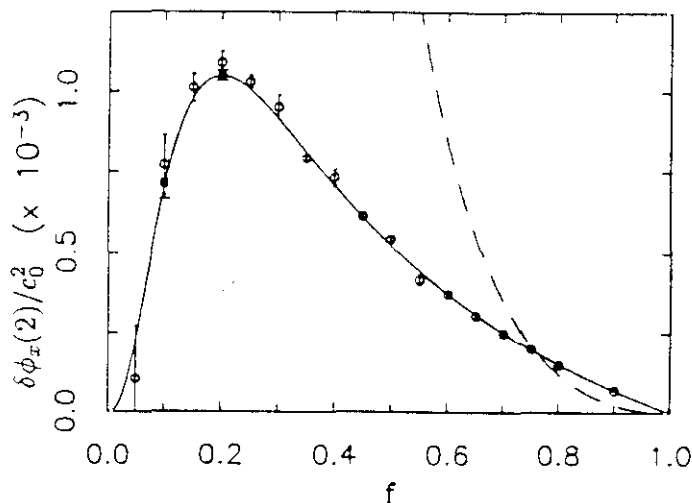


Figura 9.2: VACF de exceso para el modelo FCHC. La línea de puntos representa la aproximación de Boltzmann, la línea continua es la VACF de exceso tras dos pasos temporales, mientras que los puntos son los datos experimentales.

$0.5 < f < 0.9$ ambas contribuciones son del mismo orden. A densidades altas, $f \gtrsim 0.95$ la corrección $\delta\phi_x(2)$ excede el valor de Boltzmann al menos en un factor 10.

La ecuación (9.12) nos da la VACF para la dirección periódica. Es diferente a la VACF en cualquiera de las otras direcciones x, y, z , porque la geometría impuesta rompe la isotropía del tensor de segundo orden $\langle v_\alpha(2)v_\beta(0) \rangle$ con $(\alpha, \beta) = \{x, y, z, u\}$, aunque como objeto tridimensional $(\alpha, \beta) = \{x, y, z\}$ es todavía isotropo. Como consecuencia, el coeficiente de difusión en la cuarta dimensión (no física), D_u , es diferente del coeficiente de difusión físico $D_x = D_y = D_z$ si se tienen en cuenta las colisiones correlacionadas.

También hemos analizado los términos en (9.3) con $\lambda > 2$, y hemos visto que son nulos. Sin embargo, si consideramos una geometría con *dos* direcciones periódicas tras dos pasos, esto es, sistemas con $L \times L \times 2 \times 2$, el término que involucra a $\bar{\Omega}^{(3)}$ también aparece.

En conclusión, la geometría usual para simular sistemas tridimensionales isotropos induce pequeñas correcciones tanto en las funciones de correlación como en los coeficientes de transporte, aunque cuantitativamente son efectos minúsculos. Son de tipo geométrico (efectos de tamaño finito) debidos a la

pequeña anchura del sistema en la cuarta dimensión.

9.2 Tiempos intermedios

En esta sección pretendemos analizar la estructura general de la integral de anillo simple, (8.39). En ella los propagadores de la partícula marcada, $\bar{\Gamma}$, y de la partícula de fluido, Γ , han sido sustituidos por sus aproximaciones de Boltzmann. Ello simplifica la forma de la teoría de anillo a una colisión seguida por una evolución de las partículas tipo Boltzmann, esto es, descorrelacionadas, para acabar con otra colisión (ver figura 8.1). La integral de anillo simple, R^0 , para vector de ondas nulo, se escribe como:

$$R_{i_1 i_2, j_1, j_2}^0(\tau) = \frac{\kappa}{V} \sum_{\mathbf{q}} \left(e^{-iq \cdot \mathbf{c}} (\mathbf{1} + \bar{\Omega}) \right)_{i_1 j_1}^{\tau} e^{-iq \cdot \mathbf{c}_{j_1}} \left(e^{iq \cdot \mathbf{c}} (\mathbf{1} + \Omega) \right)_{i_2 j_2}^{\tau} e^{iq \cdot \mathbf{c}_{j_2}}, \quad (9.13)$$

con ayuda de las expresiones de los propagadores Γ^0 y $\bar{\Gamma}^0$ dadas en (7.1) y (8.19) respectivamente. Podemos extraer los operadores $(\mathbf{1} + \bar{\Omega})$ y $(\mathbf{1} + \Omega)$ y realizar la suma en \mathbf{q} , teniendo en cuenta que

$$V^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{c} - \mathbf{c}')} = \delta(\mathbf{c}, \mathbf{c}') \quad (9.14)$$

obteniendo:

$$\begin{aligned} R_{i_1 i_2, j_1 j_2}(\tau) &= \kappa (\mathbf{1} + \bar{\Omega})_{i_1 k_1} (\mathbf{1} + \bar{\Omega})_{k_1 k_2} \cdots (\mathbf{1} + \bar{\Omega})_{k_{\tau-1} j_1} \\ &\quad \times (\mathbf{1} + \Omega)_{i_2 l_1} (\mathbf{1} + \Omega)_{l_1 l_2} \cdots (\mathbf{1} + \Omega)_{l_{\tau-1} j_2} \\ &\quad \times \delta(\mathbf{c}_{i_1} + \mathbf{c}_{k_1} + \cdots + \mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{i_2} + \mathbf{c}_{l_1} + \cdots + \mathbf{c}_{j_2}). \end{aligned} \quad (9.15)$$

La función delta que aquí aparece es no nula si

$$\mathbf{c}_{i_1} + \mathbf{c}_{k_1} + \mathbf{c}_{k_2} + \cdots + \mathbf{c}_{j_1} = \mathbf{c}_{i_2} + \mathbf{c}_{l_1} + \mathbf{c}_{l_2} + \cdots + \mathbf{c}_{j_2}, \quad (9.16)$$

esto es, si el conjunto de velocidades forma un polígono cerrado. Esta es la *condición de anillo*, que expresa que las dos partículas que se consideran han de estar en el mismo nodo en el tiempo inicial ($\tau = 0$) y en el tiempo final, τ aunque entre medias lleven trayectorias independientes. El número de maneras de elegir las 2τ velocidades que aparecen en (9.16) de entre b elecciones cada una es $b^{2\tau}$ y por tanto, ese es el número de sumas a realizar. Sin embargo sólo aquellos que satisfacen (9.16) han de tenerse en cuenta. Aquí analizaremos la integral de anillo cuando $\tau = 0$, $\tau = 1$, que corresponden a $\phi(t)$ con $t = 2$ y $t = 3$ respectivamente.

Cuando $\tau = 0$, la aplicación de (9.15) da:

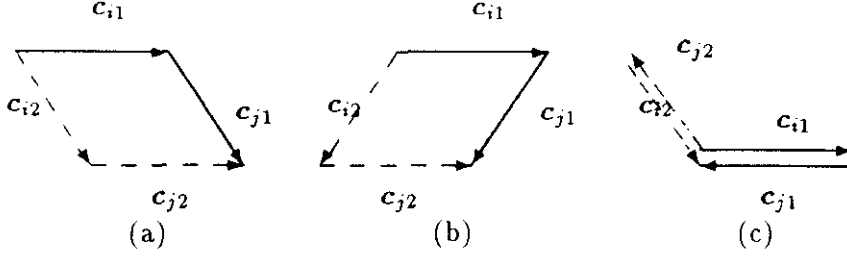


Figura 9.3: Posibles caminos que dan contribución no nula a los diagramas de anillo. Para c_{i_1} fijado, hay dos posibles diagramas (a), dos (b) y cinco (c)

$$R_{i_1 i_2, j_1 j_2}^0 = \kappa \delta_{i_1 j_1} \delta_{i_2 j_2} \delta(\mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{j_2}), \quad (9.17)$$

que es precisamente la condición que se estudió en la sección 9.1. Así pues la integral de anillo también describe las correlaciones geométricas en sistemas con periodicidad 2.

El análisis cuando $\tau = 1$ es ligeramente más complicado. Reescribamos de nuevo la integral de anillo simple, (9.15) para $\tau = 1$:

$$R_{i_1 i_2, j_1 j_2}(1) = \kappa (\mathbf{1} + \bar{\Omega})_{i_1 j_1} (\mathbf{1} + \Omega)_{i_2 j_2} \times \delta(\mathbf{c}_{i_1} + \mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{j_2} + \mathbf{c}_{i_2}). \quad (9.18)$$

Para tener una contribución no nula, hemos de garantizar que $i_1 \neq i_2$ y $j_1 \neq j_2$, porque $R_{i_1 i_2, j_1 j_2}(1)$ va contraída con $\bar{\Omega}_{i_1 i_2}^{(2)}$, y de acuerdo con (P2) sería nula en caso contrario. La condición de polígono cerrado, (9.16) es para este caso $\mathbf{c}_{i_1} + \mathbf{c}_{j_1} = \mathbf{c}_{i_2} + \mathbf{c}_{j_2}$. En la figura 9.3 se muestran los posibles casos para el modelo FHP con 6 bits. Los casos (a) y (b) se expresan como $\delta_{i_1 j_2} \delta_{j_1 i_2}$, mientras que el (c) es $\delta_{i_1, j_1+3} \delta_{i_2, j_2+3}$. Por tanto, la condición de polígono cerrado es

$$\delta(\mathbf{c}_{i_1} + \mathbf{c}_{j_1}, \mathbf{c}_{j_2} + \mathbf{c}_{i_2}) = \delta_{i_1 j_2} \delta_{j_1 i_2} + \delta_{i_1, j_1+3} \delta_{i_2, j_2+3} - \delta_{i_1, j_2, i_2+3, j_1+3}^{(4)}, \quad (9.19)$$

donde el símbolo $\delta^{(4)}$ es igual a 1 si todos sus índices son iguales y 0 en caso contrario. Corrige del conteo doble de ciertas trayectorias que acaban en el origen. Si introducimos (9.19) en (9.18) y recordamos la expresión para la VACF, dada en (8.38), llegamos a que el exceso sobre el valor Boltzmann de la VACF es:

$$\delta\phi_x(3) = \frac{\kappa}{b} \left[\sum_{i \neq j} A_{x, ij} A_{x, ji} \Omega_{ij} \bar{\Omega}_{ij} + \Omega_{14} \bar{\Omega}_{14} \left(\sum_i (A_{x, i+3})^2 - \sum_{i \neq j} (A_{x, ij})^2 \right) \right]. \quad (9.20)$$

Para continuar necesitamos la expresión explícita tanto de los coeficientes A como de $\bar{\Omega}$ y Ω . Las expresiones de A se han dado en (9.9) y resultan ser independientes del modelo si se consideran las reglas de colisión MAXRCR. Los operadores de colisión linealizados sí dependen de las reglas de colisión del fluido, aunque se tomen reglas MAXRCR para las partículas marcadas. No evaluaremos aquí la expresión (9.20) porque nuestro objetivo no era dar un valor cuantitativo para $\phi(3)$, sino ver como las recoliciones aparecen en la teoría y ello ha quedado reflejado en (9.18).

9.3 Tiempos largos: teoría del acoplamiento de los modos

La última sección de este capítulo es sin duda una de las más interesantes. En ella vamos a derivar la teoría del acoplamiento de los modos (MCT), de la que sólo se tenía una argumentación puramente fenomenológica, aunque daba muy buenos resultados a la vista de las simulaciones numéricas. A partir de la MCT mostraremos que las funciones de correlación decaen con $t^{-d/2}$, y que en dos dimensiones los coeficientes de transporte divergen como $\log t$.

Partimos de la expresión para la VACF dada por la teoría de anillo simple, ecuación (8.38) en la que reemplazamos la integral de anillo por su aproximación de Boltzmann, a la que llamaremos R^0 , que se obtiene sustituyendo los propagadores por sus valores de Boltzmann:

$$\phi_x(t) = \phi_B(t) + b^{-1} \sum_{\tau=1}^{t-2} \tau(1-w)^{\tau-1} A_{x,ij} R_{ij,kl}^0(0, t-\tau-1) A_{x,kl}. \quad (9.21)$$

Como mostraremos más adelante la integral de anillo tiene un decaimiento temporal de tipo algebraico, mientras que $(1-w)^t$ decrece rápidamente con un tiempo de relajación del orden de $t_0 \simeq 1/|\log(1-w)|$ (del orden de 1 para densidades mayores que $f = 0.5$ en los modelos FHP y FCHC). Por tanto, para $t \gg t_0$ la integral de anillo $R^0(0, t-\tau-1)$ se puede aproximar por $R^0(0, t)$ y la suma sobre τ de $\tau(1-w)^{\tau-1}$ se realiza, dando w^{-2} . Por tanto, el comportamiento de la VACF a tiempos largos está dado por:

$$\phi_x(t) \simeq (bw^2)^{-1} A_{x,ij} R_{ij,kl}^0(0, t) A_{x,kl}. \quad (9.22)$$

Analicemos ahora sólo la integral de anillo simple, dada por (8.39) como:

$$R_{ij,kl}^0(\mathbf{k}, \tau) = \frac{\kappa}{V} \sum_{\mathbf{q}} \bar{\Gamma}_{ik}^0(\mathbf{q}, \tau) S_{\mathbf{k}}^{-1}(\mathbf{q}) \Gamma_{jl}^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \tau) S_{\mathbf{l}}^{-1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}). \quad (9.23)$$

En ella podemos sustituir los propagadores por su descomposición espectral. La descomposición espectral de Γ^0 se ha estudiado en el capítulo 7. Se escribió explícitamente en (7.6) y contenía $(b-d-1)$ modos cinéticos y $d+1$ hidrodinámicos, de ellos dos sonoros y $d-1$ modos de cizalla, con las características expuestas en la sección 7.1. La descomposición espectral de $\bar{\Gamma}^0$ incluye un único modo lento, relacionado con la conservación del número de partículas marcadas, única cantidad conservada en la dinámica. Lo escribimos como $\psi_i^{(0)s}(\mathbf{k}) = b^{-1/2}$ debidamente normalizado, con difusividad $z^s(\mathbf{k}) = -Dk^2$ cuando $k \rightarrow 0$, siendo D el coeficiente de autodifusión dado en la ecuación (8.35). Hay también $(b-1)$ modos cinéticos que decaen en un tiempo medio igual al tiempo medio entre colisiones sufridas por partículas marcadas.

Como ya hicimos en el capítulo 7, para determinar el comportamiento a tiempos largos de la integral de anillo, en la descomposición espectral de Γ^0 y $\bar{\Gamma}^0$ sólo consideraremos los modos lentos, etiquetados por μ para el propagador del fluido Γ^0 y por s para $\bar{\Gamma}^0$. En esta aproximación podemos escribir la integral de anillo a partir de (8.30) con las descomposiciones espectrales de Γ^0 y $\bar{\Gamma}^0$ como:

$$R_{ij,kl}^0(\mathbf{k}, t) = \frac{\kappa}{V} \sum_q \sum_\mu \psi_i^s(\mathbf{q}) \psi_j^\mu(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \times \exp[z_s(\mathbf{k})t + z_\mu(\mathbf{k}-\mathbf{q})t] \psi_k^s(\mathbf{k}) \psi_l^\mu(\mathbf{k}-\mathbf{q}). \quad (9.24)$$

Para continuar con el análisis, volvamos a escribir la expresión del propagador de la partícula marcada $\bar{\Gamma}$, dado en la ecuación (8.30), en el límite a largos tiempos y pequeños vectores de ondas:

$$\bar{\Gamma}_{ij}(\mathbf{k} = 0, t) \simeq (1/\bar{\Omega}^{(1)})_{ii'} \bar{\Omega}_{i'i_1i_2}^{(2)} R_{i_1i_2,j_1j_2}^0(0, t) \bar{\Omega}_{j'_1j_1j_2}^{(2)} (1/\bar{\Omega}^{(1)})_{j'_j}, \quad (9.25)$$

donde se ha seguido la misma línea de razonamiento que en la obtención de (9.22). El término de Boltzmann, dado en (8.30), ha sido ignorado porque es exponencialmente decreciente. Hemos de notar aquí que la ecuación (9.25) es sólo válida en el subespacio ortogonal al modo conservado $\psi^s(0) = \psi^{(0)s} = b^{-1/2}$, el análogo para el propagador de la partícula marcada al definido en la ecuación (7.8) para el propagador cinético. De otro modo, (9.25) sería divergente. Si insertamos la descomposición espectral de R^0 , ecuación (9.24) en la expresión de $\bar{\Gamma}$ (9.25), obtenemos productos del tipo $\bar{\Omega}_{ijk}^{(2)} \psi_j^{(0)s} \psi_k^{(0)\mu}$. En el apéndice C se ha probado la relación al orden más bajo en κ ,

$$\bar{\Omega}_{ijk}^{(2)} \psi_j^{(0)s} \psi_k^{(0)\mu} = -\frac{\dagger}{f} \bar{\Omega}_{ij} \psi_j^{(0)s} \psi_j^{(0)\mu}, \quad (9.26)$$

que es válida siempre que $\psi^{(0)s}$ y $\psi^{(0)\mu}$ sean invariantes de colisión de la dinámica de la partícula marcada y del fluido respectivamente. Esta identidad es válida para cualquier gas de red, independientemente de su geometría o sus reglas de colisión siempre que el momento y el número de partículas sean conservadas.

Podemos combinar (9.5) con (9.25) para eliminar los factores $\bar{\Omega}$ en el denominador de (9.25) y llegar a la expresión a largos tiempos del propagador:

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}_{ij}(0, t) \simeq & \left(\frac{1-f}{Vf} \right) \sum_{q, \mu} \psi_i^{(0)s}(\mathbf{q}) \psi_i^{(0)\mu}(-\mathbf{q}) \\ & \times \exp[z_s(\mathbf{q})t + z_\mu(\mathbf{q})t] \psi_j^{(0)s}(\mathbf{q}) \psi_j^{(0)\mu}(-\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (9.27)$$

donde la suma sobre μ se ha restringido a modos hidrodinámicos al orden más bajo en k . Si lo aplicamos a la obtención de la VACF, obtenemos:

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \frac{1}{V} \sum_{\mu} \sum_{\mathbf{q}} |A^{\mu}(\mathbf{q})|^2 e^{[z_s(\mathbf{q})+z_\mu(\mathbf{q})]t} \\ A^{\mu}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\frac{1-f}{bf}} \sum_j c_{jx} \psi_j^{(0)s}(\mathbf{q}) \psi_j^{(0)\mu}(-\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (9.28)$$

Los coeficientes $A^{\mu}(\mathbf{q})$ tienen la forma estandar de los de la teoría del acoplamiento de los modos: la proyección de una corriente, c_x , sobre un producto de modos con vector de ondas opuesto. Un cálculo explícito para las amplitudes de la MCT nos da, utilizando las expresiones (7.13), (7.14) de los modos al orden más bajo,

$$\begin{aligned} A^{\sigma}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\frac{1-f}{2bf}} \sigma c_0 \hat{q}_x \\ A^l(\mathbf{q}) &= \sqrt{\frac{1-f}{bf}} c_0 \hat{q}_{\perp l, x} \end{aligned} \quad (9.29)$$

con lo que la VACF a largos tiempos es:

$$\begin{aligned} \langle v_x(t) v_x(0) \rangle &= \frac{(1-f)c_0^2}{bfV} \sum_q \left[\left(\frac{d-1}{d} \right) e^{-(D+\nu)q^2 t} \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{d} \cos(c_0 q t) e^{-(D+\frac{1}{2}\Gamma)q^2 t} \right]. \end{aligned} \quad (9.30)$$

El primer término representa la contribución del acoplo de los $d-1$ modos de cizalla con el modo de difusión de la partícula marcada, mientras que el

segundo es el acoplamiento con el par de modos sonoros, cuya parte imaginaria compleja conjugada se suma para dar el $\cos(c_0qt)$. Consideremos primero la contribución del modo de cizalla a (9.30). En el límite termodinámico, cuando el número de modos $V \rightarrow \infty$, la suma de \mathbf{q} sobre la primera zona de Brillouin (1BZ) puede ser reemplazada por una integral, esto es,

$$V^{-1} \sum_{\mathbf{q} \in 1BZ} e^{-\alpha q^2 t} \sim \frac{v_0}{(2\pi)^d} \int_{1BZ} d\mathbf{q} e^{-\alpha q^2 t} \sim v_0 (4\pi\alpha t)^{-d/2} \quad (9.31)$$

donde v_0 es el volumen de la celda unidad de la red directa ($v_0 = \sqrt{3}/2$ para la red triangular). Para tiempos largos, sólo una pequeña región alrededor de $\mathbf{q} = 0$ contribuye, y la cola a largos tiempos dominante en la VACF en (9.30) es:

$$\phi_x(t) = \frac{(1-f)c_0^2 v_0}{bf[4\pi(\nu + D)]^{d/2}} t^{-d/2} \quad (t \rightarrow \infty), \quad (9.32)$$

y particularizando para la red triangular bidimensional, tenemos,

$$\phi_x(t) = \frac{(1-f)c_0^2 \sqrt{3}}{16bf\pi(\nu + D)} \frac{1}{t} \quad (t \rightarrow \infty). \quad (9.33)$$

Para sistemas pequeños la diferencia entre la suma en \mathbf{q} y la integral en \mathbf{q} representa una corrección de tamaño finito que ha sido analizado analíticamente y numéricamente para fluidos continuos [Erpenbeck y Wood] como en gases de red [Naitoh *et al* 91b].

A continuación consideremos la contribución de los modos sonoros a (9.30). En el límite termodinámico la integral sobre \mathbf{q} que contiene al coseno da una función hipergeométrica confluyente [Naitoh *et al* 90], que decae de forma exponencial en dimensiones impares ($d = 1, 3, \dots$) mientras que para dimensiones pares ($d = 2, 4, \dots$) decae algebraicamente como $\mathcal{O}(t^{-d})$. Representa un término asintótico subdominante, y da una contribución despreciable para todos los tiempos de interés. Sin embargo, en sistemas pequeños (del orden de 1000 nodos), las dos sumas discretas en \mathbf{q} en (9.30), y en particular el término del modo sonoro, dan grandes desviaciones de los resultados de sistemas infinitos. Las predicciones teóricas para estos efectos de tamaño finitos están en muy buen acuerdo con las simulaciones en sistemas pequeños [Naitoh *et al* 91a].

Antes de ver las implicaciones físicas de esta ecuación hemos de hacer una serie de comentarios. Para las funciones de correlación que determinan los coeficientes de transporte del fluido (las viscosidades), la descomposición

espectral de la integral de anillo simple, (9.24), se escribe únicamente en función de los modos del fluido: los de cizalla y los sonoros. Entonces, los exponentes de la ecuación (9.30) pasan a ser $2\nu q^2$ y $2\Gamma q^2$, por lo que los coeficientes son $(\nu t)^{-1}$ y $(\Gamma t)^{-1}$ [Naitoh *et al* 90]. Escribiremos su expresión explícita en el capítulo siguiente, cuando lo comparemos con el resultado de la integración numérica de la integral de anillo. Por otro lado, también los modos espúreos dan contribución a las colas a largos tiempos. En los fluidos no se acoplan a los modos hidrodinámicos por estar evaluados en diferentes vectores de ondas, aunque sí se acoplan entre sí, dando una contribución $3/\sqrt{D_\perp D_\parallel}$ a la cola a tiempos largos (el factor 3 proviene de la existencia de tres modos espúreos mientras que D_\perp y D_\parallel son las componentes de la difusividad espúrea, dadas en (6.29) y (6.30)). En la VACF estos modos no contribuyen, porque el modo de difusión de partícula marcada y el modo espúreo tienen diferente simetría y la amplitud resultante, (9.29), es nula.

La ecuación (9.33) para la VACF muestra la cola $1/t$ a largos tiempos. Ello implica que los coeficientes de transporte, en este caso el coeficiente de difusión, son divergentes:

$$D \sim \sum_0^\infty \phi_x(t) \sim \lim_{t \rightarrow \infty} \log t. \quad (9.34)$$

Cuando se trabaja con sistemas finitos y a tiempos finitos el problema desaparece porque entonces sólo es necesario integrar hasta $t = t_{\text{simul}}$, obteniéndose una dependencia temporal del coeficiente de difusión $D(t) \sim \log t$. Esta divergencia es muy lenta, como se verá en el capítulo siguiente. Para solventar estos problemas se ha recurrido a una teoría autoconsistente en la que los coeficientes de transporte se expresan como [Naitoh *et al* 90]

$$D(t) = \int_{\tau_0}^t d\tau \frac{1}{(D(\tau) + \nu(\tau))\tau}, \quad (9.35)$$

donde τ_0 es una límite temporal inferior. Así se obtiene que las funciones de correlación decaen algo más rápidamente, como $1/t\sqrt{\log(t/t_s)}$. Este régimen es el llamado de *tiempos superlargos*, y se alcanza cuando $t \gtrsim t_s$. El tiempo característico t_s ha sido estimado en $10^{10}t_{mf}$, donde t_{mf} es del orden del tiempo libre medio (del orden de 1 a densidades típicas). El régimen de tiempos superlargos se ha observado numéricamente [van der Hoef y Frenkel 91b]. Por tanto, la forma de $\phi(t)$ dada en (9.33) es sólo válida para tiempos largos. Existe finalmente, otro régimen [Leegwater 91] [Leegwater y Szamel 91], llamado *tiempos extremadamente largos*, en el que

la dependencia con t es también $1/t\sqrt{\log(t/t_e)}$ pero en el que los coeficientes varían respecto a los del régimen de tiempos superlargos. Se alcanza no antes de $10^{1000}t_{mf}$.

Aunque la forma de $\phi(t)$ dada por la ecuación (9.33) es válida sólo para tiempos largos, resultados de simulación muestran que el comportamiento $t^{-d/2}$ se alcanza tras muy pocos pasos temporales. En particular, para el modelo FCHC proyectado a tres dimensiones, $\phi(t)$ se ajusta aparentemente a $t^{-3/2}$ tras sólo 4 pasos temporales a densidad $f = 0.75$ [van der Hoef y Frenkel 91a]. Lo mismo ocurre en el modelo FHP-III a la densidad $f = 0.75$ donde el decaimiento $1/t$ aparece para $t \geq 5$ [Frenkel y Ernst], y para el modelo FCHC en cuatro dimensiones donde se alcanza para $t = 4$ cuando $f = 0.80$ [Dijkstra 91]. Recordamos que la aproximación de Boltzmann es exacta hasta $t = 2$, y por ello no parece quedar mucho sitio para un régimen intermedio entre el exponencial de Boltzmann y el algebraico $t^{-d/2}$. Tan sólo a densidades bajas el régimen asintótico se alcanza más lentamente. Para $f = 0.1$ en el modelo FCHC se tardan 10 pasos temporales en alcanzar el régimen $t^{-3/2}$ [van der Hoef y Frenkel 90].

En cuanto a la amplitud de la cola a tiempos largos, la ecuación (9.33), cuando se evalúa con los coeficientes de transporte dados por la aproximación de Boltzmann, coincide perfectamente con los valores obtenidos en las simulaciones en 1, 2 y 3 dimensiones [Naitoh *et al* 91b], [Frenkel y Ernst], [van der Hoef y Frenkel 91a]. Sin embargo, para el modelo FCHC en cuatro dimensiones las discrepancias pueden ser hasta del 60% en el coeficiente de $1/t^2$, aunque el régimen $1/t^2$ se alcanza clara y rápidamente [Dijkstra *et al* 92].

10

Análisis numérico de la teoría cinética de anillo

10.1 Introducción

Este capítulo completa de forma natural los dos anteriores. En el capítulo 8 desarrollamos la teoría cinética de anillo y en el 9 obtuvimos los límites a cortos ($t = 2, 3$) y largos ($t \rightarrow \infty$) tiempos. Queda por analizar el régimen intermedio, en particular como se produce la transición entre el decaimiento exponencial a tiempos cortos y el algebraico a tiempos largos. La teoría cinética de anillo da una expresión para el régimen intermedio, aunque es tan complicada que no se puede resolver de manera analítica, ni siquiera en la aproximación de anillo simple. Ello se debe a que el número de términos que se han de analizar crece como b^{2t} . Una evaluación numérica parece entonces inevitable, con el objeto de obtener la función de correlación en el régimen de tiempos intermedios para posteriormente sumarla y calcular los coeficientes de transporte.

Volveremos aquí al estudio de las funciones de correlación densidad-densidad de fluido, que han sido el objeto de estudio de esta tesis excepto en los dos capítulos anteriores. A partir de ella obtendremos los valores de las viscosidades predichos por la teoría de anillo simple. Aunque no hay disponibles en la literatura cálculos precisos para la función de correlación densidad-densidad, sí existen para sus integrales, las viscosidades [d'Humières y Lallemand 87],[Kadanoff et al] y especialmente [Gerits]. Compararemos los resultados de nuestra teoría con los resultados numéricos, y veremos que la teoría cinética de anillo da cuenta de más del 60% de la diferencia entre los coeficientes de transporte en la aproximación de Boltz-

mann y los obtenidos por simulación. Por los razonamientos expuestos al final del capítulo 9 hemos de tener en cuenta la longitud de las simulaciones, y sumaremos las funciones de correlación sólo hasta el tiempo de simulación. De otra forma la comparación entre la teoría y los resultados numéricos no tendría ningún sentido.

En los dos capítulos anteriores hemos desarrollado la teoría cinética para problemas de difusión. Como hemos dicho, en este capítulo volveremos al propagador cinético, $\Gamma(\mathbf{k}, t)$: estudiaremos fluctuaciones densidad–densidad del fluido. La teoría cinética presentada se adapta con pequeñas modificaciones al caso de fluidos. Daremos un resumen de ella en la sección 10.2. En particular, obtendremos la ecuación integral de anillo simple para el fluido, similar a (9.23), con el propagador $\bar{\Gamma}^0$ sustituido por Γ^0 . Esta ecuación será integrada numéricamente, reemplazando la suma sobre \mathbf{q} por una integral. Los detalles serán expuestos en la sección 10.3. Por último, en la sección 10.4 mostraremos y discutiremos los resultados numéricos obtenidos.

10.2 Teoría cinética de anillo para fluidos

Como ya vimos en el capítulo 3 donde derivamos las ecuaciones de evolución, los coeficientes de transporte se escriben en términos de la función de correlación Γ , que para modelos atórmicos (5.8) es:

$$\Gamma_{ij}(\mathbf{r}, t)\kappa = \langle \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \delta n(0, \mathbf{c}_j, 0) \rangle. \quad (10.1)$$

El objeto de estudio de este capítulo son ciertos elementos de Γ_{ij} , las funciones de correlación, definidas como:

$$\phi^a(t) = \kappa^{-1} \sum_{\mathbf{r}} j_i^a \langle \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) \delta n(0, \mathbf{c}_j, 0) \rangle j_j^a = j^a \Gamma(\mathbf{k} = 0, t) j^a, \quad (10.2)$$

donde las corrientes j^a dependen de la función de correlación (o análogamente, del coeficiente de transporte) a estudiar. Por conveniencia normalizaremos las corrientes j^a como $j^a j^a = 1$, de forma que se verifique que $\phi^a(0) = 1$, de acuerdo con la propiedad de normalización de Γ (6.2). Para la función de correlación relacionada con la viscosidad de cizalla, $a = \nu$, y la de volumen $a = \zeta$ (ecuaciones (3.77)), tenemos las corrientes:

$$\begin{aligned} j^\nu &= \frac{2}{\sqrt{3}} c_x c_y \\ j^\zeta &= \sqrt{\frac{14}{3}} \left(\frac{1}{2} c^2 - c_0^2 \right), \end{aligned} \quad (10.3)$$

que difieren de las dadas en (3.77) en los factores de normalización (nótese que para modelos con una única velocidad —FHP 6bits— tenemos $c_0 = 1/\sqrt{d}$ y por tanto $j^\zeta = 0$ y $\phi^\zeta(t) = 0$). A partir de las expresiones (10.3) podemos definir los coeficientes de transporte dependientes del tiempo:

$$\begin{aligned}\nu(t) &= \frac{1}{8} + \frac{1}{4} \sum_{\tau=1}^t \phi^\nu(\tau) \\ \zeta(t) &= \frac{1}{28} + \frac{1}{14} \sum_{\tau=1}^t \phi^\zeta(\tau).\end{aligned}\quad (10.4)$$

En cuanto a la teoría cinética para $\Gamma(\mathbf{k}, t)$ [Kirkpatrick y Ernst 91], partimos de su definición, (10.1). Insertamos la ecuación de evolución para $\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t)$, (2.5), en la que ya no aparecen los operadores para la partícula marcada $\bar{\Omega}$, sino los operadores para el fluido Ω . Posteriormente utilizamos la estacionaridad y la ecuación de evolución hacia atrás, similar a (8.9), para llegar a una expresión equivalente a (8.27), relacionando Γ con funciones de correlación de orden superior. El esquema de desacoplamiento Gaussiano para $\lambda = \mu = 2$ nos da ahora el análogo de (8.29):

$$\begin{aligned}\langle n_i(\mathbf{k}, t) n_j(\mathbf{k}_1, t) n_k^*(\mathbf{k}', 0) n_l^*(\mathbf{k}', 0) \rangle \\ = V^2 \kappa^2 \Gamma_{ik}(\mathbf{k}, t) \Gamma_{jl}(\mathbf{k}_1, t) \delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}') \\ + V^2 \kappa^2 \Gamma_{il}(\mathbf{k}, t) \Gamma_{jk}(\mathbf{k}_1, t) \delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}')\end{aligned}\quad (10.5)$$

que nos lleva a una ecuación cinética de anillo para $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}, t)$ como:

$$\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}^0 + \Gamma_{im}^0 S_m^{-1} \otimes \Omega_{m i_1 i_2}^{(2)} R_{i_1 i_2, j_1 j_2} \Omega_{j_1 j_2}^{(2)} \otimes \Gamma_{lj}^0, \quad (10.6)$$

donde Γ^0 es el propagador cinético en la aproximación de Boltzmann y la convolución se define en (8.21). La integral de anillo, R , se diferencia de la dada en (8.31) en que ambos propagadores son ahora del fluido,

$$R_{ij,kl}(\mathbf{k}, \tau) = \frac{\kappa}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \Gamma_{ik}(\mathbf{q}, \tau) S_k^{-1}(\mathbf{q}) \Gamma_{jl}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) S_l^{-1}(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad (10.7)$$

aunque la estructura general es la misma. Para prácticamente todos los modelos, incluyendo el FHP, las corrientes j^a definidas en (10.3) son autovalores de $\Gamma^0(0, t)$ con autovalor λ_a , como se probó para los modelos FHP en el capítulo 6. Por tanto, la sustitución de (10.6) en (10.2) nos da:

$$\phi^a(t) = \phi_0^a(t) + \sum_{\tau=1}^{t-1} \tau (1 - \lambda_a)^{\tau-1} A_{ij}^a R_{ij,kl}(0, t - \tau - 1) A_{kl}^a, \quad (10.8)$$

donde $A_{a,ij}$ es una generalización de (8.36) definida como:

$$A_{a,ij} \equiv j_k^a \Omega_{kij}^{(2)} \quad (10.9)$$

con el convenio de suma, y $\phi_B^a(t)$ es el valor de Boltzmann de la función de correlación normalizada:

$$\phi_B^a(t) = (1 - \lambda_a)^t \quad (10.10)$$

cuya suma nos da los coeficientes de transporte del capítulo 6. Por último, hacemos en (10.8) la simplificación del anillo simple, reemplazando Γ en la integral de anillo R por su aproximación de Boltzmann, Γ^0 . La ecuación (10.7) con Γ^0 en lugar de Γ es el punto de partida para la evaluación numérica de la teoría cinética de anillo. Posponemos los detalles de la integración a la sección 10.4. Antes analizaremos los regímenes a cortos y largos tiempos.

El análisis para $t = 3$ que corresponde a la integral de anillo en $\tau = 1$ se hace igual que en la sección 9.2. En particular, la ecuación (9.19) es válida aunque (9.20) no lo es, porque se han aplicado propiedades de simetría de los coeficientes A_x que no verifican los coeficientes A_ν ni A_c . Los coeficientes Ω y $\Omega^{(2)}$ se pueden obtener a partir de la ecuación (5.18) con el resultado para el operador de colisión linealizado,

$$\Omega_{1i} = (-2c - d, c + d, c - d, -2c + d, c - d, c + d) \quad (10.11)$$

y A_a para la función de correlación de cizalla,

$$A_\nu = \begin{pmatrix} 0 & a & -a & 0 & a & -a \\ a & 0 & 0 & a & -b & 0 \\ -a & 0 & 0 & -a & 0 & b \\ 0 & a & -a & 0 & a & -a \\ a & -b & 0 & a & 0 & 0 \\ -a & 0 & b & -a & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.12)$$

con los elementos:

$$\begin{aligned} a &= \frac{3}{2}f(1-f)^2, & b &= \frac{3}{2}(1-f)^2(1-2f) \\ c &= \frac{1}{2}f(1-f)^3, & d &= f^2(1-f)^2. \end{aligned} \quad (10.13)$$

Recordamos que Ω_{ij} es una matriz cíclica, (6.14), $\Omega_{ij} = \Omega_{1,i-j}$. Los coeficientes c y d son las contribuciones a Ω de las colisiones binarias y ternarias respectivamente. La sustitución de (9.19) en (9.18) con la utilización de los coeficientes dados en (10.11) nos da:

$$\phi^\nu(3) = \phi_0^\nu(3) + 8\kappa \left[a^2(5c^2 + 2d^2 - 4dc) + \frac{1}{4}b^2(2c - d)^2 \right]. \quad (10.14)$$

Un análisis similar para el modelo FHP-III, donde hay que contar algunos diagramas más que los representados en la figura 9.3 debido a la presencia de partículas en reposo, muestra que,

$$\begin{aligned} \phi^\nu(3) &= \phi_0^\nu(3) + \frac{1}{4}\kappa^2(1 - 2f)^2 \\ &\quad \times [2224\kappa^5 - 4620\kappa^4 + 3595\kappa^3 - 1340\kappa^2 + 246\kappa - 16] \\ \phi^\zeta(3) &= \phi_0^\zeta(3) + \frac{7}{4}\kappa^2(1 - 2f)^2 \\ &\quad \times [1264\kappa^5 - 2304\kappa^4 + 1498\kappa^3 - 458\kappa^2 + 69\kappa - 4]. \end{aligned} \quad (10.15)$$

Es importante notar la presencia del factor $(1 - 2f)$ tanto en $\phi^\nu(3)$ como en $\phi^\zeta(3)$, que las anula a densidad $f = 0.5$. Aparece en estos modelos por ser autoduales, esto es, invariantes bajo la transformación partículas \leftrightarrow huecos. Este factor aparece a todo tiempo en las funciones de correlación, porque se extrae como factor común de $\Omega^{(2)}$, y por lo tanto de A_a . Volveremos sobre ello tras el análisis a largos tiempos. La contribución de anillo a tiempo $t = 3$ representa un 1% como máximo del valor de Boltzmann para el modelo FHP-I. Sin embargo, para el modelo FHP-III las correlaciones de anillo, $\phi_R^\nu(3)$ de la función de correlación de cizalla pueden llegar a ser mucho mayores que el propio valor de Boltzmann, $\phi_B^\nu(3)$. Todo ello se aprecia en la figura 10.1 donde hemos dibujado las contribuciones de Boltzmann (línea continua) y de anillo (discontinua) a la función de correlación de cizalla. En un intervalo grande de densidades, $f_0 < f < 1 - f_0$ con $f_0 \simeq 0.23$, el autovalor λ_ν es negativo, y el factor $(1 - \lambda_\nu)^t$ oscila alrededor de cero. Exactamente a las densidades $f = f_0$ y $f = 1 - f_0$ la función de correlación $\phi_B^\nu(t) = 0$ para todos los tiempos $t \geq 1$. Por tanto el coeficiente de transporte viene dado en la aproximación de Boltzmann por $\phi(0)$. En ese punto y sus cercanías la contribución de anillo es mucho mayor que el término de Boltzmann, aunque esto no tiene efecto en el coeficiente de transporte que está dominado por la parte propagante, igual a $1/2$ con la normalización utilizada. Para la función de correlación de la viscosidad de volumen $\phi^\zeta(3)$ este efecto no es tan fuerte, porque $\phi_B^\zeta(3)$ no se llega a anular nunca, aunque a densidades $f \simeq 0.35$ y 0.65 tenemos que $\phi_B^\zeta(3)/\phi_R^\zeta(3) \simeq 1.2$.

El análisis a tiempos largos de la integral de anillo simple es bastante sencillo a la vista de la sección 9.3. Partimos del análogo de la ecuación (9.22), que se obtiene a partir de (10.8) para tiempos grandes comparados con el tiempo medio entre colisiones, t_{mf} ,

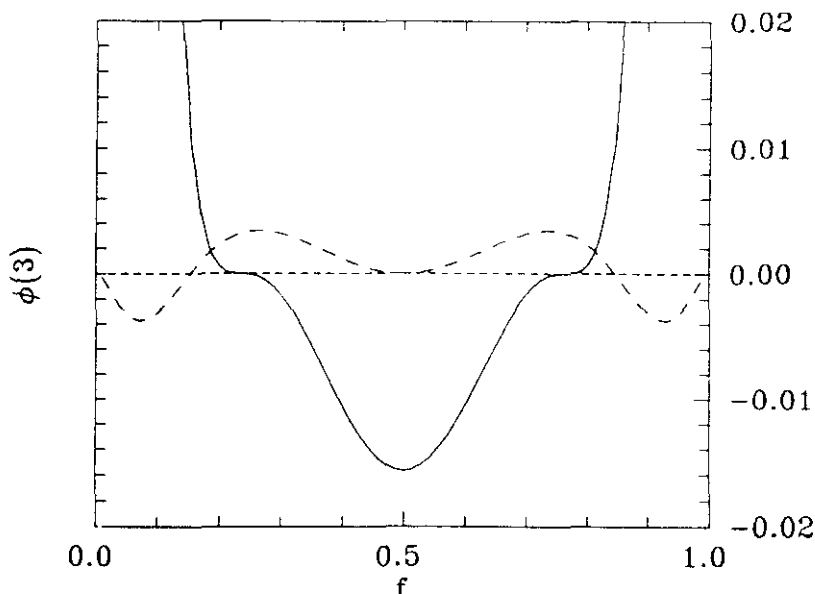


Figura 10.1: Funciones de correlación de cizalla para $t = 3$ en el modelo FHP-III. La línea continua es la aproximación de Boltzmann, $\phi_B^\alpha(3)$ mientras que la discontinua es aproximación de anillo, $\phi_R^\alpha(3)$. Para densidad $f \simeq 0.23$ la parte de Boltzmann es nula.

$$\phi^\alpha(t) \simeq \frac{1}{\omega_a^2} A_{a,ij} R_{ij,kl}^0(0,t) A_{a,kl}. \quad (10.16)$$

La descomposición espectral de R^0 se hace únicamente en términos de modos del fluido y no de modos de la partícula marcada. Entonces los modos ψ^s en (9.27) se reemplazan por modos hidrodinámicos $\psi^{(0)\mu'}$. El equivalente de (9.26) es ahora:

$$\Omega_{ijk}^{(2)} \psi_j^{(0)\mu} \psi_k^{(0)\mu'} = -\frac{1-2f}{\kappa} \Omega_{ij}^{(1)} \psi_j^{(0)\mu} \psi_j^{(0)\mu'}, \quad (10.17)$$

que nos lleva al resultado de la teoría del acoplamiento de los modos para ϕ^α :

$$\begin{aligned} \phi^\alpha(t) &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mu\mu'} |A_{\mu\mu'}^\alpha(\mathbf{q})|^2 e^{[z_\mu(\mathbf{q})+z_\nu(\mathbf{q})]t} \\ A_{\mu\mu'}^\alpha(\mathbf{q}) &= \frac{1-2f}{\sqrt{f(1-f)}} \sum_i j_i^\alpha \psi_i^{(0)\mu}(\mathbf{q}) \psi_i^{(0)\mu'}(-\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (10.18)$$

La integración sobre \mathbf{q} nos da la parte dominante de la función de correlación [Naitoh *et al* 90],

$$\phi^\nu(t) = \frac{2^{-8} (1-2f)^2}{\pi\sqrt{3} f(1-f)} \left[\frac{1}{\nu} + \frac{1}{\Gamma} + \frac{3}{\sqrt{D_{\parallel}D_{\perp}}} \right] \frac{1}{t}, \quad (10.19)$$

y $\phi^\zeta(t) = 4\phi^\nu(t)/7$. El resultado de la ecuación (10.19) es independiente del modelo utilizado (dentro de la familia FHP). Presenta el decaimiento $1/t$ que lleva a la divergencia de los coeficientes de transporte. Muestra también que para $f = 0.5$, la cola a largos tiempos es nula, debido a la presencia del factor $(1 - 2f)$. Este resultado ha sido deducido para largos tiempos. Sin embargo, para el modelo FHP-III la contribución de anillo a $f = 0.5$ es nula para todo tiempo, puesto que se puede extraer como factor común de $\Omega^{(2)}$, estando presente a todo tiempo. Como consecuencia, a $f = 0.5$ la cola a largos tiempos es *exactamente* nula y las desviaciones respecto al valor de Boltzmann están dadas por secuencias de colisiones correlacionadas más complicadas que el anillo simple. Aquí los términos que provienen de $\Omega^{(\lambda)}$ con $\lambda \geq 3$ son los dominantes.

En los resultados numéricos de la sección siguiente veremos como la función de correlación se aproxima al resultado de MCT, ecuación (10.19) cuando el tiempo crece.

10.3 Esquema numérico

En la sección 9.2 ya adelantamos un posible método para la evaluación numérica de la integral de anillo. Consiste en generar por pares *todos los caminos posibles* que comienzan en el mismo punto de longitud $\tau + 1$. En número de tales pares es $b^{2(\tau+1)}$. Aquellos que no acaban en el mismo punto hacen no nula la delta de Kronecker en (9.15) y dan contribución a la integral de anillo. Este esquema es computacionalmente muy costoso, y para $t \gtrsim 7$ se hace impracticable. Sin embargo, lo utilizaremos para tiempos pequeños para comprobar que los resultados obtenidos con el esquema numérico son correctos.

Siguiendo una estrategia diferente hemos desarrollado un esquema numérico que crece con el tiempo sólo linealmente con t , o incluso con $\log t$. Para ello, primeramente reemplazamos la suma sobre los vectores \mathbf{q} por una integral sobre la primera zona de Brillouin: $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow (2\pi)^{-2} \int_{\text{1BZ}} d\mathbf{q}$.¹ Ahora tenemos que realizar esta integral. Nosotros seguiremos una fórmula de integración Gaussiana [Press *et al* 89], en la que se eligen una serie de

¹Esta sustitución es sólo válida cuando $V \rightarrow \infty$. Para sistemas pequeños, la suma finita toma en consideración de forma muy precisa los efectos de tamaño finito [Naitoh *et al* 91b].

puntos en el espacio \mathbf{k} , se evalúa el integrando en esos puntos y se suman con determinados pesos Gaussianos. Para cada punto del espacio \mathbf{k} calculamos la matriz $b \times b [S^{-1}(\mathbb{1} + \Omega)]$, que es multiplicada τ veces para dar el propagador de Boltzmann, $\Gamma_{ij}^0(\mathbf{k}, \tau)$ que entra en la integral de anillo simple. Lo mismo se hace para el vector $-\mathbf{k}$. A continuación se multiplican los propagadores $\Gamma_{ij}^0(\mathbf{k}, \tau)\Gamma_{kl}^0(-\mathbf{k}, \tau)$ y se suman con su correspondiente peso Gaussiano al valor de la integral. Se repite esta operación para todos los vectores \mathbf{k} en la primera zona de Brillouin, con lo que obtenemos la integral de anillo simple, $R_{ik,jl}^0$, una matriz de $b \times b \times b \times b$ elementos. A continuación se contrae con los operadores $\Omega^{(2)}$ y con las corrientes j^a . Finalmente la convolución con $\tau(1 - \lambda_a)^{\tau-1}$ nos da la función de correlación en el tiempo t , $\phi_R^a(t)$. Su suma con la parte de Boltzmann, $\phi_B^a(t)$ da la función total $\phi^a(t)$.

Este procedimiento es claramente de orden t en el tiempo, puesto que implica el producto de $2t$ matrices. Sin embargo, para tiempos muy largos, podemos utilizar otro esquema que nos da el valor de la integral de anillo para tiempos de la forma 2^τ , con τ entero. Se obtiene simplemente multiplicando la matriz $\Gamma(\tau)$ consigo misma para obtener $\Gamma(2\tau)$ y así sucesivamente. El costo computacional de este procedimiento es $\log_2 t$. Sólo tiene el inconveniente de que da la integral de anillo a tiempos que son potencias de 2, y la convolución en (10.8) no se puede realizar. Sin embargo, este procedimiento nos da naturalmente valores muy altos de τ . Podemos utilizar entonces la ecuación (10.16), válida a tiempos largos, para obtener la función de correlación. Los huecos entre 2^τ y $2^{\tau-1}$ se pueden llenar de manera eficiente con resultados de $\Gamma(\tau)$ para valores menores de τ . Nosotros en la práctica utilizaremos ambos métodos, el lineal en t para tiempos cortos, y así poder hacer la convolución, y el logarítmico para alcanzar tiempos muy largos.

La forma de la región de integración, la primera zona de Brillouin, es un hexágono con la misma orientación que el hexágono que generan los vectores $\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_6$. Está compuesto por seis triángulos, delimitados por $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_{i+1}$, $i = 1, \dots, 6$. Debido a la simetría rotacional de los operadores de colisión Ω , la integral sobre cada uno de ellos es igual. Nosotros no utilizaremos esta simetría. Sí que utilizaremos la invariancia de la integral bajo reflexiones en los ejes x e y para escribir que la integral total es cuatro veces la parte real de la integral sobre el primer cuadrante y sólo calcular la integral en dicho cuadrante. Esto ahorra un factor 4 en el tiempo de cálculo. Puesto que los modos hidrodinámicos decaen típicamente como $\exp(-k^2 t)$, para largos tiempos las contribuciones más importantes provienen de los puntos cercanos al centro de la primera zona de Brillouin, $\mathbf{k} \simeq 0$. Para tener en cuenta propiamente estos puntos, dividimos la región de integración en

tres partes, con los órdenes de integración indicados:

$$\begin{aligned} \int_{1\text{BZ}} R(\mathbf{k}) &= \int_{k_x=0}^{k_{x1}} \int_{k_y=0}^{k_x\sqrt{3}} R(\mathbf{k}) dk_y dk_x \\ &+ \int_{k_y=0}^{k_{y1}} \int_{k_x=0}^{k_y/\sqrt{3}} R(\mathbf{k}) dk_x dk_y \\ &+ \int_{k_{x1}}^{2k_{x1}} \int_{k_y=0}^{2k_{y1}-k_x\sqrt{3}} R(\mathbf{k}) dk_y dk_x, \end{aligned} \quad (10.20)$$

que corresponden a las zonas A, B y C de la figura 10.2. Los puntos k_{x1} y k_{y1} corresponden a $k_{x1} = \frac{2}{3}\pi$, $k_{y1} = \frac{2}{3}\pi\sqrt{3}$. Inspeccionemos el primer término a la vista de la figura 10.2. Para cada valor de k_x tomamos N puntos de integración Gaussianos en la dirección k_y , desde 0 hasta $k_y = k_x\sqrt{3}$. Una vez hecha la integral para este valor de k_x , la coordenada k_x varía desde 0 hasta k_{x1} , tomando también N valores en ese intervalo. Por tanto, cerca del origen la densidad de puntos es mayor, porque el número de puntos en cada línea vertical es N , independiente de k_x . La integral sobre la región B tiene también más densidad cerca del origen. No nos preocupamos por la integral sobre C, porque está lejos del origen y no contribuye a largos tiempos. La integral sobre cada región se evalúa con $N \times N$ puntos. Para aumentar aún más la precisión, dividimos la región A en dos subregiones, una de las cuales está muy cerca del origen, desde 0 hasta k_{x2} . En esta subregión pequeña se integra también con $N \times N$ puntos. Hacemos lo mismo en la región B. El tamaño de la región cerca del origen se varía para estabilizar la integración. Nosotros utilizamos $k_{x2}/k_{x1} = k_{y2}/k_{y1} \simeq 0.15$. En la figura 10.2 mostramos la distribución de los puntos de integración con 20×20 puntos en cada una de las cinco regiones mencionadas. Se observa que en la zona cercana al origen la densidad de puntos crece. La zona completamente oscura muy cerca del origen corresponde a la subdivisión de las regiones A y B. En nuestras simulaciones utilizamos 100×100 puntos de integración en cada una de las cinco regiones. Este es el método de integración usado. Puede ser que haya métodos más precisos que el presentado para el tipo de problemas estudiados. Sin embargo éste nos proporciona la precisión deseada, aunque necesitamos más densidad de puntos en la integración cuando t crece.

Una vez obtenida la integral de anillo R_{ijkl}^0 se contrae con $A_{a,ij}$. A continuación se efectúa la convolución en (10.6), con la que obtenemos las funciones de correlación. Por último, se efectúa la suma de las fórmulas de Green-Kubo para obtener los coeficientes de transporte.

Como comprobación, no sólo calculamos las contracciones de Γ con las

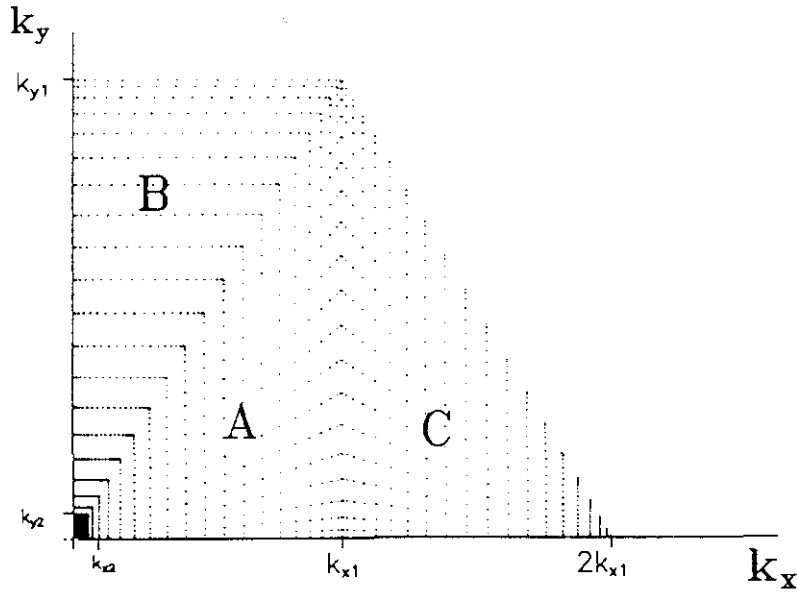


Figura 10.2: Densidad de puntos en la integración numérica de la primera zona de Brillouin. Las regiones A, B y C en que se ha dividido la integral (10.20). Se observa la mayor densidad de puntos cerca del origen.

corrientes (10.3), sino también las funciones de correlación: $j^x \Gamma(0, t) j^x$, $j^y \Gamma(0, t) j^y$ y $j^x \Gamma(0, t) j^y$ con $j^x = c_x c_x$ y $j^y = c_y c_y$. Están relacionadas linealmente con las funciones de correlación de las viscosidades, como se puede deducir de (3.79). Asimismo comparamos con los resultados obtenidos sumando todos los caminos posibles en la ecuación (9.15) para $t \leq 7$. Todas las comparaciones hechas confirman la precisión de nuestros cálculos.

10.4 Resultados

El primer resultado que presentamos (figura 10.3) ilustra el comportamiento típico de la función de correlación $\phi(t)$ con el tiempo. Es para el modelo FHP-I, a densidad $f = 0.25$. Para esta densidad el autovalor relacionado con la viscosidad es $\lambda_\nu = 3f(1-f)^2 \simeq 0.316$ alcanza el valor máximo, y por tanto el tiempo libre medio (o recorrido libre medio) es mínimo, $t_{mf} \simeq 1/\lambda_\nu \simeq 3.16$. En esta figura podemos ver claramente la transición del comportamiento exponencial al algebraico. Para tiempos cortos, del orden de $t \lesssim 5t_{mf}$ la contribución de Boltzmann a la función de correlación es

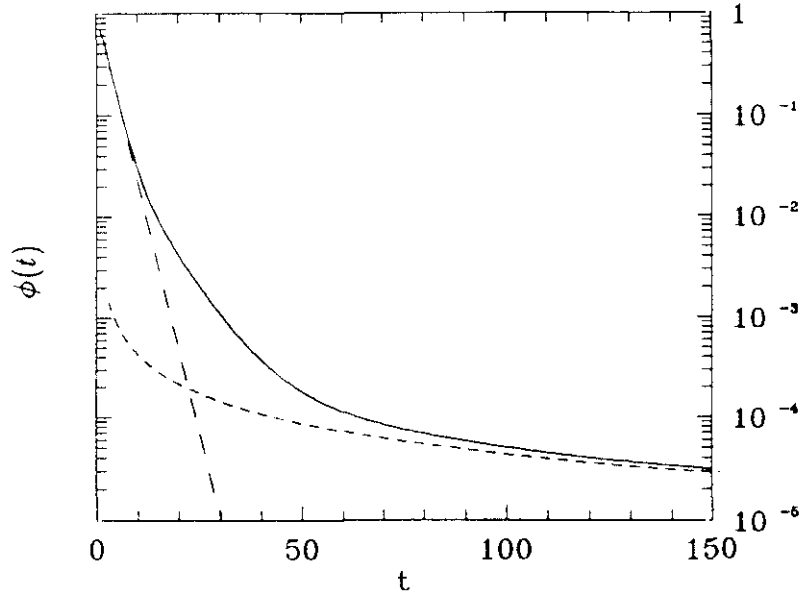


Figura 10.3: Función de correlación total ($\phi^\nu(t) = \phi_B^\nu(t) + \phi_R^\nu(t)$) para el modelo FHP-I a $f = 0.25$. La línea discontinua $--$ es el valor de Boltzmann y la línea $- \cdot -$ es el resultado MCT.

la parte dominante. Para tiempos intermedios ($5t_{mf} \lesssim t \lesssim 15t_{mf}$) observamos una separación del valor de Boltzmann. El efecto de las colisiones correlacionadas se empieza a manifestar. Por último, para tiempos largos ($t \gtrsim 20t_{mf}$) la función de correlación está completamente dominada por las colisiones correlacionadas de anillo, y $\phi^\nu(t)$ se aproxima al resultado de la teoría del acoplamiento de los modos.

En la figura siguiente 10.4 mostramos las contribuciones de Boltzmann, $\phi_B^a(t)$, y de anillo $\phi_R^a(t)$ para las funciones de correlación de cizalla ($a = \nu$) y de volumen ($a = \zeta$) para el modelo FHP-III a densidad $f = 1/7 \simeq 0.143$. En este caso el tiempo libre medio es del orden de $t_{mf} \simeq 1.4$, más del doble que en el modelo FHP-I a más alta densidad. Ello es debido a que el modelo FHP-III tiene muchas más colisiones activas, y el tiempo medio entre colisiones es, por tanto, menor. El análisis aquí es prácticamente igual al del apartado anterior: para tiempos menores que $4t_{mf}$ la parte de Boltzmann es mucho mayor que la de anillo. La transición entre al decaimiento exponencial y el algebraico se produce entre $5t_{mf}$ y $8t_{mf}$. Más allá de $15t_{mf}$ las funciones de correlación están completamente dominadas por las colisiones correlacionadas de anillo. Como puede verse en ambas

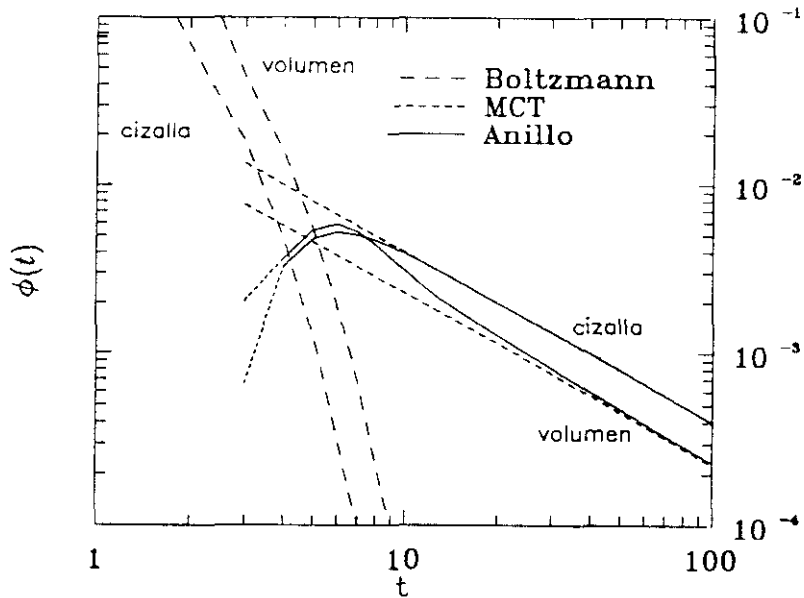


Figura 10.4: Funciones de correlación de cizalla ν y volumen ζ para el modelo FHP-III a $f = 1/7$. Se comparan las contribuciones de anillo (línea sólida) con las de Boltzmann (discontinua larga) y MCT (discontinua corta). $\phi_R(3)$ es negativa.

figuras y en la discusión, el tiempo libre medio t_{mf} parece el parámetro correcto para definir los regímenes de comportamiento en las funciones de correlación. En la figura 10.3 también observamos que la contribución de anillo es nula para $t = 0, 1, 2$, como se explicó en los capítulos 8 y 9, y que para $t = 3$ es negativa (razón por la que se dibuja de forma discontinua). A continuación crece hasta $t = 6$ y a partir de ahí decae acercándose al resultado de la teoría del acoplamiento de los modos, por debajo para la función de cizalla y por arriba para la de volumen.

Como puede verse en las dos figuras anteriores, la función de correlación se comporta como $1/t$ a tiempos moderadamente largos. Ello conduce a la inexistencia de hidrodinámica en dos dimensiones, puesto que los coeficientes de transporte no están acotados y crecen sin límite. Los coeficientes de transporte dependientes del tiempo han sido dibujados en las dos figuras siguientes, 10.5 y 10.6. La primera es para el modelo FHP-I a densidad $f = 0.25$. La línea discontinua es la contribución de Boltzmann a la viscosidad dividida por 10, que alcanza su valor asintótico finito exponencialmente rápido. En línea continua está la contribución de anillo que presenta un crecimiento muy débil como $\log t$, y a tiempo $t = 150$ representa tan sólo

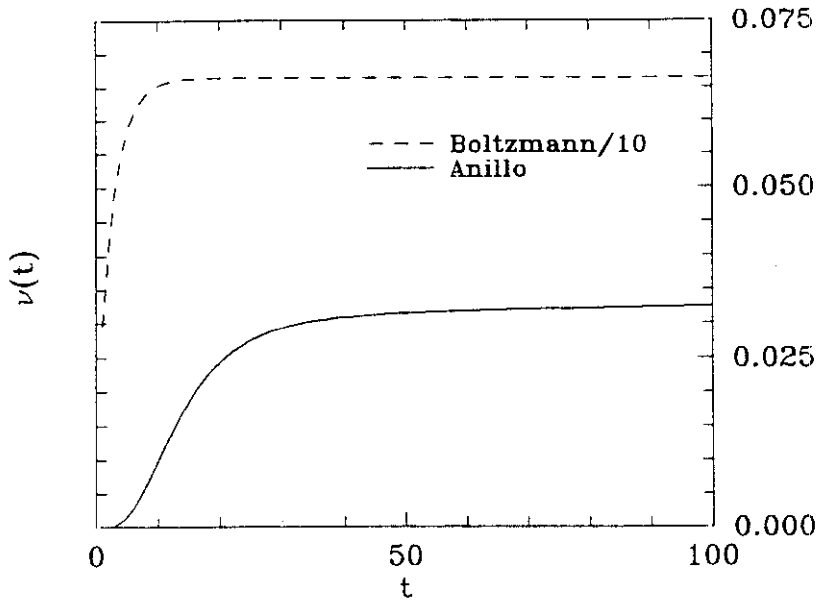


Figura 10.5: Viscosidad dependiente del tiempo para el modelo FHP-I a densidad $f = 0.25$. Se observa la lenta divergencia de la viscosidad con $\log t$.

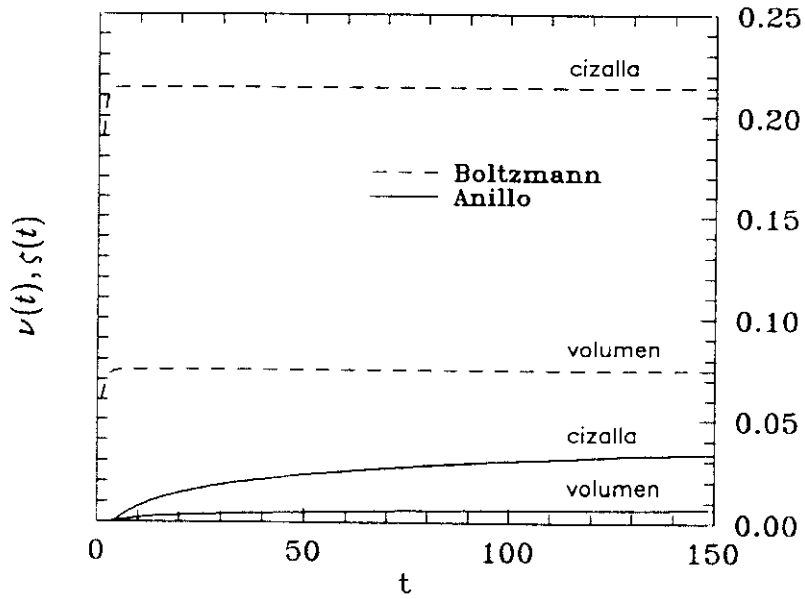


Figura 10.6: Igual que la figura 10.5 para el modelo FHP-III a densidad $f = 1/7$. Las líneas superiores dentro de cada grupo pertenecen a la viscosidad de cizalla y las inferiores a la de volumen.

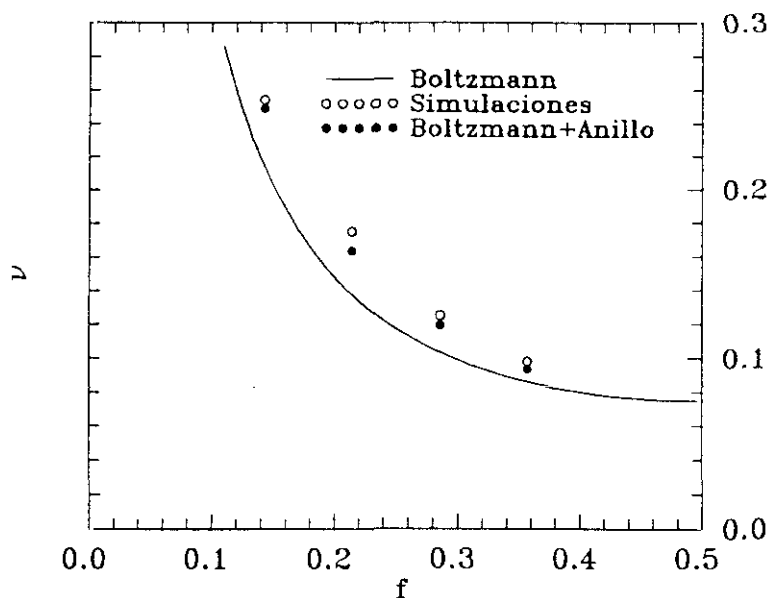


Figura 10.7: Viscosidad de cizalla para el modelo FHP-III. La línea continua es la predicción de Boltzmann, los círculos abiertos son las simulaciones numéricas [Gerits] y los círculos cerrados son los resultados de la teoría cinética de anillo.

un 5% de la de Boltzmann. La segunda (figura 10.6) es para el modelo FHP-III a densidad baja, $f = 1/7$. El criterio en las líneas es el mismo que en la figura anterior, pero aquí hay que distinguir entre viscosidad de volumen y de cizalla. La aportación de la parte de anillo a tiempo $t = 150$ es del 14% para la viscosidad de cizalla y del 10% para la de volumen. A muy largos tiempos se debe verificar que $\nu(t) = 16\zeta(t)/98 \simeq 6.1\zeta(t)$, de acuerdo con la ecuación (10.4) y la relación dada bajo la ecuación (10.19), y al tiempo máximo que se representa en la figura 10.6 dicho comportamiento casi se ha alcanzado, puesto que el cociente entre ambas es del orden de 5. La diferencia se debe al valor de Boltzmann y a los valores intermedios de la función de correlación que se aproxima a las colas a largos tiempos por debajo para la viscosidad de cizalla y por arriba para la de volumen, como se aprecia en la figura 10.4.

Por último vamos a comparar con los resultados numéricos existentes. Desafortunadamente, no existen simulaciones directas para las funciones de correlación. Sin embargo, sí que existen simulaciones numéricas para las viscosidades [d'Humières y Lallemand 87], y recientemente se han medido con bastante precisión por [Gerits]. Estos autores miden la relajación de una

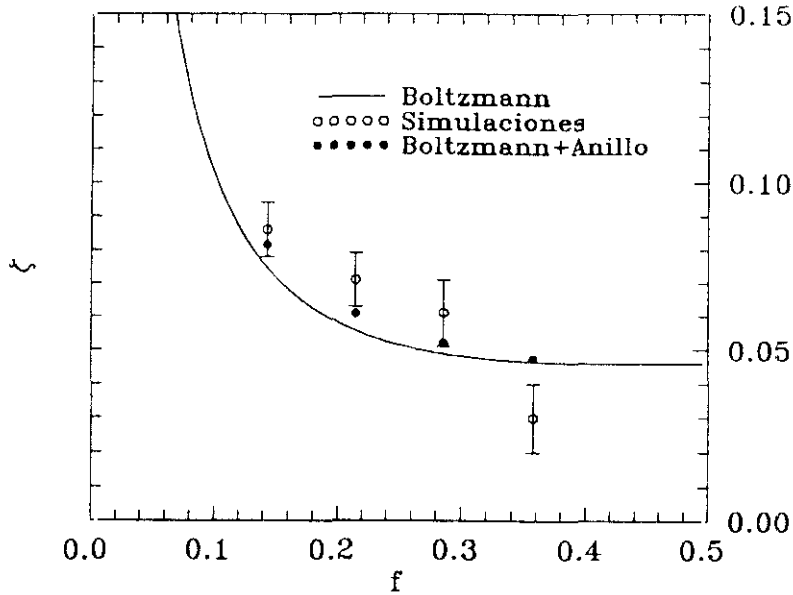


Figura 10.8: Igual que la figura 10.7 para la viscosidad de volumen. En este caso las simulaciones son mucho más imprecisas y se representan las barras de error.

perturbación transversal sinusoidal en el modelo FHP-III, que decae como $\exp(-\nu k^2 t)$. También miden el decaimiento de una onda sonora y con ello obtienen la viscosidad de volumen ζ a través de la relación $\Gamma = \nu + \zeta/\rho$, aunque aquí la precisión es mucho menor. En particular, para el caso de la viscosidad de cizalla fijan una perturbación con vector \mathbf{k} dirigido a lo largo de la dirección Y con módulo $k = 2\pi\sqrt{3}/(2L)$ con $L = 250$ el tamaño del sistema. A continuación miden su decaimiento durante no más de 300 pasos temporales y ajustan los resultados a una función $\exp(-\nu k^2 t)$ y así obtienen la viscosidad. Los valores utilizados por ellos se enmarcan dentro de el régimen de la hidrodinámica clásica, no de la generalizada. Por tanto, los coeficientes de transporte para estos valores no dependen del módulo de \mathbf{k} ni de su ángulo. Nótese que las simulaciones se realizan en el modelo FHP-III, en el que los autovalores son: $\lambda_i = 0.64, 0.79, 0.92$ a la densidad $f = 1/7$, frente al valor de $k = 0.022$. Por tanto, $k \ll \lambda_i$ y estamos en el régimen de la hidrodinámica clásica. Así que las desviaciones observadas de la aproximación de Boltzmann no se deben a efectos del tamaño finito del vector \mathbf{k} de la simulación, sino que son efectos reales del sistema. Nosotros compararemos los valores de la simulación con la suma de las funciones de correlación hasta $t = 150$, $\nu_B + \nu_R(150)$ y $\zeta_B + \zeta_R(150)$. Como hemos

apuntado, la lenta divergencia de los coeficientes de transporte como $\log t$ hace poco relevante el número de términos que se suman para obtenerlos, siempre que se mantengan en límites razonables. Por ejemplo, la diferencia entre $\nu_B + \nu_R(150)$ y $\nu_B + \nu_R(500)$ es de tan sólo 3 ó 4%. En la figura 10.7 hemos representado los valores de la viscosidad de cizalla para el modelo FHP-III frente a la densidad. La línea continua representa el valor de Boltzmann y los círculos abiertos las simulaciones numéricas descritas en [Gerits]. Las desviaciones son del orden del 20 al 25%, en acuerdo cualitativo con los resultados presentados en [d'Humières y Lallemand 87] y [Kadanoff et al]. Por último, los círculos negros son los resultados de la teoría cinética de anillo aquí presentada sumados hasta $t = 150$. Puede observarse que dicha teoría da cuenta de más del 60% de la diferencia entre los valores de Boltzmann y los simulados. Como vemos, la única consideración de las colisiones más sencillas, las de anillo simple, acerca mucho los valores teóricos a los de simulación. Igual sucede para la viscosidad de volumen, presentada en la figura 10.8. En este caso las simulaciones son más difíciles de realizar y como resultado la estadística es peor, así que hemos incluido las barras de error. Como puede verse, excepto el último punto, a $f = 5/14$, la predicción de la teoría cinética de anillo describe bien los valores obtenidos en la simulación.

La diferencia remanente entre los valores de las viscosidades simulados y los de la teoría cinética de anillo simple proviene de colisiones más complicadas, anillos dentro de anillos y diagramas superiores. Todavía no existe una teoría sistemática que las describa, que es muy interesante *per se* desde un punto de vista teórico, aunque desde un punto de vista práctico la aproximación de Boltzmann con las correcciones de anillo aquí presentadas proporciona una precisión suficiente en la descripción de los gases de red.

III

Conclusiones

11

Conclusiones y cuestiones abiertas

11.1 Conclusiones

Para acabar pasamos a resumir el trabajo original desarrollado en esta tesis y las conclusiones a las que se ha llegado, aunque muchas de ellas ya se hayan plasmado a lo largo del texto.

En el capítulo 3 hemos derivado las ecuaciones de evolución macroscópicas para los gases de red, tanto los términos de Euler no lineales como la parte de Navier–Stokes disipativa lineal.

- La parte de Euler se ha obtenido promediando el tensor de flujo de momento en una colectividad de equilibrio local. El desarrollo de la colectividad en torno al equilibrio básico (con valor medio del momento nulo), nos ha permitido obtener el término $p\mathbf{1} + G(\rho)\rho\mathbf{u}\mathbf{u}$, ecuación (3.36), donde $G(\rho)$ es el llamado factor no galileano, y su aparición es debida a la no invariancia Galileo de los gases de red. El método desarrollado expresa $G(\rho)$ como un promedio en el equilibrio de tres números de ocupación, ecuaciones (3.37), que proporcionan un método sencillo para calcular $G(\rho)$ tanto analítica como numéricamente.
- Los términos de Navier–Stokes lineales han sido obtenidos a través de un formalismo de proyectores que es análogo al de los sistemas continuos. Con él hemos deducido las expresiones de Green–Kubo para los coeficientes de transporte, ecuación (3.72). Las principales diferencias con las fórmulas de Green–Kubo de los fluidos continuos son consecuencia de la estructura discreta de la red, y son: una suma temporal en lugar de un integral, y la presencia de la llamada parte propagante, ecuación (3.74), que sustrae la mitad de la contribución a $t = 0$ a la

suma temporal. Asimismo, hemos demostrado que la viscosidad de volumen, ζ , es nula para modelos monovelocidad o modelo térmicos con energía puramente cinética.

El capítulo 4 ha tratado sobre las cantidades conservadas espúreas introducidas en [Zanetti 89], que aparecen como consecuencia de la estructura discreta de los gases de red, y que están caracterizadas por una dirección externa θ . Aplicando el formalismo desarrollado en el capítulo 3, hemos obtenido las ecuaciones de evolución de estas cantidades conservadas, ω_g (ecuación (4.21)), de las que cabe señalar que:

- en orden lineal son puramente difusivas. Hemos obtenido también las fórmulas de Green-Kubo para las difusividades de estos modos, que resultan ser anisótropas como consecuencia de la dependencia de la dirección de las cantidades espúreas. La difusividad se puede escribir en función de dos coeficientes D_{\perp} y D_{\parallel} , que no dependen de la dirección, ecuación (4.16).
- En la parte no lineal de las ecuaciones aparecen los productos $u\omega_g$, ecuación (4.25), esto es, hay un acoplamiento entre el momento y la cantidad conservada espúrea. El coeficiente de acoplamiento es también anisótropo y está relacionado con el factor no galileano.
- Asimismo, la ecuación de Euler no lineal se modifica con la presencia de un término ω_g^2 , ecuación (4.27).

Todo el efecto de estas cantidades conservadas adicionales se elimina de las ecuaciones de evolución si se igualan a cero en la condición inicial, y así recuperamos las ecuaciones de la dinámica de fluidos. En la sección 4.1 se propone un método para encontrarlas de forma sistemática, siempre que tengan una forma funcional como $(-1)^{\theta \cdot r + \alpha t}$.

En la parte IIa hemos desarrollado la teoría cinética basada en la aproximación de Boltzmann, en la que el ingrediente básico es el operador de colisión linealizado, Ω .

En el capítulo 6 hemos obtenido las fórmulas de Green-Kubo y los coeficientes de transporte en la aproximación de Boltzmann, con los resultados:

- Hemos encontrado la base en la que Ω es diagonal, ecuaciones (6.17) y (6.18), basándonos únicamente en las propiedades de simetría del modelo, y no en las reglas de colisión. La dependencia de las reglas de colisión se encuentra en los autovalores, que se listan para los modelos FHP en la tabla 6.2.

- Los coeficientes de transporte se han expresado en función de los autovalores de Ω , tanto los físicos (viscosidades) como las difusividades espúreas.
- Hemos encontrado que una de las difusividades espúreas, D_{\perp} , es siempre igual a la viscosidad de cizalla, ν , y que para los modelos monovelocity, también D_{\parallel} es proporcional a ν . Para modelos con más de una velocidad, D_{\parallel} es una función no lineal de las viscosidades de cizalla y de volumen.

A continuación, en el capítulo 7 estudiamos el espectro del propagador cinético Γ en función del vector de ondas \mathbf{k} como un desarrollo perturbativo alrededor de $\mathbf{k} = 0$, obteniendo los modos hidrodinámicos y cinéticos, que corresponden a los autovalores nulos y no nulos cuando $k \rightarrow 0$ respectivamente. Comparamos con el cálculo numérico exacto de Γ y obtuvimos los regímenes:

- Para k pequeño estamos en el régimen de la hidrodinámica clásica. El resultado perturbativo y el numérico coinciden. Los coeficientes de transporte vienen dados por la aproximación de Boltzmann.
- Cuando k crece, todavía hay separación entre modos hidrodinámicos y cinéticos, pero los resultados perturbativos y numéricos comienzan a discrepar. Los coeficientes de transporte y la velocidad del sonido dependen de \mathbf{k} , no sólo a través del módulo, como en fluidos continuos, sino también del ángulo, como se aprecia en la figura 7.2. Estamos en el régimen de la hidrodinámica generalizada.
- Para valores grandes de k ($kl_0 \gtrsim 1$, con l_0 el recorrido libre medio) los modos hidrodinámicos y cinéticos son del mismo orden. Estamos en el régimen cinético, en el que ambos tipos de modos comienzan a asociarse en pares de modos propagantes. La hidrodinámica deja de ser válida.
- A continuación se entra en el régimen de partícula libre. Las partes reales de los autovalores se funden en un único valor. Este régimen no se alcanza siempre. Depende del modelo y de la densidad.

Todos estos regímenes se ven reflejados en el factor de estructura S , transformada de Fourier en el espacio y el tiempo de la función de correlación

densidad–densidad, sección 7.2. Hemos desarrollado el método de Landau–Placzek para el factor de estructura, que considera sólo los modos hidrodinámicos, sección 7.4. Comparamos el factor de estructura obtenido numéricamente y la predicción de la teoría de Landau–Placzek en los diferentes regímenes anteriores.

- Régimen hidrodinámico. Observamos dos picos, relacionados con ondas sonoras, localizados en $\pm c_0 k$ y con anchura proporcional a Γk^2 . La teoría de Landau–Placzek es válida en este régimen.
- Régimen hidrodinámico generalizado. Seguimos observando los dos picos anteriores, pero como los coeficientes de transporte dependen de k y en la teoría de Landau–Placzek se utilizan los valores de Boltzmann, la predicción de Landau–Placzek no es del todo correcta. El uso de $c_0(k)$ y $\Gamma(k)$ en la teoría de Landau–Placzek mejoraría los resultados.
- Tanto en el régimen cinético como en el de partícula libre la aproximación de Landau–Placzek falla de manera clara, porque su hipótesis fundamental de separación de escalas entre modos cinéticos e hidrodinámicos deja de ser válida. En el régimen cinético la forma del factor de estructura ya no es la explicada. Comienzan a aparecer picos intermedios, que corresponden a modos que se hacen lentos a esos valores de k . Por último, cuando se llega al régimen de partícula libre el valor de k es tan grande que en la resolución que estudiamos el sistema, dada por k^{-1} , los modos cinéticos no han decaído. Por tanto aparecen como lentos o hidrodinámicos y se crea un pico por cada modo.

Hasta aquí hemos estudiado la teoría cinética en la aproximación de Boltzmann. En la parte IIb hemos querido elaborar una teoría que corrija algunos defectos de la teoría de Boltzmann. En particular, todas las consecuencias de las colisiones correlacionadas no pueden estar bien predichas por la aproximación de Boltzmann, porque no las tiene en cuenta. La teoría cinética aquí presentada—la teoría cinética de anillo—considera las recoliciones más sencillas posibles. Hemos considerado la difusión de partículas marcadas y el desarrollo lo hemos hecho en base al propagador cinético para la partícula marcada.

En la figura 8.1 se observan esquemáticamente los pasos seguidos, que comienzan con la expresión del propagador cinético donde se insertan las ecuaciones de evolución, se pasa por una ecuación no cerrada, que se cierra para llegar una ecuación integral. Con una última aproximación se acaba

en una ecuación explícita. Esta ecuación describe secuencias del tipo: dos partículas colisionan, a continuación se propagan independientemente, realizando colisiones tipo Boltzmann, para recolisionar de nuevo. A partir de esta teoría cinética de anillo hemos deducido analíticamente (capítulo 9):

- Las correlaciones de tipo geométrico que se habían encontrado numéricamente en sistemas tridimensionales, ecuación (9.11). Estos sistemas se obtienen como proyección de una red cuatridimensional a una red tridimensional, y las correlaciones son el efecto de la proyección. Los resultados numéricos coinciden de forma muy precisa con nuestro resultado exacto (figura 9.2).
- La teoría del acoplamiento de los modos, obtenida como el límite a largos tiempos de la teoría cinética de anillo. Con ello deducimos el comportamiento $t^{-d/2}$ de las funciones de correlación a largos tiempos, ecuación 9.29, con coeficiente $1/(\nu + D)$. Como consecuencia los coeficientes de transporte son divergentes en sistemas bidimensionales y la hidrodinámica no existe en el límite termodinámico.

Para concluir, en el capítulo 10 hemos presentado la evaluación numérica de la teoría cinética de anillo en modelo bidimensionales, con los resultados:

- Para $t = 3$ hemos obtenido analíticamente la contribución de la teoría de anillo, que puede ser mucho mayor que la contribución de Boltzmann para ciertos modelos y densidades, figura 10.1.
- En las figuras 10.3 y 10.4 hemos presentado el comportamiento de las funciones de correlación para dos modelos diferentes. Las escalas de tiempo están caracterizadas por el tiempo medio entre colisiones t_{mf} . Para tiempos cortos ($t < 5t_{mf}$) su comportamiento está dado por el valor de Boltzmann, y alcanza el valor asintótico dado por la teoría del acoplamiento de los modos tras $20t_{mf}$.
- Como consecuencia de la divergencia $1/t$, los coeficientes de transporte divergen lentamente con $\log t$, lo que se ha mostrado en las figuras 10.5 y 10.6.
- Por último hemos comparado con las simulaciones numéricas de [Gerrits], sumando las funciones de correlación hasta el tiempo que se simula. Los resultados se presentan en la figura 10.7 para la viscosidad de cizalla. Vemos como la teoría cinética descrita da cuenta de más del 60% de la diferencia entre los valores de Boltzmann y los obtenidos por

simulación. Para algunos puntos las correcciones son incluso mayores. Lo mismo se hace para las ondas sonoras, con el fin de obtener ζ . Aquí los errores son mayores y los resultados no tan concluyentes, aunque el comportamiento general es muy bueno (todos los puntos están de acuerdo dentro de un error de 2σ).

Como consecuencia la teoría cinética de anillo corrige muy bien los valores de Boltzmann. La diferencia que permanece se debe a recoliciones más complicadas.

11.2 Cuestiones abiertas

Hay muchas cuestiones abiertas y temas de interés en los gases de red. Mencionaremos unas cuantas relacionadas con este trabajo.

Prácticamente toda esta memoria se ocupa de gases de red atómicos, sin temperatura, pero todos los desarrollos se pueden generalizar a modelos térmicos sin mucho esfuerzo. Aunque los gases de red surgieron para estudiar problemas de flujo, nuevas y numerosas aplicaciones a problemas térmicos están apareciendo [Ernst y Das 92], [Retchman y Salcido 91], [Bernadin *et al* 91],[Grosfils *et al* 92]. El único modelo presentado hasta ahora con temperatura e isotropía de tensores de cuarto orden es el definido sobre la red triangular con 19 velocidades por nodo. Hasta el momento sólo existen simulaciones de este modelo, en particular del factor de estructura, S , que muestran un tercer pico central (pico de Rayleigh). Un profundo estudio teórico debe ser hecho para conocer la aplicabilidad de estos modelos a problemas térmicos reales.

Otro campo abierto y sobre el que no hemos hablado es el de los modelos que no satisfacen el principio de balance semidetallado, que se crearon con el objetivo de minimizar la viscosidad. Su estudio está comenzando y presentan mucho aspectos que los hacen muy atractivos. Por ejemplo, para ciertas densidades pueden desarrollar estructuras, o separaciones de fase. La existencia de un estado de equilibrio todavía no está bien establecida [Bussemaker y Ernst 92].

Dentro de la teoría cinética de anillo, sería muy interesante realizar la misma integración numérica de la ecuación de anillo simple que se hizo en el capítulo 10 para la función de autocorrelación de la velocidad, VACF. Ello es debido a que existen simulaciones muy precisas de la VACF a todo tiempo, y no sólo de sus integrales, como sucede con las funciones de correlación del fluido, de las que sólo se conocen sus sumas, los coeficientes de

transporte. La comparación con las simulaciones nos permitiría analizar la validez de la teoría cinética de anillo no sólo en sus regímenes de cortos y largos tiempos, sino a tiempos intermedios donde los efectos de las recoliciones comienzan a observarse. La realización de este proyecto es uno de los objetivos inmediatos de nuestro grupo.

Otra cuestión fundamental que queda abierta es la generalización de la teoría cinética de la parte IIb a secuencias de recoliciones más complejas, con el fin de estudiar su decaimiento temporal. En particular sería muy importante considerar recoliciones en las que las partículas 1 y 2 colisionan, posteriormente la 1 colisiona con una tercera partícula 3, que colisiona de nuevo con la 2, y finalmente la 1 y la 2 colisionan de nuevo. Estos diagramas han sido analizados en fluidos continuos con la siguiente contribución en importancia al decaimiento $1/t$. Hasta el momento no existe una teoría que tenga en cuenta ésta y otras secuencias de colisiones. Para estudiar decaimientos más rápidos que $1/t$ sería interesante realizar simulaciones de la función de correlación para densidad $f = 1/2$, donde la cola $1/t$ tiene una amplitud nula, de acuerdo con la ecuación (9.30). Así podríamos observar contribuciones subdominantes a las colas a largos tiempos.

IV

Apéndices

A

Tensores

Consideremos un tensor de n índices $\mathbf{T}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ en un espacio d -dimensional, $\alpha_i, i = 1, \dots, d$. Bajo una transformación de coordenadas R cambia según:

$$\mathbf{T}'_{\alpha'_1 \dots \alpha'_n} = R_{\alpha'_1 \alpha_1} \dots R_{\alpha'_n \alpha_n} \mathbf{T}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}, \quad (\text{A.1})$$

donde R es una representación d -dimensional de la transformación dada. El tensor \mathbf{T} es invariante bajo la simetría R si

$$\mathbf{T}'_{\alpha_1 \dots \alpha_n} = \mathbf{T}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}. \quad (\text{A.2})$$

Un tensor \mathbf{T} se llama isótropo si es invariante bajo el grupo continuo de rotaciones e inversiones. Los únicos tensores isótropos son las deltas de Kronecker $\delta_{\alpha\beta}$ y sus productos. Si es invariante bajo un grupo de simetrías de una red discreta, se dice que tiene simetría cúbica, triangular, ..., de acuerdo con el grupo discreto correspondiente.

Consideremos ahora una red discreta regular, con velocidades $\mathbf{c}_i, i = 1, \dots, b$, y estudiemos los tensores completamente simétricos de rango n :

$$\mathbf{E}_{\alpha\beta \dots \gamma}^{(n)} = \sum_{\mathbf{c}} c_\alpha c_\beta \dots c_\gamma f(|\mathbf{c}|). \quad (\text{A.3})$$

donde la suma sobre \mathbf{c} se extiende sobre el conjunto de vectores $\{\mathbf{c}_i\}$ donde los vectores de igual longitud se transforman de uno a otro bajo el grupo de simetrías discreto de la red. Todas las redes consideradas tienen simetría bajo inversiones, y por tanto los tensores $\mathbf{E}^{(n)}$ con n impar son automáticamente nulos. La misma simetría implica que para n =par todos los índices de los tensores tienen que aparecer de dos en dos, cuatro en

cuatro, ..., así que:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\alpha\beta}^{(2)} &= a\delta_{\alpha\beta} \\ \mathbf{E}_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} &= a[\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}] + b\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

donde $\delta^{(4)}$ es la delta de Kronecker de cuatro índices, con valores

$$\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha = \beta = \gamma = \delta \\ 0 & \text{resto.} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Se puede verificar directamente usando (A.2) que $\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}$ no es un tensor isótropo. Por tanto un tensor de cuarto orden es isótropo sólo si $b = 0$. La fórmula anterior da la forma general de un tensor completamente simétrico de rangos $n = 2$ y $n = 4$ en d dimensiones, ($d = 2, 3, 4, \dots$). Si hay una *simetría adicional* (como rotaciones de ángulo $\pi/3$ en la red triangular, o la simetría Σ definida en el modelo FCHC [Hènon 87]), entonces existe una relación adicional entre las componentes del tensor, que sólo puede ser satisfecha igualando $b = 0$. Consecuentemente un tensor de cuarto orden en una red triangular o FCHC es isótropo. Por supuesto, un tensor de sexto orden en estas redes ya no es isótropo.

Para una red triangular en dos dimensiones obtenemos que el tensor $\mathbf{E}^{(4)}$ vale:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\alpha\beta}^{(2)} &= a\delta_{\alpha\beta} \\ \mathbf{E}_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} &= b\{\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}\}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

En general los tensores simétricos que son isótropos son proporcionales a todos los productos posibles de $n/2$ deltas con los índices permutados, como se ilustra en (A.6). Se verifica [Wolfram 86] que $\mathbf{E}^{(2n)}$ es isótropo para grupos con simetría de ángulo $\pi/(n+1)$ (esto es, polígonos de $2(n+1)$ lados) o menores.

Un tensor general de cuarto orden no tiene la forma dada en (A.3). Su forma más general es

$$\mathbf{T}_{\alpha\beta\gamma\delta} = A\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + B\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + C\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} + D\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}, \quad (\text{A.7})$$

que tiene cuatro coeficientes independientes A, B, C, D para la red cúbica o cuadrada. Para una red hexagonal la componente en $\delta^{(4)}$ desaparece, así que $D = 0$.

El tensor de cuarto orden de viscosidades, $\eta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ en (3.80) es simétrico en los índices $\{\alpha\beta\}$, porque el tensor de presiones \mathbf{P} que lo define es simétrico

en equilibrio y por tanto $B = C$. Consecuentemente, para un tensor general simétrico en $\{\alpha\beta\}$ la ecuación (A.7) se puede escribir como:

$$\mathbf{T}_{\alpha\beta\gamma\delta} = A\left\{\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - \frac{2}{d}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\right\} + B\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + D\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} \quad (\text{A.8})$$

Si este tensor es isótropo o de traza nula en el par de índices $\{\alpha\beta\}$, satisface que:

$$\begin{aligned} D &= 0 && \text{si } \mathbf{T} \text{ es isótropo (hexagonal en } 2-d) \\ B = D &= 0 && \text{si } \mathbf{T} \text{ es de traza nula en } \alpha\beta \text{ e isótropo.} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Todas estas consideraciones sobre tensores han sido utilizadas a lo largo del texto de esta memoria.

B

Expresiones para $c\bar{\Omega}$ y $c\bar{\Omega}^{(2)}$

Este apéndice está dedicado al cálculo de la suma:

$$A(n, \nu) = \sum_i c_i \bar{I}_i(n, \nu), \quad (\text{B.1})$$

y en particular a los dos primeros términos del desarrollo en serie de \bar{I} , ecuación (8.12). Los hemos necesitado en los tres últimos capítulos para desarrollar la teoría cinética de anillo. Consideraremos un fluido no interactuante con reglas de colisión máximamente aleatorias, MAXRCR.

Consideremos una colisión con $[p]$ partículas ($p \geq 2$) en un fluido no interactuante. Hay dos contribuciones al operador \bar{I} : un término de pérdida en el que una partícula marcada en el canal i va a parar a cualquier otro canal, y un término de ganancia, en el que partículas en otros canales van a parar al canal i . Se pueden escribir como:

$$\bar{I}_i^{(p)}(n, \nu) = \left\{ -\nu_i n([p] - i) + \frac{1}{p} \sum_{j \in [p]} \nu_j n([p] - j) \right\} \bar{n}([b] - [p]), \quad (\text{B.2})$$

donde $n([p]) \equiv \prod_{i \in [p]} n_i$. El factor $\bar{n}([b] - [p])$ garantiza que los canales $[b] - [p]$ están vacíos, así que realmente es una colisión con $[p]$ partículas. El factor $1/p$ es una consecuencia directa de las reglas de colisión MAXRCR, y expresa que, en media, una fracción $1/p$ de las partículas marcadas se dispersa a cualquier otro de los canales en el conjunto $[p]$. Si consideramos todas las colisiones, obtenemos que:

$$I_i(n, \nu) = \sum_{p=2}^b \sum_{[p] \subset [b]}^* \left\{ -\nu_i n([p] - i) + \frac{1}{p} \sum_{j \in [p]} \nu_j n([p] - j) \right\} \bar{n}([b] - [p]), \quad (\text{B.3})$$

donde la suma en $[p]$ contiene todas las formas posibles de elegir p partículas de un conjunto de b canales posibles. El asterisco indica la ligadura $i \in [p]$.

Multiplicamos ahora (B.3) por c_i y sumamos sobre i . A continuación intercambiamos el orden de las sumas y hacemos la suma en i la más interna, para obtener:

$$A(n, \nu) = \sum_{p=2}^b \sum_{[p] \subset [b]} \sum_{i \in [p]} \left[\frac{1}{p} \sum_{j \in [p]} c_j - c_i \right] \nu_i n([p] - i) \bar{n}([b] - [p]). \quad (\text{B.4})$$

Intercambiamos de nuevo las sumas para hacer la suma en i la más externa, con lo que obtenemos que,

$$A(n, \nu) \equiv \sum_i A_i(n) \nu_i$$

$$A_i(n) = \sum_{l=1}^{b-1} \sum_{[l] \subset [b-1]} \left[\frac{1}{l+1} \sum_{j \in [l]} c_j - \frac{l}{l+1} c_i \right] n([l]) \bar{n}([b] - [l] - i). \quad (\text{B.5})$$

Un desarrollo en fluctuaciones de los números de ocupación $n_i = f + \delta n_i$, define los coeficientes A_i , A_{ij} , etc,

$$A(n, \nu) = A_i \nu_i + A_{ij} \nu_i \delta n_j + \dots, \quad (\text{B.6})$$

donde suma sobre índices repetidos es asumida. Al comparar con (B.1) con \bar{I} dado por (8.12) se tiene:

$$A_i = \sum_j c_j \bar{\Omega}_{ji}, \quad A_{ij} = \sum_k c_k \bar{\Omega}_{kij}^{(2)}. \quad (\text{B.7})$$

El primer coeficiente A_i se obtiene sustituyendo n_i en la ecuación (B.5) por f ,

$$A_i = \sum_{l=1}^{b-1} \sum_{[l] \subset [b-1]} \left[\frac{1}{l+1} \sum_{j \in [l]} c_j - \frac{l}{l+1} c_i \right] f^l (1-f)^{b-l-1} \quad (\text{B.8})$$

Si utilizamos que $\sum_i c_i = 0$, podemos reemplazar $\sum_{[l] \subset [b-1]} \frac{1}{l+1} \sum_j c_j$ por $-\sum_{[l-1] \subset [b-2]} \frac{1}{l+1} c_i$, obteniendo:

$$A_i = -c_i \sum_{l=1}^{b-1} f^l (1-f)^{b-l-1} \left\{ \sum_{[l] \subset [b-1]} \frac{l}{l+1} + \sum_{[l-1] \subset [b-2]} \frac{1}{l+1} \right\}. \quad (\text{B.9})$$

Las sumas en el interior del corchete se pueden realizar con ayuda de

$$\sum_{[a] \subset [b]} 1 = \binom{b}{a}, \quad (\text{B.10})$$

con lo que la ecuación (B.9) queda:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_i &= -\mathbf{c}_i \sum_{l=1}^{b-1} f^l (1-f)^{b-l-1} \left\{ \frac{l}{l+1} \binom{b-1}{l} + \frac{1}{l+1} \binom{b-2}{l-1} \right\} \\ &= -\mathbf{c}_i b \sum_{l=1}^{b-1} f^l (1-f)^{b-l-1} \binom{b-2}{l-1}, \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

y por tanto \mathbf{c} es autovector de $\bar{\Omega}$ con autovalor $-w$ dado por

$$w = b \sum_{l=1}^{b-1} f^l (1-f)^{b-l-1} \binom{b-2}{l-1}, \quad (\text{B.12})$$

cuya suma nos da el resultado presentado en (8.34).

Para obtener los coeficientes \mathbf{A}_{ij} , desarrollamos (B.5) hasta orden lineal en δn :

$$\begin{aligned} \sum_{m \neq i} \mathbf{A}_{im} \delta n_m &= \sum_{l=1}^{b-1} \sum_{[l] \subset [b-1]} \frac{1}{l+1} \left[\sum_{j \in [l]} \mathbf{c}_j - l \mathbf{c}_i \right] \\ &\times \left[\sum_{m \in [l]} \delta n_m f^{l-1} (1-f)^{b-l-1} - \sum_{m \in [b]-[l]-i} \delta n_m f^l (1-f)^{b-l-2} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

donde el primer término proviene de $n([l])$ y el último de $\bar{n}([b]-[l]-i)$ en la ecuación (B.5). Si hacemos la suma sobre m la más externa, obtenemos que,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{im} &= \sum_{l=1}^{b-1} \sum_{[l-1] \subset [b-2]} \frac{1}{l+1} \left[\sum_{j \in [l]} \mathbf{c}_j + \mathbf{c}_m - l \mathbf{c}_i \right] f^{l-1} (1-f)^{b-l-1} \\ &- \sum_{l=1}^{b-1} \sum_{[l] \subset [b-2]} \frac{1}{l+1} \left[\sum_{j \in [l]} \mathbf{c}_j - l \mathbf{c}_i \right] f^l (1-f)^{b-l-2} \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Volvemos a utilizar la relación $\sum_i \mathbf{c}_i = 0$, para reemplazar las sumas sobre \mathbf{c}_j por $\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_m$, para llegar a:

$$\mathbf{A}_{im} = - \sum_{l=1}^{b-1} \sum_{[l-2] \subset [b-3]} (\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_m) \frac{1}{l+1} f^{l-1} (1-f)^{b-l-1}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{l=1}^{b-1} \sum_{[l-1]C[b-2]} (\mathbf{c}_m - l\mathbf{c}_i) \frac{1}{l+1} f^{l-1} (1-f)^{b-l-1} \\
& + \sum_{l=1}^{b-1} \sum_{[l-1]C[b-3]} (\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_m) \frac{1}{l+1} f^l (1-f)^{b-l-2} \\
& + \sum_{l=1}^{b-2} \sum_{[l]C[b-2]} \mathbf{c}_i \frac{l}{l+1} f^l (1-f)^{b-l-2}. \tag{B.15}
\end{aligned}$$

Si agrupamos los términos con \mathbf{c}_i y \mathbf{c}_m y definimos las variables α y β según:

$$\mathbf{A}_{im} = \alpha \mathbf{c}_i + \beta \mathbf{c}_m, \tag{B.16}$$

obtenemos, utilizando de nuevo (B.10) que

$$\begin{aligned}
\alpha & = (1-f)^{b-2} \sum_{l=0}^{b-3} \frac{1}{(l+1)(l+2)} \binom{b-3}{l} x^l \\
\beta & = \frac{(1-f)^{b-2}}{f} \sum_{l=1}^{b-2} \frac{1}{l+1} \binom{b-3}{l-1} x^l \tag{B.17}
\end{aligned}$$

con $x = f/(1-f)$. Estas sumas se pueden realizar con el resultado,

$$\begin{aligned}
\alpha & = -\frac{1-f}{(b-1)(b-2)f^2} [1 - (b-1)(1-f)^{b-2} + (b-2)(1-f)^{b-1}] \\
\beta & = -\frac{1}{(b-1)(b-2)f^2} [1 - (b-1)f - (1-f)^{b-1}], \tag{B.18}
\end{aligned}$$

ecuaciones que han sido utilizadas en el capítulo 9.

C

Relación entre $\bar{\Omega}^{(2)}$ y $\bar{\Omega}$

Este apéndice está dedicado a la obtención de la ecuación (9.26). Consideremos una colisión múltiple que involucra a la partícula marcada. El conjunto de $[p]$ partículas iniciales, tomadas de entre las $[b]$ posibles, da lugar al conjunto $[p^*]$ tras la colisión. En particular, la partícula marcada comienza en $i \in [p]$ y acaba en $i^* \in [p^*]$. Entonces podemos escribir el operador de colisión como:

$$\bar{I}_i(n, \nu) = \sum_{p=2}^b \sum_{[p] \subset [b]} \left[-\nu_i n([p] - i) \bar{n}([b] - [p]) + \nu_{i^*} n([p^*] - i^*) \bar{n}([b] - [p^*]) \right]. \quad (\text{C.1})$$

Desarrollo hasta orden lineal en δn nos da las expresiones para $\bar{\Omega}$ y $\bar{\Omega}^{(2)}$, que son independientes de las reglas de colisión:

$$\begin{aligned} \bar{I}_i(n, \nu) &= \bar{\Omega}_{ij}^{(1)} \nu_j + \bar{\Omega}_{ijl}^{(2)} \nu_j \delta n_l + \dots \\ &= \sum_{p=2}^b \sum_{[p] \subset [b]} \{ -\nu_i + \nu_{i^*} \} f^{p-1} (1-f)^{b-p} \\ &\quad + \sum_{p=2}^b \sum_{[p] \subset [b]} \left\{ \left[-\nu_i \sum_{m \in [p]-i} \delta n_m + \nu_{i^*} \sum_{m^* \in [p^*]-i^*} \delta n_{m^*} \right] (1-f) \right. \\ &\quad \left. + \left[\nu_i \sum_{m \in [b]-[p]} \delta n_m - \nu_{i^*} \sum_{m^* \in [b]-[p^*]} \delta n_{m^*} \right] f \right\} f^{p-2} (1-f)^{b-p-1}. \quad (\text{C.2}) \end{aligned}$$

En la ecuación (9.26) queremos relacionar los operadores $\bar{\Omega}$ con $\bar{\Omega}^{(2)}$ actuando sobre productos de invariantes de colisión. Por ello, reemplazamos

ν_i por $a_i^s = 1$ y δn_i por $a_i = \{1, c_i\}$ con el resultado:

$$\begin{aligned}\bar{\Omega}_{ij} a_j^s &= \sum_{p=2}^b \sum_{[p] \subset [b]} \{ -a_i + a_i^* \} f^{p-1} (1-f)^{b-p} \\ \bar{\Omega}_{ijl}^{(2)} a_j^s a_l &= \sum_{p=2}^b \sum_{[p] \subset [b]} \left\{ \left[- \sum_{m \in [p]-i} a_m + \sum_{m \in [p^*]-i^*} a_m^* \right] (1-f) \right. \\ &\quad \left. + \left[\sum_{m \in [b]-[p]} a_m - \sum_{m \in [b]-[p^*]} a_m^* \right] f \right\} f^{p-2} (1-f)^{b-p-1}. \quad (C.3)\end{aligned}$$

Como a_m es conservada en cualquier colisión, verifica que:

$$\sum_{m \in [p]} a_m = \sum_{m \in [p^*]} a_m^*. \quad (C.4)$$

Entonces el segundo término en (C.3) se cancela exactamente, dando:

$$\bar{\Omega}_{ijl}^{(2)} a_j^s a_l = \sum_{p=2}^b \sum_{[p] \subset [b]} f^{p-2} (1-f)^{b-p} [a_i - a_i^*]. \quad (C.5)$$

Comparando con la primera línea de (C.3) obtenemos la igualdad deseada:

$$\bar{\Omega}_{ijk}^{(2)} a_j^s a_k^\mu = -\frac{1}{f} \bar{\Omega}_{ij} a_j^s a_j^\mu, \quad (C.6)$$

que ha sido empleada en la deducción de la teoría del acoplamiento de los modos en el capítulo 9.

Publicaciones

El contenido original de esta tesis aparece publicado en los artículos:

- “*Staggered Diffusivities in Lattice Gas Cellular Automata*”, R. Brito, M.H. Ernst y T.R. Kirkpatrick, *J. Stat. Phys.* **62**, 283 (1991).
- “*Soft Modes in CA-Fluids at Finite Wave Numbers*”, R. Brito, M.H. Ernst y T.R. Kirkpatrick, *Proceeding Euromech Colloquium 267. Series on Advanced Mathematics for Applied Sciences*. A.S. Alves, Ed. Coimbra, Portugal (World Scientific, Singapore). Pag 198 (1991).
- “*Green-Kubo Formulas for Staggered Transport Coefficients in CA-fluids*”, R. Brito y M.H. Ernst, *Proceedings of Workshop on Numerical Methods for the Simulation of Multi-Phase and Complex Flow*. (Springer Verlag, Berlin). Pag 10 (1992).
- “*Lattice Gases in Slab Geometries*”, R. Brito y M.H. Ernst, *Phys. Rev. A* **44**, 8384 (1991).
- “*Ring Kinetic Theory for Tagged Particle Problems in Lattice Gases*”, R. Brito y M.H. Ernst, *Phys. Rev. A* **46**, 15 Julio 1992.
- “*Stress-Stress Correlation Function in Lattice Gases beyond the Boltzmann Approximation*”, G.A. van Velzen, R. Brito y M.H. Ernst, *J. Stat. Phys.*, en prensa.
- “*A Fluctuation Formula for the Non-Galilean Factor in Lattice Gas Automata*”, R. Brito, H.J. Bussemaker y M.H. Ernst, *J. Phys.* A enviado.

Referencias

- Alder B.J. y Alley E., *Physics Today* 56, enero 1984.
- Alder B.J. y Wainwright T.E., *Phys. Rev. A* 1, 18 (1970).
- Alves A.S., ed. *Proceedings Euromech Colloquium 267. Series on Advanced Mathematics for Applied Sciences*. Coimbra, Portugal (World Scientific, Singapore, 1991).
- Balescu R., *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (John Wiley, Nueva York, 1975).
- Berlenkamp E.R., Conway J.H. y Guy J.R., *Winning Ways for your Mathematical Plays*, 2 (Academis Press, 1984).
- Bernadin D., Sero-Guillaume O.E. y Sun C.H. *Physica D* 47, 169 (1991).
- Bernadin D., Sero-Guillaume O.E. y Sun, C.H. ver referencia [Alves 91], pag. 72.
- Binder P.M. y Ernst M.H., *Physica A* 164, 91 (1990)..
- Binder P.M. y Frenkel D., *Phys. Rev. A* 42, 2463 (1990).
- Boon J.P., Grosfils P., Brito R. y Ernst M.H., en preparación.
- Boon J.P. y Yip S., *Molecular Hydrodynamics* (Dover, Nueva York, 1980).
- Brosa U. y Stauffer D., *J. Phys. A* 57, 399 (1989)..
- Bussemaker H.J. y Ernst M.H., Proceedings LGCA '91, *J. Stat. Phys.* , (1992). Ver también ref [Frisch *et al* 86].
- Chapman S. y Cowling T.G., *The Mathematical Theory of Nonuniform Gases* (Cambridge University Press, 1970).

- Chen S., Diemer K., Doolen G.D., Eggert K., Fu C., Gutman S. Travis B.J., en [Doolen 91] página 72 (1991).
- Chopard B. y Droz M., *Phys. Lett. A* **126**, 476 (1988).
- Cohen E.G.D., *Physics Today*, 64, enero 1984.
- Coxeter H.S.M., *Regular Polytopes* (mcMillan, 1963).
- Das S.P., Bussemaker H.J. y Ernst M.H., preprint, Universidad de Utrecht, 1992.
- Despain A., Max C.E., Doolen G. y Hasslacher B., en [Doolen 90] página 211 (1990).
- Dijkstra M., preprint, Universidad de Utrecht, 1991.
- Dijkstra M., van der Hoef M.A. y Frenkel D., *Europhys. Lett.* **17**, 39 (1992).
- Doolen G.D., en *Whither turbulence? Turbulence at the crossroads, Lecture notes in Physics* J.L. Lumley, Ed. (Springer Verlag, 1989).
- Doolen G.D., ed., *Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations*, (Addison-Wesley Publishing Company, 1990).
- Doolen G.D., ed., *Lattice Gas Methods for PDE's. Theory, Applications and Hardware*, *Physica D*, **47** (1991).
- Dorfman J.R. y van Beijeren H., *Statistical Mechanics, Part B: Time Dependent Processes*, B.J. Berne, editor (Plenum Press, New York, 1977), página 65.
- Einstein A. *Investigations in the Theory of Brownian Motion* (Dover, Nueva York, 1956).
- Ernst M.H., en *Fundamental Problems en Statistical Mechanics VII*, H. van Beijeren, Ed., (North Holland Publ. Co. Amsterdam, 1990) página 321.
- Ernst M.H., en *Ordering Phenomena in Condensed Matter Physics. 26th Karpacz Winterschool of Theoretical Physics*, Pekalski A. ed. (World Scientific Publishing Company, 1990).

- Ernst M.H., *Liquids, Freezing and the Glass Transition, Les Houches, Session LI, 1989*, D. Levesque, J.P. Hansen y J. Zinn-Justin, eds. (Elsevier, Science Publ, Amsterdam, 1991), página 43.
- Ernst M.H., en [Doolen 91], página 198 (1991).
- Ernst M.H. y Das S.P., *J. Stat. Phys.* **66**, 465 (1992).
- Ernst M.H. y Dorfman J.R., *Physica A* **61**, 137 (1979)..
- Ernst M.H. y Dufty J.W., *Phys. Lett. A* **138**, 391 (1989).
- Ernst M.H. y Dufty J.W., *J. Stat. Phys.* **58**, 57 (1990).
- Ernst M.H., Hauge E. y van Leeuwen J.M.J., *Phys. Rev. A* **4**, 2055 (1971).
- Ernst M.H., Hauge E. y van Leeuwen J.M.J., *J. Stat. Phys.* **15**, 7 (1976).
- Ernst M.H. y Naitoh T., *J. Phys. A* **24**, 2555 (1991)..
- Ernst M.H. y Santos A., en preparación (1992).
- Erpenbeck J.J. y Wood W.W., *Phys. Rev. A* **26**, 1648 (1982). Erpenbeck J.J. y Wood W.W., *Phys. Rev. A* **32**, 412 (1985).
- Frisch U., Hasslacher B. y Pomeau Y., *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1505 (1986).
- Frisch U., d'Humières D., Hasslacher B., Lallemand P., Pomeau Y. y Rivet J.P. *Complex Systems* **1**, 649 (1987); reimpresso en [Doolen 90], página 75.
- Frenkel D. y Ernst M.H., *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2165 (1989).
- Gatignol R., *Théorie Cinétique des Gaz à Répartition Discrète des Vitesses, Lecture Notes in Physics*, **36** (Springer Verlag, Berlin, 1975).
- Gerits M., preprint, Universidad de Utrecht, (1992).
- Grosfils P., Boon J.P. y Lallemand P., *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1077 (1992).
- Hansen J.P. y Mac Donald I., *Theory of Simple Liquids*, (Academic Press, Londres, 1986).
- Hardy J., Pomeau Y. y de Pazzis O., *J. Math. Phys.* **14**, 1746 (1973).
- Hardy J., de Pazzis O. y Pomeau Y., *Phys. Rev. A* **13**, 1949 (1976).

- Henon M., *Complex Systems* **1**, 475 (1987).
- Henon M., Proceedings LGCA '91, *J. Stat. Phys.*, (1992).
- Higuera F.J., Jimenez J., *Europhys. Lett.* **9**, 663 (1989).
- Higuera F.J., Succi S. y Benzi R., *Europhys. Lett.* **9**, 345 (1989).
- Higuera F.J. y Succi S., *Europhys. Lett.* **9**, 517 (1989).
- d'Humières D. y Lallemand P., *Complex Systems* **1**, 599 (1987); reimpresso en [Doolen 90] página 299.
- d'Humières D., Lallemand P. y Searby, G., *Complex Systems* **1**, 633 (1987); reimpresso en [Doolen 90] página 335.
- d'Humières D., Lallemand P. y Frisch U., *Europhys. Lett.* **2**, 291 (1986).
- d'Humières D., Qian Y.H. y Lallemand P., *Discrete Kinematic Theory, Lattice Gas Dynamics and Foundations of Hydrodynamics*, R. Monaco, ed., página 102 (World Scientific, 1989)
- Kadanoff L.P., McNamara G.R. y Zanetti G., *Phys. Rev. A* **40**, 4527 (1989).
- Kadanoff L.P. y Swift J., *Phys. Rev.* **165**, 310 (1968).
- Kirkpatrick T.R. y Ernst M.H., *Phys. Rev. A* **44**, 8051 (1991).
- Landau L.D., Lifshitz E.M., *Fluid Mechanics*, (Pergamon Press, Oxford, 1959).
- Leegwater, J.A., Tesis doctoral, Universidad de Utrecht (1991).
- Leegwater J.A. y Szamel G., *Phys. Rev. Lett.* **67**, 408 (1991).
- Luo S.H., Chen H., Chen S., Doolen G.D. y Lee Y.C., *Phys. Rev. Lett.* **43**, 7097 (1991).
- Margolus N., Toffoli T. y Vichniac G., *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1694 (1986).
- McLennan J.A., *Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Prentice Hall, 1989).
- McNamara R. y Zanetti G., *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2332 (1988); reimpresso en [Doolen 90], página 289.

- Naitoh T., Ernst M.H. y Dufty J.W., *Phys. Rev. Lett.* **42**, 7187 (1990).
- Naitoh T. y Ernst M.H., en [Alves 91], página 166 (1991).
- Naitoh T., Ernst M.H., van der Hoef M.A. y Frenkel D., *Phys. Rev. A* **44**, 2484 (1991) y preprint, Universidad de Utrecht (1991).
- Neumann J. von, *Theory of Self-Reproducing Automata* (Univ. of Illinois Press, 1966).
- Nielsen H.B. y Ninomiya N., *Nucl. Phys. B* **185** 20 (1981).
- Noullez A. Tesis doctoral, Universidad Libre de Bruselas (1990).
- Press W.H., Flannery B.P., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1989)
- Rechtman R. y Salcido A., en [Alves 91] página 208 (1991).
- Resibois P. y de Leener M., *Classical Kinetic Theory of Fluids*, (John Wiley, Nueva York, 1977).
- Rivet J.P. y Frisch U., en [Doolen 90] página 443.
- Rothman D.H. y Keller J.M., *J. Stat. Phys.* **52**, 1119 (1988). Reimpreso en [Doolen 90] página 275.
- Rothman D.H. y Zaleski S., *J. Phys. (París)*, **50** 2161 (1989).
- Schiff L.I., *Quantum Mechanics* (McGraw Hill, Nueva York, 1968)
- Schmitz R. y Dufty J.W., *Phys. Rev. A* **41**, 4294 (1990).
- Stauffer D., *J. Phys. A* **24**, 909 (1991)..
- Succi S. Vergassola M. y Benzi R. *Phys. Rev. A* **43**, 4521 (1991). Succi S., Benzi R. y Higuera F., en [Doolen 91] página 219 (1991). Succi S., Benzi R. y Vergassola M., en [Alves 91] página 93 (1991).
- Taylor IV, W. y Boghosian, B., preprint Los Alamos TMC-208, Octubre 1991.
- Toffoli T. y Margolus N., *Cellular Automata Machines*, (The MIT Press, Cambridge, MA).

- van Velzen G.A., Tesis doctoral, Universidad de Utrecht, 1990.
- van der Hoef M.A. y Frenkel D., *Phys. Rev. A* **41**, 4277 (1990).
- van der Hoef M.A. y Frenkel D., en [Doolen 91] página 191 (1991).
- van der Hoef M.A. y Frenkel D., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1591 (1991).
- van Kampen N.G., *Stochastic processes in Physics and Chemistry*, (North Holland, Amsterdam, 1981).
- Wolfram S., *J. Stat. Phys.* **45**, 471 (1986).
- Zanetti G., *Phys. Rev. A* **40**, 1539 (1989).
- Zanetti G., en [Doolen 91] página 30 (1991).

reunido el Tribunal que suscribe
 en el día de la fecha acordó cali-
 ficar la presente Tesis Doctoral
 con la censura de-

Apto con honores (unanimidad)

Madrid, 10 de junio 1992

J. M. T. R. C. B. J.
J. M. T. R. C. B. J.
J. M. T. R. C. B. J.
J. M. T. R. C. B. J.
 Juan Soler