

# Hidrodinámica: ESCALAS, Métodos y teorías

Autor: Rafael Delgado Buscalioni

rafael.delgado@uam.es

- Hipótesis: - continuo

$l$  = escala resolución hidrodinámica

$$Kn = \frac{\lambda}{l} < 1$$

nº de Knudsen

$$\lambda = 0.2 n^{-1} \sigma$$

RECORRIDO LIBRE MEDIO

( $n$  = densidad) (Esferas duras)

- Equilibrio térmico Local

$\tau_{col} < t_{HYDRO}$ ,  
tiempo entre colisiones

$$\tau_{col} \approx 0.14 n^{-1} T^{-1/2} \left(\frac{m\sigma}{\epsilon}\right)^{1/2}$$

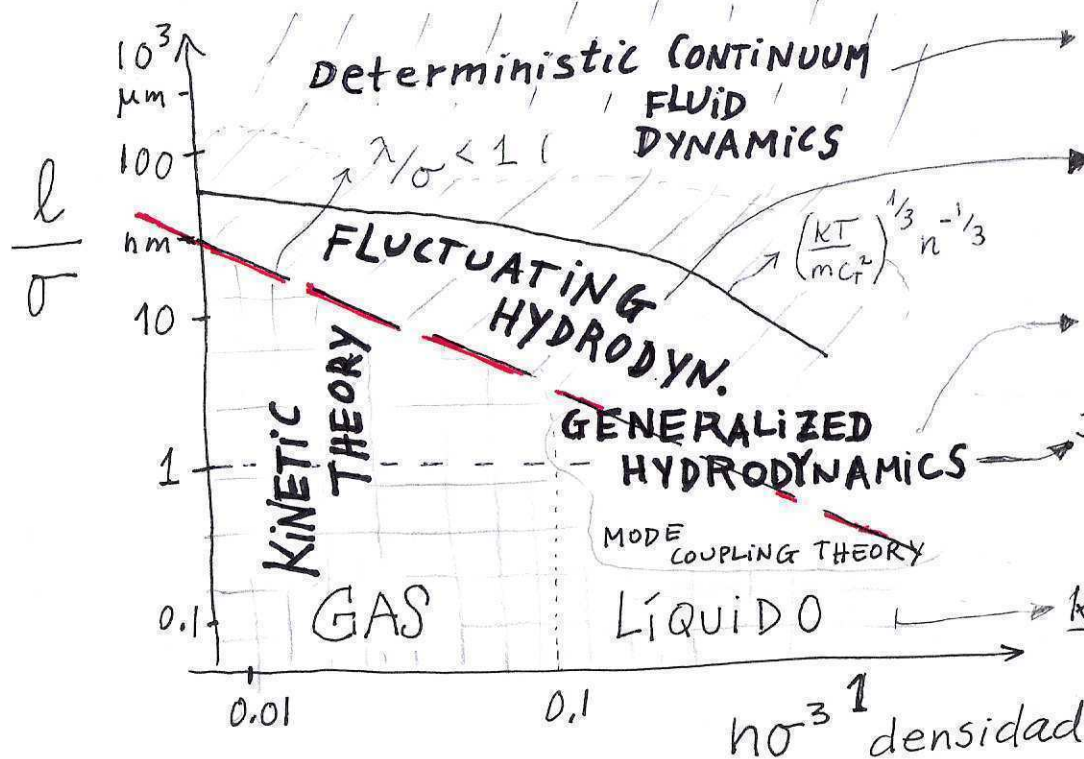
Esferas duras

- FLUCTUACIONES

$$\frac{\sigma_M^2}{M^2} = \frac{kT}{m c_T^2} \frac{1}{nV} ; \frac{\sigma_M}{M} < 0.05 \Rightarrow l^3 < \left(\frac{kT}{m c_T^2}\right) \frac{10^3}{n}$$

- Teoría cinética  $l \approx \sigma$ ;  $\sigma$  = diámetro molecular

escala resolución hidro.



Tritton, Physical fluid Dynamics · OXFORD SCI.

SPRINGER

- Keizer, Statistical thermod. of non-equibr. pr.
- Landau, Fluid Mechanics, Springer
- S.R. de Groot & P. Mazur  
Non-equilibrium thermodynamics, Dover.

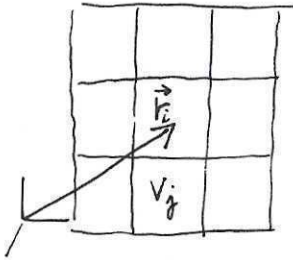
• J.P. Boon & S. Yip. Molecular Hydrodynam.  
Dover Publ. (1991)

J.P. Hansen & I.R. McDonald,  
theory of simple liquids  
Academic Press (1986)

Kennard, kinetic theory of gases  
with an introduction to Stat. Mech.  
McGraw Hill, 1938.

# FORMULACIONES DE LA HIDRODINÁMICA + CONSERVACIÓN DE MASA -

## FORMULACIÓN EULERIANA



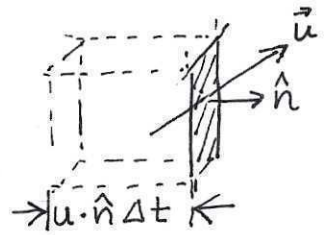
VOLUMEN TOTAL  $V = \bigcup_{i=1}^N V_i(\vec{r}_i)$

$$\frac{dM_i}{dt} \neq 0 ; \frac{dV_i}{dt} = 0$$

DIVISIÓN EN VOLUMENES FIJOS, MASA VARIABLE

$$\vec{u}_i = u(\vec{r}_i, t) \text{ CAMPO VELOCIDAD}$$

### FLUJO DE MASA



$$\delta M = -\rho u \cdot \hat{n} \Delta t \delta S$$

$$\frac{\delta M}{\delta t} = -\rho \vec{u} \cdot \hat{n} \delta S$$

$$M = \int_V \rho dV \rightarrow \frac{dM}{dt} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_S \rho \vec{u} \cdot \hat{n} ds$$

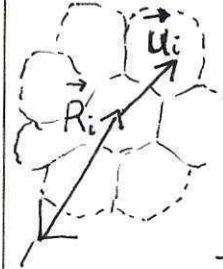
USANDO T.M.A. STOKES

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \vec{u})$$

ECUACIÓN EN FORMA CONSERVATIVA:

FLUJO MASA  $\vec{j} = \rho \vec{u}$

## FORMULACIÓN LAGRANGIANA

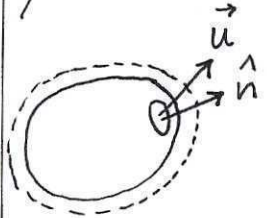


$$V = \bigcup_{i=1}^N V_i[\vec{R}_i(t)]$$

Elementos de fluido móviles, siempre con la misma masa

$$\frac{dM_i}{dt} = 0 ; \frac{dV_i}{dt} \neq 0$$

$$\vec{u}_i = \frac{d\vec{R}_i}{dt} \text{ veloc. elemento fluido ("partícula fluida")}$$



TASA CAMBIO VOLUMEN

### CONSERVACIÓN DE MASA

$$M = \rho V$$

$$\frac{dM}{dt} = V \frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{dV}{dt} = 0$$

$$\frac{d\rho}{dt} + \frac{\rho}{V} \frac{dV}{dt} = 0$$

$$\Delta V = \int_S \vec{u} \cdot \hat{n} \Delta t dS \text{ T.M.A. STOKES}$$

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} = \int_V \nabla \cdot \vec{u} dV$$

• para  $V \rightarrow 0$   
 $\nabla \cdot \vec{u} = \text{cte en } V$

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \nabla \cdot \vec{u}$$

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \vec{u}$$

### DERIVADA MATERIAL

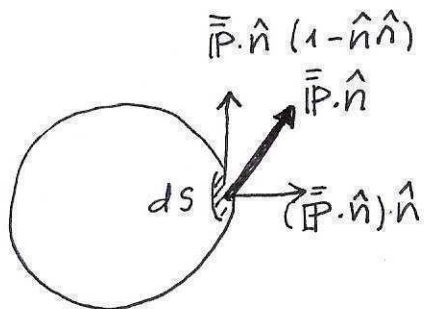
$$\rho = \rho(\vec{r}, t)$$

$$\delta \rho = \frac{\partial \rho}{\partial \vec{r}} \delta \vec{r} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \delta t$$

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho$$

NOTA: La conversión de la solución LAGRANGIANA  $\leftrightarrow$  EULERIANA NO ES TRIVIAL, SOBRE TODO EN FLUJOS NO-ESTACIONARIOS

# Hidrodinámica: Conservación de momento



$$\int_V \rho \frac{d\vec{u}}{dt} dV = - \int_S \bar{P} \cdot \hat{n} ds = - \int_V \nabla \cdot \vec{P} dV$$

2ª Ley Newton

1ª Ley Newton: fuerza que hace el fluido sobre la superf. (acción-reacción)

lim  $v \rightarrow 0$

$$\rho \frac{d\vec{u}}{dt} = - \nabla \cdot \vec{P}$$

FORMA LAGRANGIANA

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} = - \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + \vec{P})$$

(prod. diádico)

FORMA CONSERVATIVA

TENSOR DE PRESIONES

$$\bar{P} = p \mathbb{1} - \bar{\tau}$$

$p$  = presión (escalar):

$$p = P_{MEC} + P_{TER} + P_{HID}$$

{ presión mecánica:  $P_{MEC}$   
 presión termodinámica:  $P_{TER} = P(p, T)$   
 presión hidrostática:  $-\nabla P_{HID} \cdot \hat{k} = \rho g$

$\bar{\tau}$  = Tensor de esfuerzos (stress tensor)

$$\bar{\tau} = \frac{1}{2} (\tau + \tau^T) + \frac{1}{2} (\tau - \tau^T)$$

parte SIMÉTRICA  
ASOCIADA A ESFUERZO DE DEFORMACIÓN

ANTISIMÉTRICA:  
ESF. ROTACIÓN

CONSERVACIÓN MOMENTO ANGULAR

→ CRISTALES LÍQUIDOS  
 • Chandrasekhar, Liquid Crystals Cambridge Univ. Press (1992)  
 • P.G. De Gennes, The Physics of Liq. Cryst. Clarendon Press (1974)

• Fluidos NEWTONIANOS

$$\bar{\tau} = \tau^s = \eta (\nabla u + \nabla u^T) = \frac{2}{3} (\eta + \xi) \nabla \cdot u$$

$\eta$  = VISCOS. CIZALLA

VISCOSIDAD DILATACIONAL

$\xi$  = BULK VISC.

$$\eta = \frac{\tau_{xy}}{\frac{du_y}{dx}} \quad \text{independiente de } \frac{du_y}{dx}$$

• NO NEWTONIANOS

$$\eta = \eta(\nabla u, \dots)$$

• VISCOELÁSTICOS

$$\eta = \eta(t)$$

# Condición de incompresibilidad, n° de MACH

- La Ec. de momento

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \bar{u} \bar{u} + P \mathbb{1} - \bar{\tau})$$

tomo divergencia  $\nabla \cdot$

$$\frac{\partial \nabla \cdot \rho \bar{u}}{\partial t} = -\nabla^2 \rho \bar{u} \bar{u} - \nabla^2 P + \nabla^2 \bar{\tau}$$

USO Eq. MASA

$$-\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla^2 P = -\nabla^2 (\rho \bar{u} \bar{u}) + \nabla^2 \bar{\tau}$$

- Ec. de masa (conservación)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \bar{u}) \quad \#$$

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \bar{u}$$

( $\rho$  cte  $\Rightarrow \nabla \cdot \bar{u} = 0$ ) INCOMPRESIBLE

- PRESIÓN TERMODINÁMICA Y MECÁNICA:

$$P = P_T + P_M ; \delta P_T = c^2 \delta \rho ; c^2 = \left( \frac{\partial P_T}{\partial \rho} \right)_s \quad \begin{matrix} \text{VELOCIDAD} \\ \text{SONIDO} \end{matrix}$$

$$(1) \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial P_T}{\partial t} - \nabla^2 P_T + \nabla^2 \bar{\tau} = \nabla^2 [P_M + \rho \bar{u} \bar{u}] \rightarrow \begin{matrix} \text{Vease "ACOUSTIC FILTERING"} \\ \text{filtrado ondas sonido} \\ \text{(Paolucci)} \end{matrix}$$

ONDA DE SONIDO AMORTIGUADA
presión mecánica y fuerzas de inercia (convección)

- ANÁLISIS DE TIEMPOS

$$t_{\text{SÓNICO}} \sim L/c ; t_{\text{MECÁNICO}} \sim L/U ; \frac{t_{\text{SÓNICO}}}{t_{\text{MECÁNICO}}} = \frac{U}{c} \equiv Ma \quad (\text{n° de Mach})$$

- VARIACIONES DE DENSIDAD:  $\Delta P_M \sim \rho U^2$   
USANDO BALANCE (1)  $\rightarrow \Delta P_M \sim \Delta P_T \sim c^2 \delta \rho$

$$\rho U^2 \sim c^2 \delta \rho \Rightarrow \frac{\delta \rho}{\rho} \sim \frac{U^2}{c^2} = Ma^2$$

LOS SALTOS RELATIVOS DE DENSIDAD DEBIDO A LAS FUERZAS MECÁNICAS DEL FLUJO SON  $O(Ma^2)$   
INCOMPRESIBILIDAD -  $Ma \sim 0.1$

- FLUIDO NEWTONIANO INCOMPRESIBLE

$$\delta \rho = 0 \Rightarrow \nabla \cdot \bar{u} = 0 \Rightarrow \nabla^2 \bar{\tau} \propto \eta \nabla^2 (\nabla \cdot \bar{u}) = 0$$

$$(1) \Rightarrow \nabla^2 P = -\rho \nabla^2 (\bar{u} \bar{u}) \quad (P = P_{\text{MEC.}})$$

ECUACION DE POISSON PARA LA PRESIÓN

$\rightarrow$  R. Peyret. Spectral Methods for incompressible viscous flows, SPRINGER (2002)

# Hidrodinámica: Conservación de energía.

## FORMA LAGRANGIANA

$$\rho \frac{de}{dt} = -p \nabla \cdot \vec{u} + \vec{\tau} : \nabla \cdot \vec{u} - \nabla \cdot \vec{q}$$

$$e = \frac{E}{M}, \text{ por unidad de masa}$$

$$\rho = V^{-1} \text{ densidad (numérica)}$$

$$\rho e = \underbrace{\frac{1}{2} \rho u^2}_{\text{Energía cinética}} + \underbrace{\phi}_{\text{Energía potencial}}$$

Trabajo reversible de presión  
(Recordad  $\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \nabla \cdot \vec{u}$ )

CALOR DISIPADO POR FUERZAS MECÁNICAS (irreversible)

$$\vec{\tau} : \nabla \vec{u} = \sum_{i,j} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

CALOR DISIPADO POR CONDUCCIÓN:

FOURIER'S LAW:

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T$$

↓  
gradiente térmico.

$\kappa$ : conductividad térmica

## FORMA CONSERVATIVA (EULERIANA)

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho e \vec{u} + \vec{P} \cdot \vec{u} + \vec{q}]$$

CALOR POR DISIPACIÓN VISCOSA (1)

$$\phi_\eta = \vec{\tau} : \nabla \vec{u} \quad ; \quad \text{PARA FLUID. NEWTONIANO}$$

$$\phi_\eta \sim \eta \left( \frac{du_x}{dx} \right)^2 = \eta \dot{\gamma}^2 \quad \text{shear rate}$$

CALOR POR CONDUCCIÓN TÉRMICA:

$$\nabla \cdot \vec{q} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

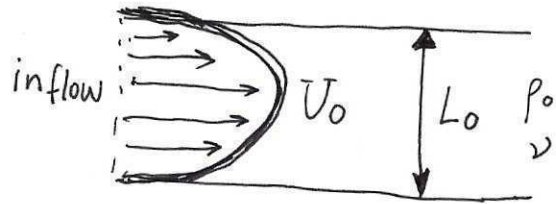
si  $\vec{\phi}_\eta \sim \nabla \cdot \vec{q} \Rightarrow$

AGUA:  $\frac{\eta}{\kappa} \sim 10^{-3}$  (S.I.)

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \sim \left( \frac{\eta}{\kappa} \right) \dot{\gamma}^2 \quad \text{DES PRECIABLE EN LA ESCALA MACROSCÓPICA}$$

• SIGNIFICATIVO EN SIMULACIONES  
 $\dot{\gamma} \sim 10^{12} \text{ s}^{-1} \rightarrow$  DINÁMICA MOLECULAR

# HIDRODINÁMICA: CONVECCIÓN Y DIFUSIÓN



• Velocidad característica del fluido,  $U_0$

• Longitud característica del sistema,  $L_0$

• Viscosidad cinemática,  $\nu = \eta / \rho_0$ ;  $[\nu] = \frac{l^2}{t}$

## • ESCALAS DE TIEMPO

- Convección:  $t_c \sim \frac{L_0}{U_0}$ ; difusión de momento (viscosidad):  $t_d \sim \frac{L_0^2}{\nu}$

- NÚMERO DE REYNOLDS  $\rightarrow$

$$Re = \frac{t_d}{t_c} = \frac{L_0 U_0}{\nu} \sim \frac{\text{convección}}{\text{difusión}}$$

$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$  FLUIDO INCOMPRESIBLE

• ECUACIÓN MOMENTO ADIMENSIONAL

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{Re} \left[ \nabla^2 \vec{u} + \frac{1}{3} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] + \vec{f}$$

$\vec{u}^* = \vec{u} U_0$ ;  $t^* = t L_0 / U_0$ ;  $\vec{f}^* = \vec{f} \rho_0$ ;  $P^* = P \rho_0 U_0^2$ ; \* indica cantidad con dimensión

## • (ALGUNAS) FUERZAS DE VOLUMEN

- CONVECCIÓN NATURAL (BUOYANCY):  $\vec{f} = \rho \vec{g} = (\rho_0 + \delta \rho) \vec{g} = \rho_0 \vec{g} + \vec{g} \alpha \Delta T$

• TRITTON; PHYSICAL FLUID DYNAMICS

• TURNER; BUOYANCY EFFECTS IN FLUIDS, CAMBRIDGE UNIV. PRESS (1973)

- ROTACIÓN

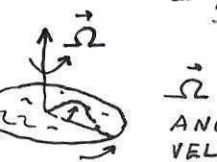
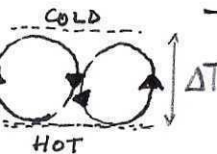
$$\vec{f} = \underbrace{-\vec{\Omega} \times (\vec{\Omega} \times \vec{r})}_{F. \text{ CENTRÍFUGA}} - \underbrace{2 \vec{\Omega} \times \vec{u}}_{F. \text{ CORIOLIS}}$$

$\vec{\Omega}$  ANGULAR VELOCITY;  $\vec{r}$  distancia AL eje

SE EQUILIBRA CON LA PRESIÓN HIDROSTÁTICA

COEFICIENTE EXPANSIÓN TÉRMICA

ACOPLADA CON EQ. ENERGÍA



NÚMEROS

RAYLEIGH  $Ra = \frac{g \alpha \Delta T L^3}{\nu \kappa}$

ROSSBY  $Ro = U_0 / \Omega L$

SEEQUILIBRA CON  $P_{HYDRO} = \frac{1}{2} \rho \Omega^2 r^2$

# MODOS HIDRODINÁMICOS

Vease: J.P. Boon & Yip, Molecular Hydrod. R.D-B & Coveney: Phys.Rev.E, 67, 046704 (2003)

o Relajación hidrodinámica al equilibrio termodinámico  $(p_0, T_0, \rho_0)$

o Correlación temporal de las fluctuaciones de origen térmico.

o Perturbaciones infinitesimales  $p = p_0 + \delta p$ ,  $\vec{u} = \delta \vec{u}$ ;  $T = T_0 + \delta T$   
 $\delta \vec{u} = \delta u \hat{q} \rightarrow$  dirección velocidad perturb.

Sin pérdida de generalidad  $\hat{q} = \hat{i}$  (dirección  $x \rightarrow$  Longitudinal  
 direcciones  $y, z \rightarrow$  transversales)

o Relaciones termodinámicas

presión  $\delta p = \frac{m c_s^2}{\gamma} [p_0 \alpha \delta T - \delta p]$  ;  $\delta Q = p_0 c_v (\delta T - \frac{\gamma-1}{p_0 \alpha} \delta p) \rightarrow$  CALOR (Entropía  $\times T_0$ )

energía  $\delta e = c_v \delta T + \left(\frac{\delta e}{\delta p}\right)_{T_0} \delta p$  ;  $\delta j_x = p_0 \delta u_x$ ;  $\delta j_y = p_0 \delta u_y$ ;  $\delta j_z = p_0 \delta u_z$

volumen

CORRIENTE LONGITUDINAL      CORRIENTES TRANSVERSALES

o Ecuaciones Linearizadas + Laplace - Fourier transformation:  $\hat{\delta \Phi}_{\hat{q}}(s) = \int_0^\infty dt e^{-st} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 r e^{i\hat{q} \cdot \vec{r}} \delta \phi(\vec{r}, t)$

$$\begin{pmatrix} s & 0 & iq & 0 & 0 \\ 0 & s + \kappa \gamma q^2 & iq \frac{\gamma-1}{p_0 \alpha} & 0 & 0 \\ \frac{iq c_s^2}{\gamma} & iq \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_p & s + \nu_B q^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s + \nu q^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s + \nu q^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\delta p}_q \\ \hat{\delta T}_q \\ \hat{\delta j}_{x,q} \\ \hat{\delta j}_{y,q} \\ \hat{\delta j}_{z,q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta p_q(0) \\ \delta T_q(0) \\ \delta j_x(0) \\ \delta j_y(0) \\ \delta j_z(0) \end{pmatrix}$$

8.

$$\mathbb{M} \delta \Phi_{\hat{q}}(s) = \delta \Phi_{\hat{q}}(0)$$

AUTOVECTORES DE  $\mathbb{M} \Rightarrow$

$$s_{\mathbb{I}} \delta \Psi_{\hat{q}}^{(\mathbb{I})}(s) = \delta \Psi_{\hat{q}}^{(\mathbb{I})}(0)$$

$$\delta \Psi_{\hat{q}}^{(\mathbb{I})}(t) = e^{s_{\mathbb{I}} t} \delta \Psi_{\hat{q}}^{(\mathbb{I})}(0)$$

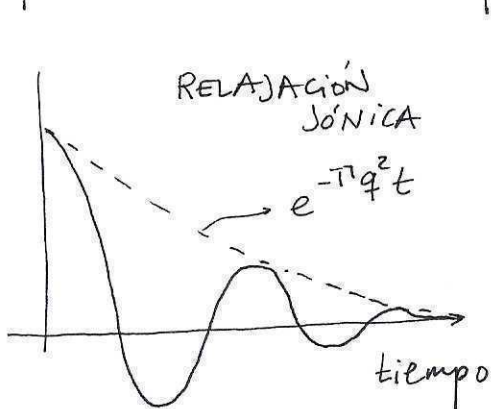
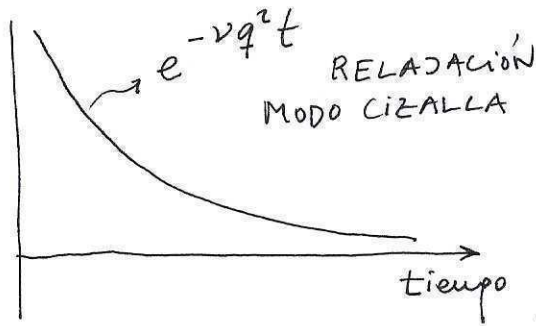
# MODOS HIDRODINÁMICOS

MODO DE CIZALLA

DIFUSIÓN DE VORTICIDAD

$$\delta j_q(t) = e^{-\nu q^2 t} \delta j_q$$

$$\langle \delta j_q(t) \delta j_q(0) \rangle = \langle \delta j_q^2 \rangle e^{-\nu q^2 t}$$



MODO SÓNICO

Acoplamiento

Corriente longitudinal  
(compresión/dilatación)  
y presión

$$\delta j_{s,q}(t) = e^{\pm i c_s q t - \Gamma q^2 t}$$

$c_s$  = veloc. sonido  
(adiabática)

$$\Gamma = \frac{1}{2} (\nu_B + (\gamma - 1) \kappa)$$

$$\nu_B = \frac{4}{3} \nu + \frac{\zeta}{\rho}$$

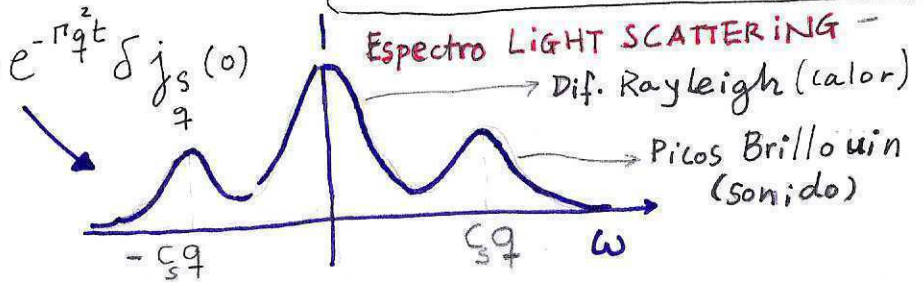
viscosidad longitudinal

$\Gamma$ : absorción sónica

CORRELACIÓN DENSIDAD

$$\langle \delta \rho_q(t) \delta \rho_q(0) \rangle = -\frac{\alpha}{c_p} e^{-k q^2 t} \langle \delta \rho \frac{\text{dif. Calor}}{\delta Q(0)} \rangle +$$

$$\left. \begin{aligned} &+ \frac{1}{m c_s^2} \cos(c_s q t) e^{-\Gamma q^2 t} \delta P_q(0) \\ &+ \frac{1}{c_s} \sin(c_s q t) e^{-\Gamma q^2 t} \delta j_{s,q}(0) \end{aligned} \right\} \text{sonido}$$



MODO ENTROPICO

DIFUSIÓN DE CALOR

$$\delta Q = -T_0 \delta S \rightarrow \text{ENTROPÍA}$$

$$\delta Q_q(t) = e^{-k q^2 t} \delta Q_q(0)$$

• ACOPLAMIENTO MOMENTO-ENERGÍA

$$\delta Q = p_0 c_v \left[ \delta T - \frac{\gamma - 1}{p_0 \alpha} \delta p \right]$$

$$\delta P = \frac{m c_s^2}{\gamma} \left[ p_0 \alpha \delta T - \delta p \right]$$

•  $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$  coef ADIABÁTICO.

PARA  $\gamma = 1$

MOMENTO Y ENERGÍA DESACOPLAN

$$\delta Q = p_0 c_v \delta T$$

(EJEMPLO: AGUA LÍQUIDA  $\gamma \approx 1$ )  
<sub>H<sub>2</sub>O</sub>

(En general:  $\gamma = 1 \Rightarrow$  INCOMPRESIBILIDAD)



# Técnicas para resolver hidrodinámica del continuo

## ASPECTOS GENERALES Y BIBLIOGRAFÍA.

- ECUACIONES DE EVOLUCIÓN TEMPORAL EN DERIVADAS PARCIALES:  $\partial_t u = LU + NL$

PARTES DEL PROBLEMA

$\downarrow$   
 OPERADOR LINEAL

$\downarrow$   
 TÉRMINOS NO-LINEALES Y FUERZAS EXTERNAS.

### BIBLIOGRAFÍA

### ① DISCRETIZACIÓN ESPACIAL

- DIFERENCIAS FINITAS.  
Basado en desarrollo de Taylor.

- Elementos Finitos
- VOLUMENES FINITOS
- MÉTODOS ESPECTRALES

}

MÉTODO DE LOS RESIDUOS PONDERADOS (WEIGHTED RESIDUALS)

DIFERENCIAS FINITAS  
R. Peyret; computational methods for Fluid Flow, SPRINGER 1982

MÉT. RESIDUOS POND.  
Finlayson, the method of weighted Residuals and Variational principl. Academic Press (1972)

Métodos Espectrales  
Canuto, Hussani, Quarteroni, Zang Spectral Methods in Fluid Dynam. SPRINGER 1987

MÉTODO VOLUMENES FINITOS  
Patankar, Numerical heat transfer and Fluid flow Hemisphere Publ. Corp.

### ② EVOLUCIÓN TEMPORAL (Problema de disparo) $t_n = t_0 + n\Delta t$

$u^{n+1} = f(u^n, u^{n-1}, \dots)$  → MÉTODO EXPLÍCITO

$u^{n+1} = f(u^{n+1}, u^n, \dots)$  → MÉTODO IMPLÍCITO SUELE REQUERIR ITERACIÓN

### ③ PROBLEMA MATRICIAL. $\bar{A}\bar{u} = \bar{b}$

EJEMPLOS...  $\bar{B}\bar{u} + \bar{u}\bar{A} = \bar{b}$

GENERAL:  
R. Peyret. Handbook of Computational Fluid Mech. Academic Press (2000)

Peyret: spectral Methods with Applic... SPRINGER (2002)

# EL MÉTODO DE LOS RESIDUOS PONDERADOS

## METHOD OF WEIGHTED RESIDUALS (MWR)

- Sea  $u(x,t)$  tal que  $x \in \Omega + \delta\Omega$ 
  - $\partial_t u = Lu$ , en  $\Omega$   $L = \text{operador lineal}$  (ejemplo,  $L = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2$ )
  - $Bu = 0$ , en  $\delta\Omega$  (BOUNDARY CONDITIONS)
  - $B = \text{operador lineal}$

- Sea  $\{\phi_i\}$   $i = \{1, \dots, \infty\}$ 
  - UNA BASE DE FUNCIONES CON NORMA  $\langle \phi | \psi \rangle$
  - "BASIS FUNCTIONS"
  - "TRIAL FUNCTIONS"
- $u = \sum_{i=1}^{\infty} a_i(t) \phi_i(x)$
- $u^N = \sum_{i=1}^N a_i(t) \phi_i(x)$
- $u^N \approx u$  (truncatura)

$$R(x) \equiv \partial_t u - Lu$$

### RESIDUO

CONVERGENCIA DÉBIL:

$$\int_{\Omega} R(x) w_j(x) dx = 0 \quad \forall j \in \{1, \dots, M\}$$

WEIGHTING FUNCTIONS  
TEST FUNCTIONS

$\rightarrow \{w_j\}$

$$\sum_{i=1}^N \frac{da_i}{dt} \langle w_j | \phi_i \rangle - a_i \langle w_j | L \phi_i \rangle = 0 \quad \forall j \in [1, M]$$

$$\langle w_j | \phi_i \rangle \equiv \int_{\Omega} w_j(x) \phi_i(x) dx$$

(Producto escalar funciones espacio)

MATRICIALMENTE  $\bar{A} \frac{d\bar{a}}{dt} = \bar{B} \bar{a}$

$$A_{ij} = \langle w_j | \phi_i \rangle ; B_{ij} = \langle w_j | L \phi_i \rangle$$

II.

A, B Cuadradas  $n \times n = M$

M

# Métodos residuos ponderados. cont.

## • MÉTODO DE GALERKIN

1. Las funciones base satisfacen las condiciones de contorno

2. Las funciones PESO son las mismas que las funciones BASE

$$w_j = \phi_j \quad \forall j = \{1, \dots, N\}$$

3. BASE ORTOGONAL  $\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$

$$B \phi_i = 0 \quad \forall i \Rightarrow B u^N = \sum_{i=1}^N a_i B \phi_i = 0 \quad \checkmark$$

$$\sum_{i=1}^N \frac{da_i}{dt} \langle \phi_j | \phi_i \rangle - a_i \langle \phi_j | L \phi_i \rangle$$

$$c_i \frac{da_i}{dt} - \sum_{i=1}^N a_i \underbrace{\langle \phi_j | L \phi_i \rangle}_{\text{MATRIZ } N \times N} = 0 \quad j = 1, \dots, N$$

EJEMPLO: Problema periódico; BASE TRIGONOMÉTRICA  
→ DESCOMPOSICIÓN FOURIER.

$$\phi_i = \{ \sin(k_i x), \cos(k_i x) \}$$

## • Método TAU

1. Las funciones base NO SATISFACEN las cond. contorno

SUPONGAMOS QUE EXISTEN NBC COND. CONTORNO

2. EL n° de FUNCIONES PESO ES  $N - NBC$   
 $\{w_j\}$   $M = N - NBC$

$$B \phi_i \neq 0 \quad k = \{1, \dots, NBC\}$$

USAMOS  $u^N = \sum_{i=1}^N a_i \phi_i$

$$\sum_{i=1}^N \frac{da_i}{dt} \langle w_j | \phi_i \rangle - a_i \langle w_j | L \phi_i \rangle = 0, \quad \forall j \in [1, N - NBC]$$

$$\sum_{i=1}^N a_i B_k \phi_i = 0 \quad \forall k \in [1, \dots, NBC]$$

TOTAL  $\begin{pmatrix} \uparrow M \\ \text{---} \\ \uparrow NBC \end{pmatrix}_{N \times N}$

12.

# RESIDUOS PONDERADOS : Familia de métodos -

## FUNCIONES BASE

**POLINOMIOS CHEBYSHEV**  
 $T_k(x) = \cos[k \arccos(x)]$   
 $x \in [-1, 1]$   $k=0, 1, 2, \dots$

## FUNCIONES PESO

$$\frac{T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}}$$

## CONDICIÓN DE ORTOGONALIDAD

$$\int_{-1}^1 \frac{T_k(x) T_l(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = c_k \frac{\pi}{2} \delta_{kl}$$

$c_k = 2 \quad k=0$   
 $c_k = 1 \quad k>0$

## NOMBRE ALGORITMO

TAU-CHEBYSHEV

$\delta(x-x_j)$  (Delta Dirac)

$$x_j = \cos \frac{\pi j}{N}$$

PUNTOS DE COLOCACIÓN (CUADRATURA)

$$\sum_{i=1}^N \frac{T_k(x_i) T_l(x_i)}{\sqrt{1-x_i^2}} = c_k \delta_{kl}$$

COLOCACIÓN-CHEBYSHEV

**FUNCIONES TRIGONOMETRICAS**  
 $e^{inx/L 2\pi}$

$$x \in [-L, L] \quad k_n = \frac{2\pi n}{L}$$

$$e^{imx/L 2\pi}$$

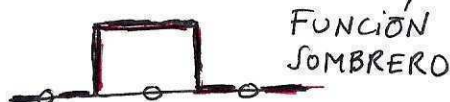
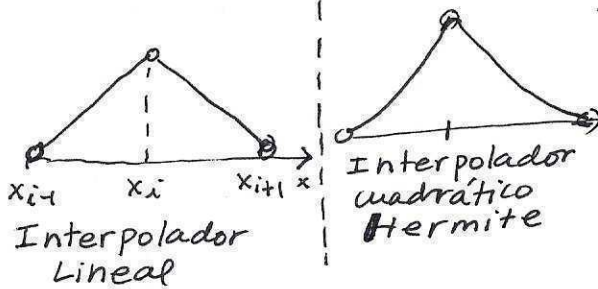
$\delta(x-x_j)$   $x_j = Lj/N$   
 COLOCACIÓN

$$\int_{-L}^L e^{ik_n x} e^{ik_m x} dx = \delta_{km}$$

GALERKIN-FOURIER

$$\sum_{i,j} e^{ik_n x_i} e^{ik_m x_j} = \delta_{km}$$

COLOCACIÓN-FOURIER



$\delta(x-x_i)$   
 COLOCACIÓN

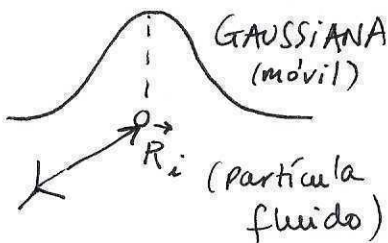
( $x_i$  : PUNTOS CUADRATURA DEL INTERPOLADOR)

NO EXISTE

VOLUMENES FINITOS

NO EXISTE

ELEMENTOS FINITOS



GAUSSIANA

→ Smooth PARTICLE HYDRODYNAMICS  
 (FORMULACIÓN LAGRANGIANA)

TESELACIÓN VORONOI

→ Voronoi hydrodynamics  
 (Pep Español et al.)

S. V. Patankar,

Numerical heat transfer and

fluid flow, HEMISPHERE PUBLISHING CO. (MCGRAW-HILL),

## MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS

• Ecuación tipo  $\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla(\rho u \phi) = \nabla \cdot [\Gamma \nabla \phi] + S$

$\Gamma$ : coef. transporte, engeneral  $\Gamma = \Gamma(x)$

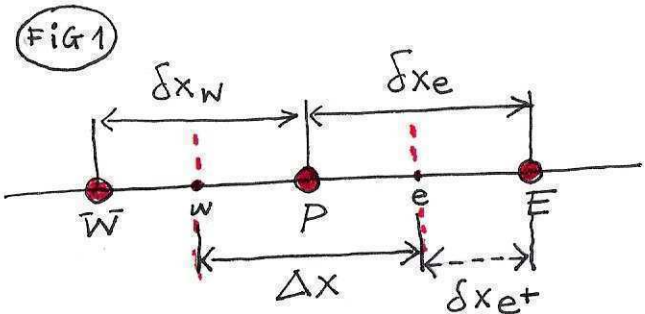
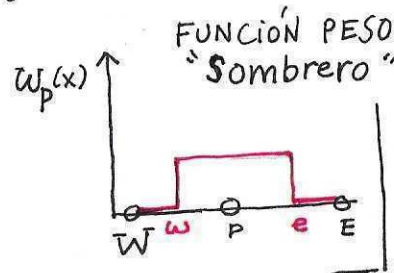
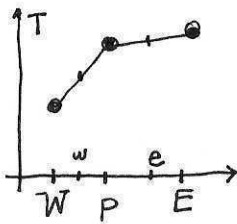
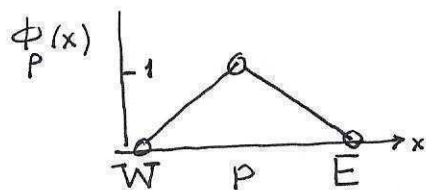
$S$ : término Fuente (SOURCE)

• EJEMPLO: ECUACIÓN DE CALOR ESTACIONARIA

$$\frac{d}{dx} \left[ \kappa \frac{dT}{dx} \right] + S = 0$$

Basis functions  
piecewise linear  
interpolator

$$T(x) = \sum_{i=1}^N T_i \phi_i(x)$$



$$0 = \int_{\Omega} R(x) w_P(x) dx = \int_w^e \left[ \frac{d}{dx} \left[ \kappa \frac{dT}{dx} \right] + S \right] dx$$

$$\left( \kappa \frac{dT}{dx} \right)_e - \left( \kappa \frac{dT}{dx} \right)_w + \int_w^e S dx = 0$$

$$\frac{k_e(T_E - T_P)}{\delta x_e} - \frac{k_w(T_P - T_W)}{\delta x_w} + \bar{S} = 0$$

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b$$

Engeneral:

$$a_P T_P = \sum_{I \text{ CELDAS VECINAS}} a_I T_I + b$$

LINEARIZACIÓN

• TERMINO FUENTE  $\bar{S} = S_c + \rho_P T_P$   
 $S = S(T)$

$$a_E = \frac{k_e}{\delta x_e}$$

$$a_W = \frac{k_w}{\delta x_w}$$

$$a_P = a_E + a_W - \rho_P \Delta X$$

$$b = S_c \Delta X$$

$$k_e = \left( \frac{1 - f_e}{k_P} + \frac{f_e}{k_E} \right)^{-1}, f_e = \frac{\delta x_{e^+}}{\delta x_e}$$

(FIG. 1)

$$k_e^{-1} = \frac{1}{2} (k_P^{-1} + k_E^{-1}) \text{ (MALLA REGULAR)}$$

## VOLUMENES FINITOS; REGLAS COMUNES APLICABLES A OTROS ALGORITMOS

CUATRO REGLAS BÁSICAS SOBRE COEFICIENTES  $a_p T_p = \sum_{n, \text{neighbour cells}} a_n T_n + b$

① CONSISTENCIA DEL FLUJO A TRAVÉS DE CELDAS ADYACENTES

② COEFICIENTES POSITIVOS:  $a_p > 0$ ;  $a_n > 0 \forall n$

Evita soluciones no-físicas, por ejemplo  $T_n \downarrow$  IMPLICA  $T_p \uparrow$

③ Linearización del término fuente:  $S = S(T)$ ;  $\bar{S} = S_c - \mathcal{J}_p T_p$

Recordad que  $a_p = a_E + a_W - \mathcal{J}_p \Delta x$

garantizar ③  $\rightarrow \mathcal{J}_p < 0$  Evita inestabilidad numérica

④ En ausencia de término fuente, si  $L(T) = L(T+c) \Rightarrow$

$$a_p = \sum_n a_n$$

# EVOLUCIÓN TEMPORAL.

EJEMPLO: ECUACIÓN DE CALOR NO-ESTACIONARIA.

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right)$$

$\rho c$  = CAPACIDAD CALORÍFICA

$$\rho c \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right)$$

$$\rho c \Delta x (T_P^1 - T_P^0) = \int_t^{t+\Delta t} \left[ \frac{k_e (T_E - T_P)}{\delta x_e} - \frac{k_w (T_P - T_W)}{\delta x_w} \right] dt$$

Para la integral temporal necesitamos asumir una relación de  $T_P(t)$ ,  $T_E(t)$  y  $T_W(t)$ .

usamos  $\int_t^{t+\Delta t} T_P dt = [f T_P^1 + (1-f) T_P^0] \Delta t$ ,  $f \in [0, 1]$

Se obtiene:

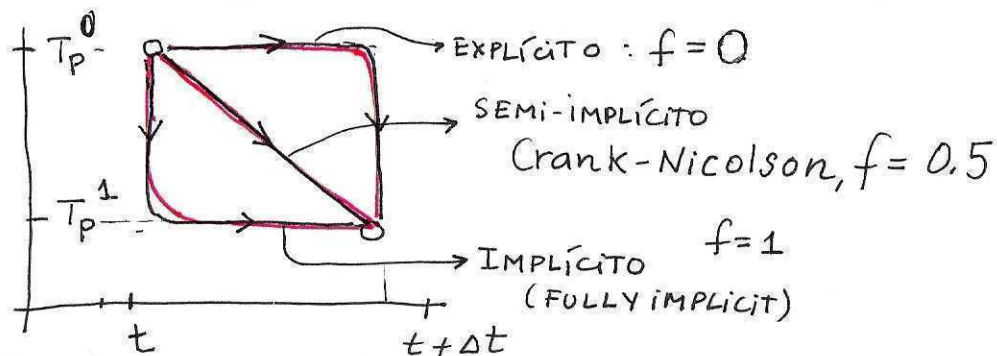
$$a_P T_P^1 = a_E [f T_E^1 + (1-f) T_E^0] + a_W [f T_W^1 + (1-f) T_W^0] + [a_P^0 - (1-f)a_E - (1-f)a_W] T_P^0$$

$$a_E = k_e / \delta x_e$$

$$a_W = k_w / \delta x_w$$

$$a_P = f a_E + f a_W + a_P^0$$

$$a_P^0 = \frac{\rho c \Delta x}{\Delta t}$$



# ESTABILIDAD NUMÉRICA : CONDICIÓN DE COURANT

MÉTODO EXPLÍCITO:  $f=0$ :  $a_p T_p^1 = a_e T_e^0 + a_w T_w^0 + [a_p^0 - a_e - a_w] T_p^0$

**PUEDE SER NEGATIVO!**  
 VIOLA LA REGLA (2)

- Para  $K=cte$  y malla regular,  $\Delta x = \delta x_e = \delta x_w$ ,  
 debe ocurrir que

CONDICIÓN DE ESTABILIDAD NUMÉRICA  $\Delta t < \frac{\rho c (\Delta x)^2}{2K} = \frac{\Delta x^2}{2K_d}$   $K_d = \frac{K}{\rho c} = \text{difusividad térmica } [l^2/t]$

↳ EN GENERAL:  $U_{MAX} < \frac{\Delta x}{\Delta t}$  ;

$U_{MAX}$  = máxima velocidad del fluido (velocidad de transporte)

• DIFUSIÓN MOMENTO:  $U_{MAX} = \frac{U}{\Delta x}$  ;

• CONVECCIÓN:  $U_{MAX} = U_0$

• SONIDO:  $U_{MAX} = C_{SOUND}$ , etc.

DIFUSIÓN TÉRMICA:  $U_{MAX} = \frac{K_d}{\Delta x}$

$C \equiv \frac{U_{MAX} \Delta t}{\Delta x} < 1$  NÚMERO DE COURANT  
 COURANT CONDITION

MÉTODO CRANK-NICOLSON

$f = 0.5$

NÚMERICAMENTE INESTABLE PARA  $\Delta t > \frac{\Delta x^2}{K_d}$

MÉTODO IMPLÍCITO:  $a_p T_p^1 = a_e T_e^1 + a_w T_w^1 + a_p^0 T_p^0$

$f = 1$

Requiere métodos iterativos para ser resuelta

• NUMÉRICAMENTE ESTABLE PARA TODO  $\Delta t$  !!

• Para  $\Delta t$  pequeños es menos exacto que Crank-Nicolson



# HIDRODINÁMICA FLUCTUANTE

## - MÉTODOS NUMÉRICOS DE RESOLUCIÓN -

- USANDO Lattice Boltzmann :
  - T. Ladd, Phys. Rev. Lett. 70, 1339 (1993)
  - Adhikari et al. Eur. Phys. Lett. 71, 473 (2005)
- USANDO VOLUMENES FINITOS :
  - Bell et al. Phys. Rev. E, 76; 016708 (2007)
  - De Fabritiis et al. Phys. Rev. E, 75, 026307 (2007)
  - Formulación Lagrangiana celdas de Voronoi → Español y Serrano, Phys. Rev. E. 64, 046115 (2001)
  - Condiciones contorno ABIERTAS para SONIDO → Delgado-Buscailioni y Dejoan, Phys. Rev. E, 78, 046708 (2008)

# HIDRODINÁMICA FLUCTUANTE

- Objetivo: En escalas sub-micra las fluctuaciones debidas al efecto integrado de colisiones entre partículas son significativas. → "RUIDO TÉRMICO"
- LA HIDRODINÁMICA propaga el "RUIDO TÉRMICO" en forma de sonido, cizalla y calor, ...

## FORMULACIÓN DE LANDAU-LIFSHITZ (Landau-Lifshitz "Fluid Mechanics", Springer)

### LA MASA

#### NOTA:

UNA COLISIÓN ENTRE PARTÍCULAS INTERCAMBIA - momento y energía

- PERO NO MASA •



NO HAY FLUJO ALEATORIO DE MASA

LAS FLUCTUACIONES DE MASA SON DEBIDAS A LA CORRIENTE FLUCTUANTE.

- FLUCTUACIONES DE FLUJO de MOMENTO y ENERGÍA DEBIDO A COLISIONES.
  - ⇒ Introducir terminos fuente Aleatorios en las eq. momento y energía.
- Hipótesis Markoviana: Las fluctuaciones del tensor de esfuerzos y flujo de calor no tienen memoria espacial ni temporal
  - Validéz en fluidos simples: (líquidos) hasta distancias  $O(nm)$  y tiempos  $O(ps)$  !!

B<sub>1</sub>

# HIDRODINÁMICA FLUCTUANTE : ECUACIONES

$$\frac{\text{MASA}}{\text{VOLUMEN}} \rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \vec{u})$$

$$\frac{\text{MOMENTO}}{\text{VOLUMEN}} \rightarrow \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[ \rho \vec{u} \vec{u} + \mathbf{P} + \tilde{\mathbf{P}} \right]$$

$$\frac{\text{ENERGÍA}}{\text{VOLUMEN}} \rightarrow \frac{\partial \rho e}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[ \rho e \vec{u} + \mathbf{P} \cdot \vec{u} + \kappa \nabla T + \tilde{\mathbf{Q}} \right]$$

$\downarrow$   
 CONDUCTIVIDAD  
 TÉRMICA

tensor de presiones :

$$\mathbf{P} = p \mathbb{1} + \bar{\bar{\tau}}$$

$$\bar{\bar{\tau}} = \eta (\nabla u + \nabla u^T) - \left( \frac{2}{3} \eta + \zeta \right) \nabla \cdot u$$

tensor de esfuerzos

$\eta$  viscosidad dinámica  
 CIZALLA  
 ( $\zeta$  de BULK)

Tensor  
 PRESIÓN  
 FLUCTUANTE

$$\langle \tilde{P}_{ij}(\vec{r}, t) \tilde{P}_{kl}(\vec{r}', t') \rangle = 2 k_B T \eta \left[ \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right] \times \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t')$$

FLUJO

CALOR  
 FLUCTUANTE

$$\langle \tilde{Q}_i(\vec{r}, t) \tilde{Q}_j(\vec{r}', t') \rangle = 2 k_B T^2 \kappa \delta_{ij} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t')$$

Además

$$\langle \tilde{P}(\vec{r}, t) \rangle = 0 \quad \langle \tilde{P}_{ij}(\vec{r}, t) \tilde{Q}_k(\vec{r}, t) \rangle = 0$$

$$\langle \tilde{Q}(\vec{r}, t) \rangle = 0$$

# HIDRODINÁMICA FLUCTUANTE: MÉTODO VOLÚMENES FINITOS

(Phys. Rev. E, 75, 026307)

- CONSERVACIÓN

$$\partial_t \phi = -\nabla \cdot \vec{J} \quad \phi = \text{densidad} \begin{cases} \text{masa} \\ \text{momento} \\ \text{energía} \end{cases}$$

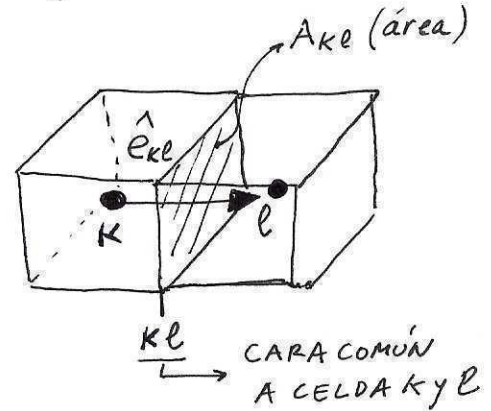
- INTEGRACIÓN EN CADA ELEMENTO DE VOLUMEN

$$\frac{d}{dt} \int_{V_K} \phi d^3r = - \oint_{S_K} \vec{J} \cdot \hat{n} ds \quad ; \quad U_K \equiv \int_{V_K} \phi d^3r \rightarrow \begin{cases} \text{MASA} \\ \text{MOMENTO} \\ \text{ENERGÍA} \end{cases}$$

- INTEGRACIÓN

- MÉTDO EXPLÍCITO (EULER)

$$\frac{dU_K}{dt} = - \sum_{l, \text{celdas vecinas}} \vec{J}_{Kl} \cdot \hat{e}_{Kl} A_{Kl}$$

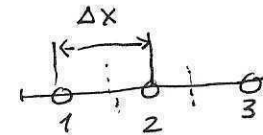


$$U_K^1 = U_K^0 + \left( \frac{dU_K}{dt} \right)^0 \Delta t$$

- GRADIENTES ESPACIALES

- DIFERENCIAS CENTRALES 2º ORDEN:

$$\frac{\partial \phi_2}{\partial x} = \frac{\phi_3 - \phi_1}{2\Delta x}$$



(MALLADO REGULAR)

- INTERPOLACIÓN EN LAS CARAS (Piece wise linear)

$$\phi_{kl} = \frac{1}{2} (\phi_k + \phi_l)$$

NOTA: LA CORRIENTE DE MASA SE INTERPOLA  $(\rho \vec{u})_{kl} = \rho_{kl} \vec{u}_{kl}$

# HIDRODINÁMICA FLUCTUANTE = ECUACIONES DISCRETIZADAS PARA LOS INCREMENTOS DE MASA Y MOMENTO.

MASA: 
$$dM_k^t = \sum_l (\rho \vec{u})_{kl} \cdot \hat{e}_{kl} A_{kl} dt$$

MOMENTO: 
$$d\vec{I}_k^t = \sum_l \left( \vec{u}_{kl} \otimes (\rho \vec{u})_{kl} + \overset{=}{\vec{I}}_{kl} \right) \cdot \hat{e}_{kl} A_{kl} dt + \underbrace{d\vec{I}_k^t}_{\text{Contribución del ruido}}$$

$\vec{I}_{kl} = \vec{p}_{kl} + \vec{z}_{kl}$

PRESIÓN:  $p_{kl} = p_k(p_{kl}) \rightarrow$  ECUACIÓN DE ESTADO

TENSOR ESFUERZOS: 
$$\zeta_{kl}^{\alpha\beta} = \frac{\eta_k}{V_k} \sum_l \frac{A_{kl}}{2} \left[ e_{kl}^\alpha \cdot u_l^\beta + e_{kl}^\beta \cdot u_l^\alpha \right] - \frac{\delta^{\alpha\beta}}{3} A_{kl} e_{kl}^\sigma u_l^\sigma + \delta^{\alpha\beta} \frac{\zeta_k}{V_k} \sum_l \frac{A_{kl}}{2} e_{kl}^\sigma v_l^\sigma$$

## MOMENTO FLUCTUANTE

$$d\vec{I}_k^t = \sum_l \frac{A_{kl}}{2} \sqrt{4k_B T \frac{\eta_l}{V_l}} dW \cdot \hat{e}_{kl} + \sum_l \frac{A_{kl}}{2} \sqrt{6k_B T \frac{\zeta_l}{V_l} \frac{\text{tr}[dW]}{3}} \hat{e}_{kl}$$

## MATRIZ DE INCREMENTOS

### DE WIENER PARACADA CELDA K

$dW_k$ : MATRIZ 3x3 DE RUIDO, CON:  $\langle dW_k^{\alpha\beta} dW_l^{\gamma\delta} \rangle = \delta_{kl} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} dt$

PARTE SIMÉTRICA SIN TRAZA: 
$$d\bar{W}_k^S = \frac{dW_k + dW_k^T}{2} - \frac{1}{3} \text{tr} dW_k \mathbb{1}$$

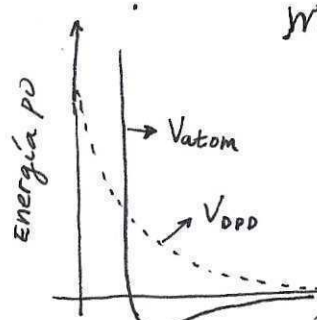
# DINÁMICA DE PARTÍCULAS DISIPATIVAS

## DDP

(Hoogerburgge y koelman, 1992)

(P. Español, P. Warren, 1995)

$$m \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = F_{ij}^C(r_{ij}) \hat{r}_{ij} - \tilde{\gamma}_{ij}(r_{ij}) (\vec{v}_{ij} \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} + IR_{ij}(r_{ij}) \xi_{ij} \hat{r}_{ij}$$

Energía pD 

**FUERZA CONSERVATIVA:**  
 $F^C(r) = -\frac{dV(r)}{dr}$

**FUERZA DISIPATIVA,  $F_i^D$**   
 $\tilde{\gamma}_{ij}(r) = \gamma_{ij} \omega_D(r)$   
 $\gamma_{ij}$  = coeficiente fricción

**RUIDO:  $F_i^R$**   
 $IR(r_{ij}) = \sigma \omega_R(r)$  INTENSIDAD RUIDO  
 $\xi_{ij}$  = RUIDO GAUSSIANO  
 $\langle \xi_{ij} \rangle = 0$   
 $\langle \xi_{ij}(t) \xi_{kl}(0) \rangle = \delta_{ik} \delta_{jl} \delta t$   
 Varianza unidad

**POTENCIAL "SUAVE"** →  $V(r) = \text{potencial efectivo}$

BALANCE FLUCTUACIÓN DISIPACIÓN  
 DISTRIBUCIÓN CANÓNICA a Temperatura T

$2KT \tilde{\gamma}(r) = IR^2(r)$   
 (obten...  $2KT\gamma = \sigma^2$ )

Integración:

$$d\vec{r}_i = \vec{v}_i dt$$

$$d\vec{v}_i = \frac{1}{m} \left[ F_i^C dt + F_i^D dt + F_i^R \sqrt{dt} \right]$$

# DIRECT SIMULATION MONTE CARLO (DSMC)

Reviews más recientes

Alejandro Garcia  
Francis. J Alexander

Computer Simulations,  
Vol. 11, n°6, 588 (1997)

Bird (1960);

G.A. Bird, Molecular Gas Dynamics  
Clarendon, Oxford, 1976

G.A. Bird Molecular Gas Dynamics and Direct  
Simulation of Gas Flows  
Clarendon, Oxford, 1994

Objetivo: · Simulación de gases a densidades bajas (enrarecidos).  
· Flujos con alto número de Knudsen  $[kn = \lambda/L]$

$\lambda$ : recorrido libre medio

$L$ : tamaño del sistema

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi \sigma^2 n}$$

$\sigma$ : diámetro molec.

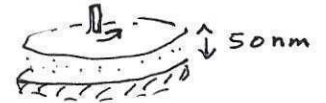
$n$ : densidad molec.

La hipótesis del continuo deja de ser válida para  $kn > 0.1$

Ejemplos → Aire a presión atmosférica y Temp. ambiente  $\lambda \approx 50 \text{ nm}$

→ Aire en las capas altas de la atmósfera  $\lambda \approx 120 \text{ km}!$

→ Aire entre la cabeza y el soporte del disco duro



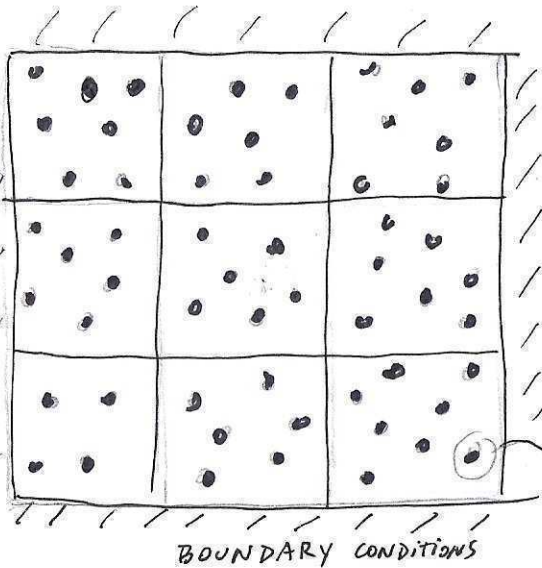
$$L \approx 50 \text{ nm}$$

$$\lambda \approx 50 \text{ nm}$$

$$\Rightarrow kn \approx 1 !$$

# DIRECT SIMULATION MONTE CARLO

## (DSMC)



- Divide el espacio en  $M$  celdas "de colisión"
- Cada celda tiene  $N_c$  partículas, en la práctica  $\langle N_c \rangle > 20$
- Teoría cinética: - probabilidad de colisión de dos moléculas

$$P_{\text{coll}}(i, j) = \frac{|\vec{v}_i - \vec{v}_j|}{\sum_{m=1}^{N_c} \sum_{n=1}^{N_c-1} |\vec{v}_m - \vec{v}_n|}$$

- tasa de colisión en una celda

$$\frac{N_{\text{col}}}{\Delta t} = \frac{N_c^2 \pi \sigma^2 N_e \langle v_r \rangle}{2 V_c}$$

Variables del algoritmo DSMC:

→  $r_i$  posiciones

→  $v_i$  velocidades

DSMC resuelve la Eq. de Boltzmann usando una muestra aleatoria representativa, extraída de la correcta (Maxwell) distribución de velocidades.

- Número colisiones en una celda, tras  $\Delta t$

$$N_{\text{col}} \approx N_c \left( \frac{\langle v_r \rangle \Delta t}{\lambda} \right)$$

$\langle v_r \rangle$  velocidad relativa media

$$\left( \lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi \sigma^2 n} \right) \begin{array}{l} \text{Recorrido} \\ \text{libre} \\ \text{medio} \end{array}$$



# Direct Simulation Monte Carlo DSMC

## Algoritmo

LOOP PARA CADA CELDA

- ① Elige un par de moléculas  $i, j$  dentro de la celda.
- ② El par colisiona si 
$$\frac{|v_i - v_j|}{v_{r,max}} > r$$
  $r \in [0, 1]$  distribuido uniform. (número aleatorio)  
 $v_{r,max}$  es máxima velocidad relativa en la celda
- ③ Si hay colisión  $\Rightarrow$  ASIGNAR VELOCIDADES POST-COLISIÓN, ir a ①  
Si No hay colisión, ir a ①
- ④ Si el número de colisiones es igual a  $\underline{N_{col}} \approx N_c \left( \frac{\langle v_r \rangle \Delta t}{\lambda} \right) \Rightarrow$  SALIR  
ir a la siguiente celda.

### NOTA:

$v_{r,max}$  es un parámetro libre:  
Si  $v_{r,max}$  es muy alto  $\Rightarrow$  Baja eficacia  
Si  $v_{r,max}$  es muy bajo  $\Rightarrow$  El método es inexacto.

Eficiencia

Nota: Para no evaluar  $\langle v_r \rangle$  es más eficiente hacer un bucle sobre  $N_{cand}$  candidatos a colisión

$$\frac{N_{col}}{N_{cand}} = \frac{\langle v_r \rangle}{v_{r,max}}, \text{ siendo}$$

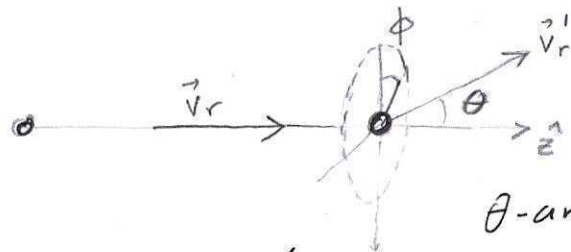
$$N_{cand} = N_c (v_{r,max} \Delta t / \lambda) \text{ (fijo)}$$

# Direct Simulation Monte Carlo (DSMC).

## -Velocidades post-colisión

- conservación de momento :  $\vec{V}_{cm} = \frac{1}{2} (\vec{v}_i + \vec{v}_j) = \frac{1}{2} (\vec{v}_i' + \vec{v}_j') = \vec{v}_{cm}'$
- conservación de energía (cinética) :  $v_r = |\vec{v}_i - \vec{v}_j| = |\vec{v}_i' - \vec{v}_j'| = v_r'$
- Distribución de ángulos de colisión :  $\vec{v}_r' = v_r \left[ \sin \theta \cos \phi \hat{n} + \sin \theta \sin \phi \hat{y} + \cos \theta \hat{z} \right]$

Modelo esferas duras



Azimuth

$\phi \in [0, 2\pi]$  uniform. distribuido

$$\phi = 2\pi r \quad r \in [0, 1] \text{ unit.}$$

$\theta$ -angle :  $P(\theta) d\theta = \frac{1}{2} \sin \theta d\theta$

usando  $q \equiv \cos \theta$  ;  $P(q) dq = \frac{1}{2} dq$

$q \in [-1, 1]$  unit. distribuido

$$q = 2r - 1 ; \quad \cos \theta = q ; \quad \sin \theta = \sqrt{1 - q^2}$$

• ASIGNACIÓN DE VELOCID. POST. COLISIÓN

$$\vec{v}_i' = \vec{v}_{cm}' + \frac{1}{2} \vec{v}_r'$$

$$\vec{v}_j' = \vec{v}_{cm}' - \frac{1}{2} \vec{v}_r'$$

# Direct Simulation Monte Carlo, DSMC

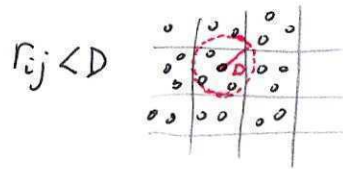
## Versiones "mejoradas"

**DSMC-Isotrópico** : Conservación de momento angular

I-DSMC

(Phys. Rev. Lett. 101, 075902 (2008))

\* Seleccionar parejas de colisión dentro de una esfera de diámetro  $D$ , incluso si las moléculas pertenecen a celdas distintas.



(eficiencia empeora un factor 2-3)

**Stochastic Hard-Sphere Dynamics**

**SHSD for non-ideal gases**

\* Seleccionar parejas de moléculas solamente si ambas se están acercando

Es decir si, 
$$V_n \equiv -\vec{v}_{ij} \cdot \hat{r}_{ij} > 0$$

A. Donev et al, PRL, 101, 075902 (2008)

Tasa de Probabilidad colisión:

$$P(v) \propto V_n \Theta(V_n)$$
  
↳ Heaviside function

### • PROPIEDADES

$\chi$  : parámetro de tasa de colisión ( $\propto 1/v_{r,max}$ )

para  $\chi \rightarrow \infty$  SHSD = MD esferas duras

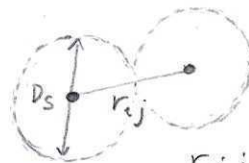
$\chi$  finito SHSD = partículas con núcleo suave (lineal)

\* La colisión se resuelve como esferas duras elásticas colisionando a distancia (diámetro efectivo)

$$D_s = r_{ij}$$

### • presión

$$P(p) = p_T + a p^2$$



$r_{ij} < D \Rightarrow$  intento de colisión con probabilidad

### • consistencia en fluctuaciones de densidad!

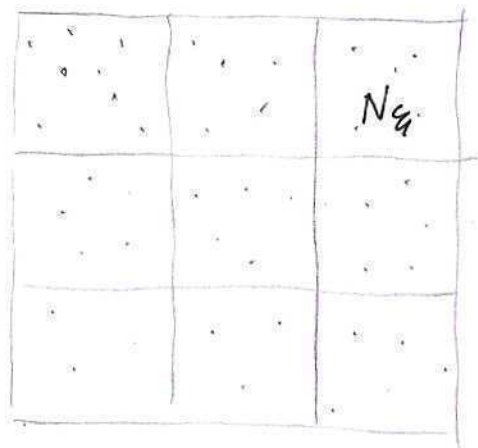
# MULTIPARTICLE COLLISION DYNAMICS (MPC)

también conocido como STOCHASTIC ROTATION DYNAMICS (SRD)

... y popularmente como "El método de Malevanets y Kapral"

Biblio: Malevanets & Kapral

Excelente Review: kapral; Advances in Chemical Physics, Vol. 140, 89 (2008)



- Partículas de gas ideal: Posiciones  $\vec{r}_i$ , velocidades  $\vec{v}_i$
- División del espacio en  $M$  celdas "de colisión":  $\xi = \{1, \dots, M\}$

x Advección

$$\vec{r}_i^* = \vec{r}_i + \vec{v}_i \tau$$

$\tau$  = "tiempo" entre colisiones

x Colisión

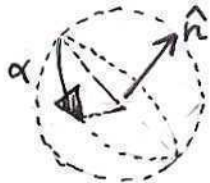
$$\vec{v}_i^* = \vec{V}_{\xi} + \tilde{\Omega}_{\xi} (\vec{v}_i - \vec{V}_{\xi})$$

$$\vec{V}_{\xi} = \frac{1}{N_{\xi}} \sum_{i=1}^{N_{\xi}} \vec{v}_i, \text{ velocidad del c.m. en la celda } \xi$$

$$\tilde{\Omega}_{\xi}$$

: OPERADOR DE ROTACIÓN ALEATORIA:

- Alrededor de un vector  $\hat{n}$  aleatorio (colocado UNIFORMEMENTE sobre la superficie de una esfera)



- Un ángulo  $\tilde{\alpha} \in [-\alpha, \alpha]$  en torno a  $\hat{n}$ .

# MULTIPARTICLE collision dynamics (MPC)

## - PROPIEDADES -

x Conservación de masa : Es obvia pues las partículas no abandonan las celdas tras la colisión; únicamente, tras la advección.  
 en la celda  $\xi$

x Conservación de momento :  
 en la celda  $\xi$

$$\sum_{i=1}^{N_\xi} m v_i^* = \sum_{i=1}^{N_\xi} m \left( \vec{V}_\xi + \tilde{\Omega}_\xi (\vec{v}_i - \vec{V}_\xi) \right) = \sum_{i=1}^{N_\xi} m v_i$$

pues  $\tilde{\Omega}_\xi$  es el mismo para todas las partículas de una celda y sólo afecta a la velocidad relativa respecto al centro de masas ( $\vec{v}_i - \vec{V}_\xi$ )

x Conservación de energía (cinética) : x

$$\sum_{i=1}^{N_\xi} m |v_i^*|^2 = \sum_{i=1}^{N_\xi} \frac{m}{2} \left| \vec{V}_\xi + \tilde{\Omega}_\xi (\vec{v}_i - \vec{V}_\xi) \right|^2 = \sum_{i=1}^{N_\xi} m |v_i|^2$$

Pues la rotación  $\tilde{\Omega}_\xi$  preserva intacto el módulo de la velocidad relativa con respecto al C.M.

x Conservación del volumen del espacio de fases :

$$dz^N = dr^N dv^N$$

i.e.  $\left[ \tilde{\Omega}_\xi (\vec{v}_i - \vec{V}_\xi) \right]^2 = (\vec{v}_i - \vec{V}_\xi)^2$

↳ Advección :  $dv^N = 0$   
 $dr_{t+z}^N = \left| \frac{\partial r_i(t+z)}{\partial r_j(t)} \right| dr_t^N = dr_t^N \quad \checkmark$

colisión :

$$dz_{t+z}^N = dr^N dv^N = dr^N \sum_i P(\tilde{\Omega} | v^N) = dz_t^N$$

$\omega_{\Omega, v^N}$   
 $\Omega(v) = v^*$

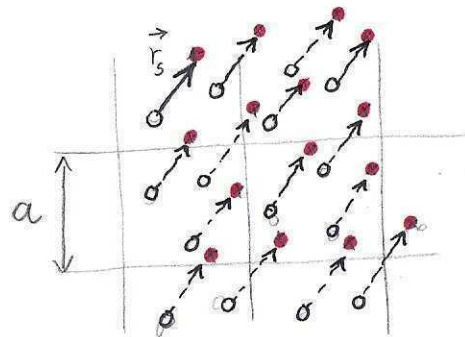
↑  
 independiente de la velocidad

# MULTIPARTICLE COLLISION DYNAMICS (MPC)

## Invarianza Galileana a temperaturas bajas.

GRID-SHIFTING : Phys. Rev. E 63 020201 (2001)

T. Ilhe, D. Kroll



• Tamaño de la celda,  $a$

• Recorrido libre medio,  $\Lambda = \bar{v}\tau = \left(\frac{kT}{m}\right)^{1/2} \tau$

$$\lambda \equiv \frac{\Lambda}{a} \quad \text{dimensionless mean-free path}$$

**PROBLEMA:**

si  $a > \Lambda \Rightarrow$  Las partículas colisionan varias veces en la misma celda antes de abandonarla.

$$\lambda < 1$$

\* Por tanto no se satisface la hipótesis de caos molecular necesaria para el teorema-H (incremento de la Entropía)

\* caos molecular: las partículas no tienen "memoria" de sus colisiones previas

• Este hecho afecta a la viscosidad

$$\langle v_k(t) v_k(0) \rangle \sim e^{-\nu(k) k^2 t}$$

$\nu(k)$  independiente de  $k$ ,

sin embargo esto no se cumple en la formulación original.

**SOLUCIÓN**

① Advección  $r_i^t = r_i^o + v_i \tau$

② DESPLAZAMIENTO ALEATORIO DE LA MALLA:  $-\vec{r}_s$   $|\vec{r}_s| \in \left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right]$

$$\vec{r}_i = \vec{r}_i + \vec{r}_s$$

$$\vec{R}_{i\eta} = \vec{R}_{i\eta} - \vec{r}_s$$

③ Colisión en la malla desplazada,  $\xi_\eta^s$

④ Vuelta a la malla original.

# MULTIPARTICLE COLLISION DYNAMICS

MPC

## PROPIEDADES

- Distribución MICROCANÓNICA

$$P(\mathbf{r}^N, \mathbf{v}^N) = A V^{-N} \delta \left[ \frac{m}{2} \sum |\mathbf{v}_i|^2 - \frac{3kT N}{2} \right] \times \delta \left[ \sum \mathbf{v}_i - \vec{u} \right]$$

límite  $N \rightarrow \infty$

Maxwell-Boltzmann

$$P(\mathbf{r}^N, \mathbf{v}^N) = \frac{N}{V} \exp \left( - \frac{m |\mathbf{v}_i - \vec{u}|^2}{kT} \right)$$

- Teorema-H

- PROPIEDADES de transporte

Nota:

- ⊗ Formas de obtener los coeficientes de transporte

- ⊙ Operadores de Proyección + Green Kubo

Adv. Chem. Phys. 140, 89 (2008)

Phys. Rev. E 68, 036701 (2003)

- ⊙ Expansión Chapman-Enskog

J. Chem. Phys. 110, 8605 (1999)

- ⊙ Teoría cinética

J. Chem. Phys. 109, 6505 (2005)

Relaciones de Green-Kubo

- Coeficiente de difusión:  $D = \frac{k_B T \tau}{2m} \left( \frac{3\tau}{(\gamma-1 + e^{-\tau})(1-\cos\alpha)} - 1 \right)$

$$\gamma = \langle n \rangle a^3$$

número promedio de partículas por celda

- Viscosidad:  $\eta = \eta_{kin} + \eta_{col}$

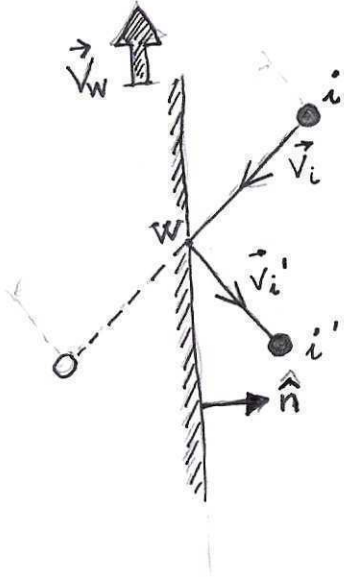
$$\rho = m \langle n \rangle$$

$$\eta_{kin} = \frac{k_B T \tau \rho}{2m} \left[ \frac{5\tau - (\gamma-1 + e^{-\tau})(2-\cos\alpha - \cos 2\alpha)}{(\gamma-1 + e^{-\tau})(2-\cos\alpha - \cos 2\alpha)} \right]$$

$$\eta_{col} = \frac{m}{18a\tau} (\gamma-1 + e^{-\tau})(1 - \cos\alpha)$$

# CONDICIONES DE CONTORNO PARA PARTÍCULAS

- DSMC  
- MPC



1 tiempo de vuelo hasta la pared

$$\Delta t_w = (\vec{r}_w - \vec{r}_i) \cdot \hat{n} / (\vec{v}_i \cdot \hat{n})$$

2 Asignar la velocidad de salida, tras colisión  $\vec{v}_i'$   
(TIPO DE PARED)

3 POSICIÓN TRAS LA COLISIÓN:  $\vec{r}_i' = \vec{r}_w + \vec{v}_i' (\Delta t - \Delta t_w)$

## TIPOS DE PARED

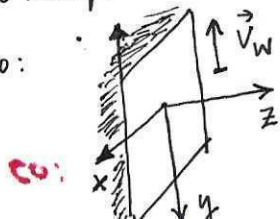
• PARED ESPECULAR

$$\vec{v}_i' = \underbrace{\vec{v}_w}_{\text{veloc. pared}} + \underbrace{(1 - \hat{n}\hat{n}) \cdot \vec{v}_i}_{\text{tangente a la pared}} - \underbrace{(\vec{v}_i \cdot \hat{n}) \hat{n}}_{\text{REFLEXIÓN ESPECULAR}} = \vec{v}_w + \vec{v}_i - 2(v_i \hat{n}) \hat{n}$$

• PARED TÉRMICA:

Las velocidades se extraen de la distribución Maxwell-Boltzmann a temperatura  $T_w$

Ejemplo:



CO:

• Componente normal

$$P_{\perp}(v_{\perp}) = \frac{m}{k_B T_w} v_{\perp} e^{-m v_{\perp}^2 / 2 k_B T_w}$$

• Componente tangencial

$$P_{\parallel}(v_{\parallel}) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_w}} e^{-m v_{\parallel}^2 / 2 k_B T_w}$$

$$v_{ix} = \sqrt{\frac{k_B T_w}{m}} r_G$$

$$v_{iz} = \sqrt{-\frac{2k_B T_w}{m} \ln r}$$

$$v_{iy} = \sqrt{\frac{k_B T_w}{m}} r_G' + v_w$$

$r_G, r_G' \in [-\infty, +\infty]$   
GAUSSIAN  $\langle r_G \rangle = 0$   
 $\langle r_G^2 \rangle =$

$r \in [0, 1]$  UNIFORME



# DINÁMICA MOLECULAR

## Molecular Dynamics (MD)

### Biblio:

- M. P. Allen y D. J. TILDESLEY,  
Computer Simulations of Liquids  
Clarendon Press · OXFORD ·  
(1987)
- Frenkel y Smit; Understanding Molecular Simulations  
Academic Press (2002)
- D. Rapaport, the Art of Molecular Dynamics  
Simulations  
Cambridge University Press (2004)

### Objetivo:

- $i = \{1, \dots, N\}$  átomos, descripción CLÁSICA de su movimiento

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i$$

- Variables fundamentales:  $m_i$  masas  
 $\vec{r}_i$  posiciones  
 $\vec{v}_i$  velocidades

# DINÁMICA MOLECULAR

## PASOS CLAVE EN UNA SIMULACIÓN

① Inicialización de posiciones y velocidades (Equilibrado)

② Integración temporal:

- Algoritmo: reversible en el tiempo
- Conservación del volumen de fases
- Conservación de Energía

→ VELOCITY VERLET

$$a) \quad r^{t+1} = r^t + v^t \delta t + \frac{1}{2} \frac{f^t}{m} \delta t^2$$

b) EVALUAR FUERZAS:

$$f^{t+1} = f^{t+1}(\{r^{t+1}\})$$

$$c) \quad v^{t+1} = v^t + \frac{1}{2m} [f^t + f^{t+1}]$$

GENERALIZACIÓN DEL ALGORITMO VELOCITY VERLET

- Expansión de Trotter del operador de Liouville: Tuckerman et al,

J. Chem. Phys, 97, 1990 (1992)  
(véase libro de Frenkel)

③ Evaluación de FUERZAS

④ Almacenamiento y ANÁLISIS de los resultados  
(MUESTREO)

# Dinámica Molecular

## Fuerzas interatómicas

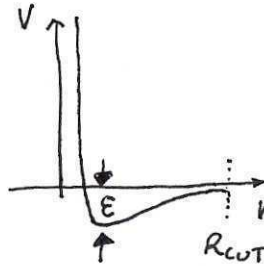
• NON-BONDED INTERACTIONS: Entre átomos NO-LIGADOS

• De corto alcance  $|\vec{r}_{ij}| < R_{CUT}$  ( $R_{CUT} \approx 2.5\sigma$ )

• Van der Waals (Dispersión de London): moléculas apolares  
(Fuerza atractiva)

• Repulsión entre nubes electrónicas

• MODELO: Lennard-JONES  $V(r) = 4\epsilon \left[ \frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma^6}{r^6} \right]$



• De largo alcance

• Fuerza de Coulomb  $V_c(r) = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon r_{ij}}$  Moléculas polares (agua), Cationes, iones.

• BONDED INTERACTIONS: Entre átomos ligados

Entre dos átomos

• Muelles:  $V(r) = \frac{1}{2} k (\vec{r}_{ij} - \vec{r}_0)^2$

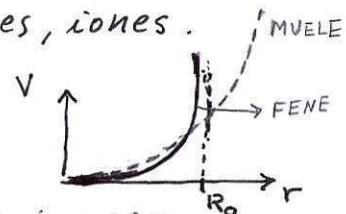
• FENE: Finite extensible non-linear Elastic

$$V(r) = -\frac{1}{2} R_0^2 \left[ 1 - \ln(r/R_0) \right]^2$$

• Fuerzas de LIGADURA

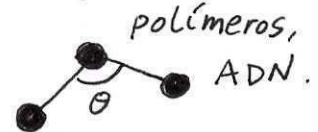


$|\vec{r}_{ij}| = \text{fijo}$  SHAKE (ver libro Frenkel)



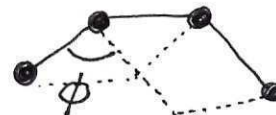
A tres átomos

• Semiflexibilidad  $\rightarrow V(\theta) = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_c)^2$



A cuatro átomos

• Diedros  $\rightarrow$  (moléculas complejas, proteínas..)



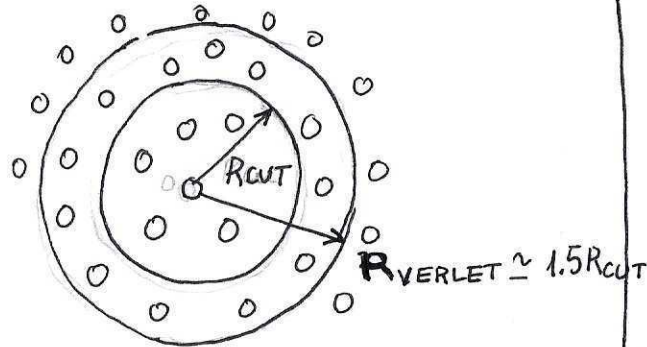
# Dinámica molecular

## Evaluación de fuerzas interatómicas.

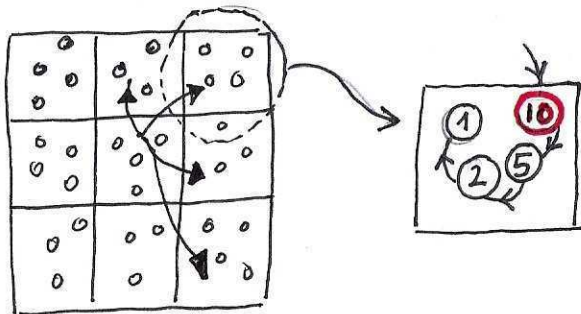
### FUERZAS DE CORTO ALCANCE

- LISTAS DE VECINOS:  $O(N) \log(N)$  operaciones

LISTA DE VERLET  
(Libro de ALLEN...)



CELL INDEX o'  
LINKED LIST (ver libro Allen...)



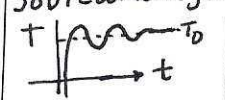
| Head | List |
|------|------|
| 10   | 5    |
|      | 2    |
|      | 1    |

### FUERZAS DE LARGO ALCANCE

- SUMA DE EWALD  
(Libro de Frenkel y Smit)
- PARTICLE MESH EWALD  $O(N \log N)$  [PME]  
J. Chem. Phys. 98, 10089 (1993)
- FAST MULTIPOLE METHOD  
Greengard, The RAPID EVALUATION of  
Potential fields in particle...  
1987 MIT Press, Cambridge MA
- PARTICLE - PARTICLE PARTICLE MESH [P3M]  
J. Chem. Phys. 103, 3014 (1995)
- REACTION FIELD  
Sadus, Molecular Simulation of Fluids: Theory, ...  
ELSEVIER (1999)

( $T_0 = \text{imposed Temp.}$ ) **Dinámica Molecular**  
**Termostatos**

(Translational kinetic temp.)  
$$T = \left\langle \frac{1}{3N} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 \right\rangle$$

| NOMBRE   | ALGORITMO   | Distribución CANÓNICA | TIEMPO RESPUESTA  | APTO PARA <b>HIDRODIN.</b>  | BIBLIOGRAFÍA   |
|--|---|-----------------------|---|---|--|
| <b>Berendsen</b><br>(escalamiento velocidad)         | $v_i' = \left[ 1 + \frac{\Delta t}{\tau_T} \left( \frac{T_0}{T} - 1 \right) \right]^{1/2} v_i$  | NO                    | $\tau_T$  | -NO-  |  |
| <b>Nosé-Hoover</b><br>(extensión del Lagrangiano)    | $\begin{aligned} \ddot{r}_i &= \vec{F}_i / m - S \vec{v}_i \\ \dot{S} &= (T - T_0) / Q \end{aligned}$<br><small><math>i \in \{1, N\}</math></small>                               | SÍ                    | $Q^{1/2} (NKT)^{-1/2}$<br>Sobreamortiguado<br> | -NO-<br>Altera coef. diff.<br>problemas ergodicidad                   | Frenkel & Smit, Understanding... book<br>Mol. Phys. 87, 1117, (1996)                     |
| <b>Andersen</b><br>(probabilístico, tipo Montecarlo) | Cada paso de tiempo $\Delta t$<br>Asigna veloc. Gaussiana a $\Gamma \Delta t$ partículas<br>(El resto continúa con E cte)   | SÍ                    | $\Gamma^{-1}$   | -NO-<br>Altera coef. difusión   | Frenkel & Smit<br>Lowe, EPL, 47, 145 (1999)  |
| <b>Langevin</b><br>(fricción-ruido)                  | $m \ddot{r}_i = F_i - \gamma v_i + \sigma \xi_{RAND}$<br>$\sigma^2 = 2KT_0 \gamma$  | SÍ                    | $\left( \frac{m}{\gamma} \right)$   | "NO"<br>Darcy-type Hydrodinam.  | Phys Rev. E, 68, 046702 (2003)<br>J. Chem. Phys, 114, 2090 (2001)                        |
| <b>LOWE - Andersen</b>                               | Colisión "termalizada" entre $\Gamma \Delta t$ pares. Conserva <u>Localment.</u> el momento.  | SÍ                    | $\Gamma^{-1}$   | -SÍ-<br>Aumenta Viscosidad<br>Aumenta $S_c = \nu/D$<br>SCHMIDT NUMBER | FORMULACIÓN LOWE:<br>Eur. Phys. Lett. 47, 145 (1999)<br>J. Chem. Phys. 125 184902 (2006) |
| <b>DPD</b>   | $m \ddot{r}_i = F_i - \sum_j \gamma_{ij} (r_{ij}) v_{ij}'' + \sigma_{ij} \xi_{RAND}^{ij}$<br>CONSERVA el momento <u>TOTAL</u><br>$\gamma_{ij} = \gamma_{ji}; \xi_{ij} = \xi_{ji}$ | SÍ                    | $(m/\gamma)$  | SÍ-<br>NO AFECTA A LA VISCOSIDAD                                      | Phys. Rev E, 68, 046702 (2003)   |

# Dinámica Molecular fuera de equilibrio

## NON EQUILIBRIUM MOLECULAR DYNAMICS (NEMD)

Objetivos:

- Evaluar coeficientes de transporte: viscosidad, conductividad térmica, etc... usando flujos, o estados fuera de equilibrio
- Estudiar el efecto del flujo en la estructura de sistemas moleculares
  - Shear thinning / shear thickening.

FORMAS DE IMPOSICIÓN DE FLUJO DE CIZALA

- LEE - EDWARDS BOUNDARY CONDITIONS: (véase libro de ALLEN y TILDESLEY) (sistemas periódicos)
- SLLOD DYNAMICS: - Ayra et al. J. Chem. Phys, 113, 2079 (2000)  
- Guoai et al. ... J. Chem. Phys, 122, 094114 (2005) (Operator splitting SLLOD)
- Fuerzas o perturbaciones periódicas: TEORÍA DE RESPUESTA LINEAL - véase libro de Allen y Tildesley

• USANDO PAREDES MÓVILES

- (Problema) • oscilaciones de densidad cerca de la pared
- Velocidad de destitamiento (Neto et al. Rep. Prog. Phys. 68, 2859 (2005))

- SISTEMAS ABIERTOS: CONDICIONES DE FLUJO EXTERNO (Grancanónico) Flekkoy et al. Phys. Rev. E, 72, 026703 (2005)

