

Universidad Autónoma de Puebla
Intituto de Física “Luis Rivera Terrazas”

Hidrodinámica molecular de gases densos de discos rígidos

Tesis presentada por

Alberto Israel Gómez Paredes

para obtener el grado de

**Maestría en Ciencias
(Física)**

Dirigida por

Dr. José Alejandro Rangel Huerta y Dr. José Luis Carrillo Estrada

Puebla, México
noviembre 2017

©2017 - Alberto Israel Gómez Paredes

Derechos Reservados

Agradecimientos

Un agradecimiento al Dr. José Alejandro Rangel Huerta y al Dr. José Luis Carrillo Estrada, por ser mis asesores en la realización de esta tesis, por su paciencia en la elaboración y revisión de la misma y por haberme dado la oportunidad de iniciarme en el mundo de la investigación.

Agradezco a los miembros del jurado: Dra. Minerva González Melchor, Dr. Alfredo Díaz De Anda, y al Dr. Víctor Dossetti Romero, por sus sugerencias y comentarios para la obtención de una versión mejorada de esta tesis.

Quiero agradecer a CONACyT por su apoyo económico durante mis estudios de maestría a través de mi beca y al programa II VIEP-BUAP por su apoyo económico al término de mi tesis.

Resumen

En este trabajo se presenta un estudio dentro de los sistemas hidrodinámicos de gases densos, donde se consideran rangos de distancias muy pequeñas para el estudio de las colisiones moleculares, pero lo suficientemente grandes para utilizar las herramientas de la mecánica clásica, en base a este estudio se desarrolla un modelo cinético bidimensional, es decir, empleamos la ecuación de Enskog para el caso de discos rígidos, junto a este modelo empleamos la teoría escalar de ocho campos, la cual se deduce dentro de la Teoría Cinética de Gases. Una vez integradas, el modelo cinético bidimensional y la teoría de ocho campos, podemos deducir mediante el método de momentos de Grad las ecuaciones constitutivas y las ecuaciones de campo linealizadas. Luego de hallar las ecuaciones de campo linealizadas, analizamos a partir de estas las variables relevantes no conservadas del sistema, es decir, la parte cinética del tensor viscoso sin traza y la parte cinética del flujo de calor previamente llevadas al espacio de frecuencias y vectores de onda. Una vez que expresamos estas variables en este nuevo espacio, empleamos las ecuaciones constitutivas que dedujimos, específicamente las ecuaciones para los flujos colisionales en las que colocaremos las variables relevantes no conservadas. Así, estas nuevas ecuaciones constitutivas nos aportan como términos los coeficientes de transporte generalizados, que son por si mismos un resultado importante ya que contienen la información sobre la densidad molecular, temperatura y tiempos de relajación. Volviendo a las variables relevantes del sistema, se integró en ellas la información del tensor viscoso y flujo de calor en el espacio de frecuencias y vectores de onda. A partir de estas variables relevantes se deduce la matriz hidrodinámica.

Por otro lado, partiendo de la matriz hidrodinámica y como un resultado, pueden hallarse los modos colectivos hidrodinámicos, los cuales nos aportan la "forma y el origen" de la perturbación del sistema. Finalmente, mostramos visualmente el comportamiento del sistema mediante graficas de los coeficientes que se obtienen de la solución del polinomio característico que se halló a partir del determinante de la matriz hidrodinámica, es decir los coeficientes de los modos colectivos. De esto último, la observación más importante que se obtuvo de las graficas

de los modos colectivos hidrodinámicos es que entre más energía se entrega al sistema en forma de radiación de luz o neutrones, los modos colectivos divergen bastante en comportamiento.

Índice general

Resumen	I
Índice general	IV
1. Introducción	1
1.1. Hidrodinámica molecular	1
2. Modelo cinético bidimensional	4
2.1. Ecuación de transferencia de Boltzmann	4
2.2. Encuentros moleculares binarios	5
2.2.1. Caracterización espacial del encuentro	6
2.2.2. Las funciones de distribución en el encuentro molecular	7
2.2.3. Ecuación completa de Boltzmann	9
2.2.3.1. Expresión para $\partial_e f / \partial t$	9
2.3. Dinámica molecular	11
2.3.1. Colisión bidimensional	11
2.3.2. Ecuación de Enskog para un gas denso de discos rígidos	12
2.4. Teoría de Ocho-Campos escalares	17
2.4.1. La función de distribución	19
2.4.2. Ecuaciones de campo linealizadas	20
3. Matriz Hidrodinámica del gas denso de discos rígidos	23
3.1. Ecuaciones hidrodinámicas	23
3.2. Ecuaciones constitutivas	23
3.2.1. Ecuaciones constitutivas generalizadas	27
3.2.2. Ecuaciones hidrodinámicas linealizadas	29
3.2.3. Transformada de Laplace-Fourier	29

3.2.4. Ecuaciones algebraicas	30
3.2.5. Matriz Hidrodinámica	32
4. Modos Normales del gas denso de discos rígidos	36
4.1. Dispersión de luz o neutrones	36
4.1.1. Rango de empleo	37
4.2. Ecuación secular y polinomio característico	38
4.2.1. Otros métodos para el cálculo de los modos colectivos	40
4.2.2. Análisis gráfico de los modos hidrodinámicos	44
4.2.3. Valoración física de las gráficas	47
4.3. Tiempos de relajación	48
4.3.1. τ_q y τ_p	49
4.3.2. Resultados alternativos para el cálculo de los tiempos de relajación	50
5. Conclusiones	53
Bibliografía	55

Capítulo 1

Introducción

1.1. Hidrodinámica molecular

Dentro del desarrollo natural de la dinámica de fluidos, nos encontramos en algún momento con la necesidad de caracterizar los flujos en un gas, mediante el análisis de la Teoría Cinética de Gases. Los principales fundadores de lo que hoy en día conocemos como *Teoría Cinética Elemental*³ fueron; Daniel Bernoulli (1700-1782), John Herapath (1790-1868), John James Waterson (1811-1883), James Prescott Joule (1818-1889), Karl Krönig (1822-1879), Rudolf Clausius (1822-1888). Los constructores más importantes de la *Teoría Cinética de Gases Moderna*³ fueron James Clerk Maxwell (1831-1879) y Ludwig Boltzman (1844-1906). En 1867 Maxwell propuso una ecuación de transporte general para cantidades macroscópicas arbitrarias asociadas con los valores promedio de cantidades microscópicas. Boltzmann, en 1872, propuso una ecuación integro-diferencial que representa la evolución temporal de la función de distribución de velocidades en el espacio fase de coordenadas y velocidades de las moléculas, y es llamada *la ecuación de Boltzmann*^{2,3}. Uno de los principales objetivos de la Teoría Cinética de Gases es describir las propiedades macroscópicas de los gases, tales como presión, temperatura, conductividad, viscosidad, difusión, etc. A partir de las cantidades microscópicas que están asociadas con las moléculas que componen el gas, tales como la masa, velocidad, energía cinética, grados internos de libertad y fuerzas de interacción entre moléculas³. Podemos observar las áreas en que ha evolucionado la dinámica de fluidos en la figura 1.1.

La base mas importante de esta tesis es la ecuación de Enskog⁴, la cual es una modificación de la ecuación de Boltzmann para gases densos. Para un rango de distancias muy pequeñas, pero lo suficientemente grandes para realizar un análisis dentro de la mecánica clásica y atendiendo densidades moleculares que podemos considerar como altas,

en este estudio se tratará ordenadamente, primero a la deducción de la ecuación de Boltzmann a partir de la caracterización espacial de los encuentros binarios, e inmediatamente después, en el rango de gases densos, desarrollaremos el *modelo cinético bidimensional*, es decir, emplearemos la ecuación de Enskog, para el caso de discos rígidos⁴. Una vez que formulemos las bases del modelo cinético bidimensional, junto a este modelo emplearemos la teoría escalar de ocho campos, la cual también se deduce dentro de la Teoría Cinética de Gases. Una vez integradas, el modelo cinético bidimensional y la teoría de ocho campos, podemos deducir mediante el método de momentos de Grad⁴, las ecuaciones de campo linealizadas y las ecuaciones constitutivas. Todo este desarrollo es realizado en el capítulo 2.

Posteriormente a la deducción de las ecuaciones de campo linealizadas, dentro del capítulo 3, analizaremos a partir de estas las variables relevantes no conservadas del sistema, es decir, la parte cinética del tensor viscoso sin traza y la parte cinética del flujo de calor⁹ en el espacio k_i, ω usando la transformada de Fourier. En este nuevo espacio, emplearemos las ecuaciones constitutivas, específicamente las ecuaciones para los flujos colisionales en las que colocaremos las variables relevantes no conservadas. Así, estas nuevas ecuaciones nos aportarán dentro de sus términos a los *coeficientes de transporte generalizados*, que son por si mismos un resultado importante ya que en estos está presente la información del factor de densidad, temperatura, masa de las moléculas y los tiempos de relajación. Volviendo nuevamente a las variables relevantes del sistema e integrando en ellas la información del tensor viscoso y flujo de calor en el espacio k_i, ω , es decir, empleando el método de Laplace-Fourier, deduciremos a partir de estas la *matriz hidrodinámica*¹⁴, esta matriz es una forma elegante de mostrar la información del sistema ante una perturbación. A partir de la matriz hidrodinámica y como otro resultado de esta tesis, pueden hallarse los *modos colectivos hidrodinámicos*, los cuales son deducidos en el capítulo 4. Los modos colectivos hidrodinámicos nos dicen la "forma y el origen" de las perturbaciones espontaneas que se generan en el sistema.

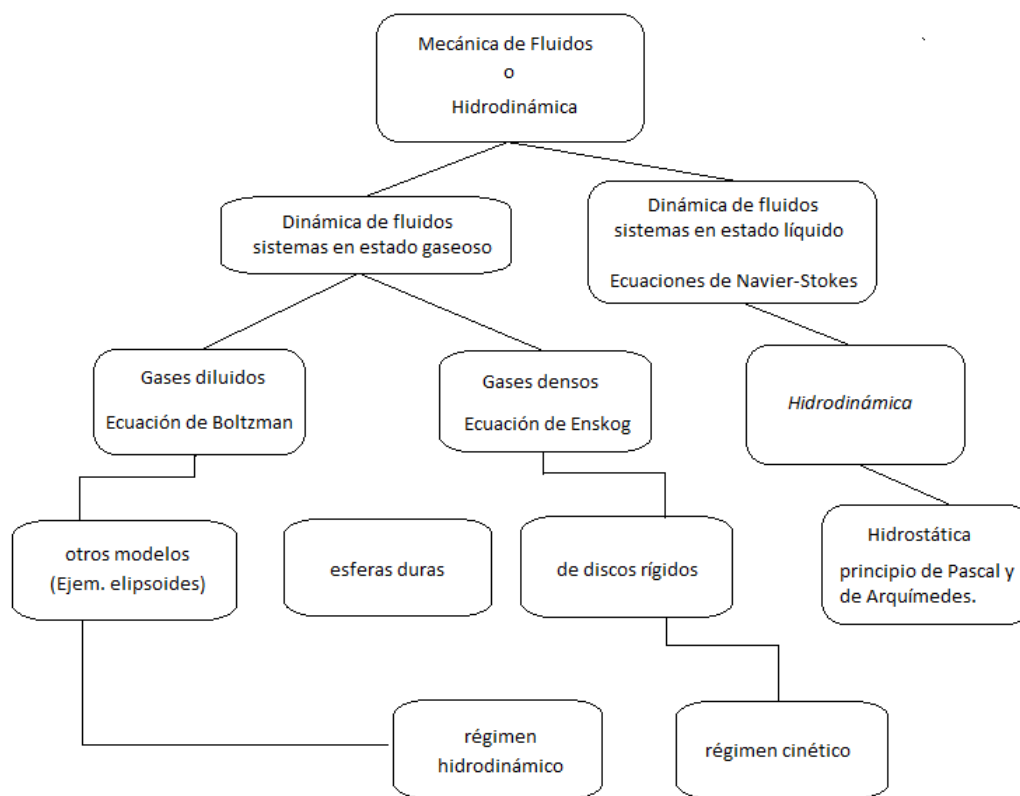


Figura 1.1: Áreas de la Hidrodinámica

Capítulo 2

Modelo cinético bidimensional

2.1. Ecuación de transferencia de Boltzmann

Antes de iniciar con el estudio de gases densos bidimensionales, debemos comenzar el estudio de fenómenos de transporte mediante el uso de la ecuación de transferencia de Boltzmann².

Consideremos un gas diluido contenido en un recipiente muy grande, cuyas paredes no interactúan con el gas, y pensemos en un elemento diferencial de volumen con centro en $d\mathbf{r}$ con cierta cantidad de moléculas. Consideremos que en este gas cada molécula está sujeta a una fuerza externa $m\mathbf{F}$, siendo \mathbf{F} la fuerza por unidad de masa y la velocidad de cada molécula \mathbf{c} . Además, \mathbf{F} puede ser una función de \mathbf{r} y t pero no de \mathbf{c} . Entre los tiempos t y $t + dt$ la velocidad \mathbf{c} de cualquier molécula que no colisiona con otra habrá de cambiar de $\mathbf{c} + \mathbf{F}dt$, y su vector de posición \mathbf{r} cambiará a $\mathbf{r} + \mathbf{c}dt$. Ahí hay $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)d\mathbf{c}d\mathbf{r}$ moléculas, las cuales al tiempo t están en el volumen $d\mathbf{r}$ centrado en \mathbf{r} y tiene velocidades en el intervalo $d\mathbf{c}$ centradas en \mathbf{c} . Luego de un intervalo dt , si el efecto de los encuentros puede considerarse como nulo, el mismo número de moléculas será el del conjunto de moléculas en el volumen $\mathbf{r} + \mathbf{c}dt$, $d\mathbf{r}$, y que tiene velocidades en el rango $\mathbf{c} + \mathbf{F}dt$, $d\mathbf{c}$, es decir

$$f(\mathbf{c} + \mathbf{F}dt, \mathbf{r} + \mathbf{c}dt, t + dt)d\mathbf{c}d\mathbf{r}, \quad (2.1)$$

si introducimos notación tensorial

$$f(c_i + F_i dt, r_i + c_i dt, t + dt)dc_i dr_i. \quad (2.2)$$

Pero el número de moléculas que originalmente se encontraba en el elemento de volumen \mathbf{r} , $d\mathbf{r}$ es en general distinto del segundo conjunto, dado que los encuentros moleculares del conjunto inicial han desviado algunas moléculas de su curso y moléculas exteriores han entrado debido también a encuentros con el segundo conjunto, entonces la ganancia de moléculas por el segundo conjunto debe ser proporcional a $d\mathbf{c}d\mathbf{r}dt$, y se denota como $(\partial_e f/\partial t)$, así la variación temporal debida a colisiones es

$$[f(c_i + F_i dt, r_i + c_i dt, t + dt)dc_i dr_i - f(c_i, r_i, t)dc_i dr_i] = \frac{\partial_e f}{\partial t} dc_i dr_i dt, \quad (2.3)$$

al dividir por el producto $dc_i dr_i dt$, y hacer tender a cero dt se obtiene la ecuación de Boltzmann,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial r_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = Df. \quad (2.4)$$

Ahora, recurriendo al análisis de las colisiones, podemos deducir la forma correcta de Df .

2.2. Encuentros moleculares binarios

Consideraremos ahora el encuentro de dos moléculas de masas m_1 y m_2 . Además, consideramos moléculas esféricas lisas simétricas, no obstante, el siguiente análisis se puede realizar también y de forma similar para discos rígidos. La fuerza que ejerce una molécula sobre otra está dirigida a lo largo de la línea que une sus centros, llamados A y B. Esta aparecerá solo cuando estas colisionan, se desprecian además otras fuerzas externas. Ahora, nos referiremos al tiempo antes del encuentro como aquel donde las moléculas aún no han empezado a influenciarse notoriamente la una a la otra, moviéndose en línea recta o cercana a una asíntota de la órbita que estas describen bajo la influencia de la otra, siendo las velocidades antes y después del encuentro c_{1i} , c_{2i} , y c'_{1i} , c'_{2i} . Mediante el empleo de la definición de centro de masas podemos a su vez definir:

$$m_0 = m_1 + m_2, \quad M_1 = m_1/m_0, \quad M_2 = m_2/m_0. \quad (2.5)$$

Como el centro de masa de estos sistemas se mueve uniformemente a través del encuentro, su

velocidad constante G_i puede expresarse como:

$$m_0 G_i = m_1 c_{1i} + m_2 c_{2i} = m_1 c'_{1i} + m_2 c'_{2i}, \quad (2.6)$$

si llamamos a las velocidades iniciales y finales de la segunda molécula relativa a la primera, y de la primera relativa a la segunda como g_{21i} , g'_{21i} y g_{12i} , g'_{12i} respectivamente, y observamos que se cumple:

$$g_{21i} = c_{2i} - c_{1i} = -g_{12i}, \quad g'_{21i} = c'_{2i} - c'_{1i} = -g'_{12i} \quad (2.7)$$

además, puede hacerse ver que

$$g_{21} = g_{12} = g, \quad g'_{21} = g'_{12} = g' \quad (2.8)$$

y

$$g = g'. \quad (2.9)$$

Podemos apreciar esto visualmente en la figura 2.1.

2.2.1. Caracterización espacial del encuentro

La órbita LMN de la segunda molécula relativa a la primera es simétrica con respecto a la línea apsidal. Esta línea pasa a través de O, la intersección de las dos asíntotas, y biseca el ángulo entre estas. Si representamos por OAK (Figura 2.1), K siendo el punto en el cual OA corta la esfera unitaria de centro A, la dirección de la línea apsidal (Figura 2.1). El vector unitario AK es denotado por k_i . Las componentes de g_{21i} y g'_{21i} en la dirección k_i son iguales en magnitud pero opuestas en signo, mientras las componentes perpendiculares son iguales. Hay que observar que las asíntotas PO, OQ (Figura 2.1) de la curva del encuentro están en dirección de las velocidades relativas inicial y final g_{21i} , g'_{21i} . Se utiliza solo con la finalidad de visualización y por consistencia con nuestra figura 2.2, notación vectorial en el siguiente párrafo.

Si P'A es paralela a PO, tal que está en dirección de \vec{g}_{21} . La dirección de AP' se fija entonces por las direcciones c_1 , c_2 , la orientación del plano LMN al rededor de AP' es independiente de estas velocidades, y es por lo tanto una variable adicional del encuentro. Podemos especificarla

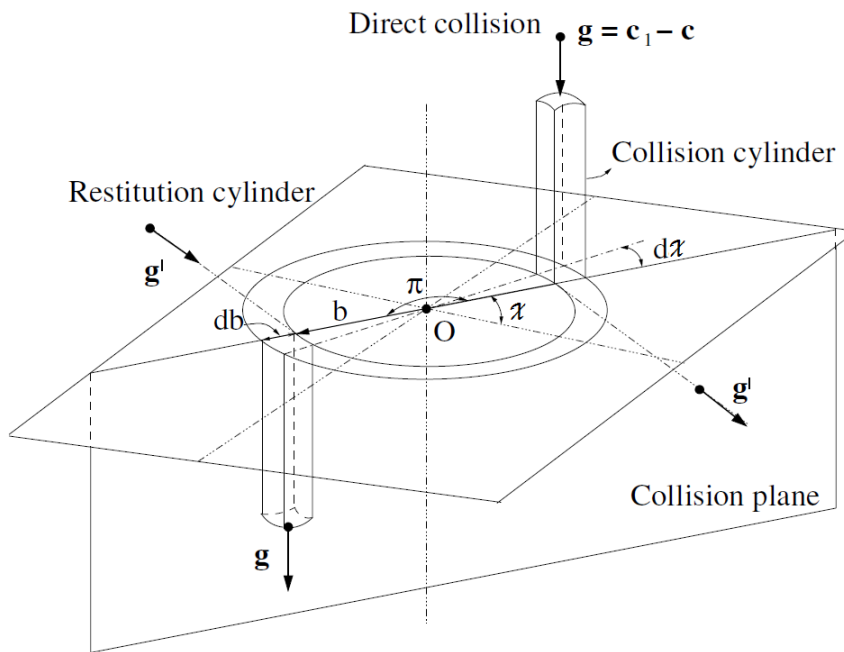


Figura 2.2: Geometría del encuentro molecular. Las componentes de \mathbf{g} y \mathbf{g}' en la dirección \mathbf{k} son iguales en magnitud pero opuestas en signo, mientras las componentes perpendiculares son iguales. Figura que se muestra en: Gilberto Madeiros Kremer, An Introduction to the Boltzmann Equation and Transport Processes in Gases. (Springer pub. 2010).

b y ϵ , son tomadas con exactitud, por lo que deben tomarse los intervalos db y $d\epsilon$. Con las consideraciones anteriores es posible hacer ver que el número de encuentros a una distancia r_i , dr_i a partir del punto A es

$$f_1 f_2 g b db d\epsilon dc_{1i} dc_{2i} dr_i dt. \quad (2.10)$$

Sean e_i , e'_i las componentes de vectores unitarios en la dirección de g_{21i} , g'_{21i} , de forma que $g_{21i} = ge_i$, $g'_{21i} = ge'_i$. Pero, por otra parte podemos escribir (2.10) en términos de de' , ya que e'_i es un vector unitario, le podemos asociar un elemento de área de ángulo sólido. Por otro lado, recordando que podemos considerar a χ , ϵ que especifican la orientación de e'_i relativa a una dirección inicial e_i .

$$de' = \text{sen}\chi d\chi d\epsilon = \frac{\text{sen}\chi}{\left| \frac{\partial b}{\partial \chi} \right|} db d\epsilon \quad (2.11)$$

por lo que podemos escribir,

$$bdbd\epsilon = \alpha_{12} de', \quad (2.12)$$

es decir,

$$\alpha_{12} = b \left| \frac{\partial b}{\partial \chi} \right| / \text{sen}\chi, \quad (2.13)$$

además, podemos obtener al sustituir $\alpha_{12} de'$ de la ecuación (2.12) en la ecuación (2.10):

$$f_1 f_2 g \alpha_{12} de'_i dc_{1i} dc_{2i} dr_i dt, \quad (2.14)$$

para el número de encuentros.

2.2.3. Ecuación completa de Boltzmann

2.2.3.1. Expresión para $\partial_e f / \partial t$.

Para un conjunto de diferenciales de volúmen, la evolución temporal de la función de distribución f debida a las colisiones de m , con moléculas m_1 , m_2 , m_3 , etc. Es

$$\frac{\partial_e f_1}{dt} = \left(\frac{\partial_e f_1}{dt} \right)_1 + \left(\frac{\partial_e f_1}{dt} \right)_2 + \dots, \quad (2.15)$$

donde los subíndices 1, 2, .. se refieren a la evolución para las funciones de distribución para moléculas del tipo m_1, m_2, \dots etc.

Considerando ahora el conjunto de moléculas de primera clase en dr_i , con velocidades en el rango c_{1k}, dc_{1k} ; el incremento neto en dt en el número de moléculas de este conjunto debido a colisiones con el segundo conjunto es

$$\frac{\partial_e f_1}{dt}. \quad (2.16)$$

Como cada colisión molecular resulta en un cambio de velocidad, entonces la cantidad de moléculas perdidas en dt debido a choques con m_2 , es decir, las moléculas del conjunto fuera del elemento de volumen inicial tal que c_{2i} y e'_j están en dirección dc_{2i} y de'_j , puede hallarse usando la ecuación (2.10), esta es

$$f_1 f_2 g \alpha_{12} de'_j dc_{1k} dc_{2i} dr_i dt, \quad (2.17)$$

mientras que la pérdida total para toda e'_j es

$$dc_{1k} dr_i dt \int \int f_1 f_2 g \alpha_{12} de'_j dc_{1k} dc_{2i} dr_i dt. \quad (2.18)$$

Luego, el número de encuentros inversos con velocidades c'_{1k}, c'_{2i} en el rango dc'_{1k}, dc'_{2i} , considerando que e'_j descansa en el ángulo sólido de_j , es

$$f'_1 f'_2 g \alpha_{12}(g, \chi) de_j dc'_{1k} dc'_{2i} dr_i dt. \quad (2.19)$$

Ahora, para el problema inverso a la ecuación (2.18), es decir, la ganancia total $\forall c_{2i}, e'_j$, intercambiamos de orden la función de distribución simplemente llamando f'_1, f'_2 y como deseamos cambiar de variable de integración de $de'_j dc_{1k} dc_{2i}$ a $de_j dc'_{1k} dc'_{2i}$, construimos el jacobiano

$$J \equiv \frac{\partial(G_k, g_{21i})}{\partial(c_{1k} c_{2i})} = \delta_i^j. \quad (2.20)$$

acorde a la notación de Chapman², de dónde se implica que

$$dG_k, dg_{21i} = |J| dc_{1k} dc_{2i} \quad \Rightarrow \quad de_j dc'_{1k} dc'_{2i} = de'_j dc_{1k} dc_{2i}, \quad (2.21)$$

luego, por simetría podemos expresar la ecuación (2.19) como

$$f'_1 f'_2 g \alpha_{12} d e'_j d c_{1l} d c_{2i} d r_k d t, \quad (2.22)$$

integrando $\forall e'_j, c_{2i}$. Así tenemos que,

$$d c_{1l} d r_k d t \int \int f'_1 f'_2 g \alpha_{12} d e'_j d c_{2i} \quad (2.23)$$

y restando a esta expresión la ecuación (2.18) se obtiene

$$d c_{1l} d r_k d t \int \int (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) g \alpha_{12} d e'_j d c_{2i}. \quad (2.24)$$

Finalmente, dividiendo entre $d c_{1l} d r_k d t$ y comparando con la expresión para Df , encontramos

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial r_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} \right) = \int \int (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) g \alpha_{12} d e'_j d c_{2i}. \quad (2.25)$$

que es la ecuación de transporte de Boltzmann.

2.3. Dinámica molecular

2.3.1. Colisión bidimensional

En las secciones pasadas, se dedujo la ecuación de transporte de Boltzmann mediante el estudio de las colisiones moleculares, sin embargo, este análisis fue echo para colisiones en un espacio físico tridimensional. Si ahora realizamos un análisis sobre la geometría de los encuentros en nuestro problema bidimensional (Figura 2.3), observamos que g'_{12} y g'_{21} resultantes luego de la colisión deben proyectarse en la dirección de propagación para el correcto estudio posterior de esta teoría, es decir, deben proyectarse en la dirección de propagación k , observando en la figura 2.3 los distintos vectores involucrados en el movimiento.

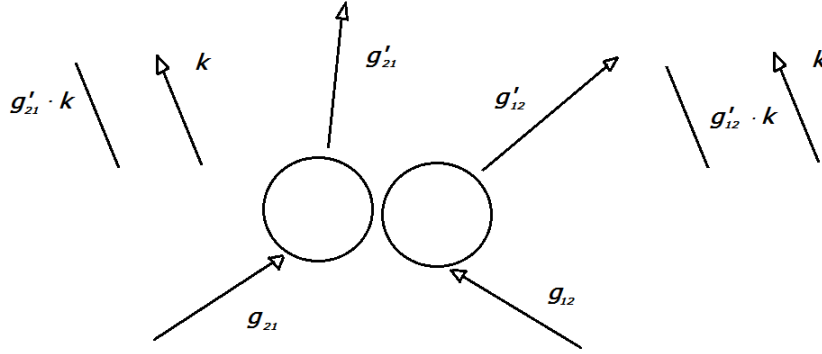


Figura 2.3: Encuentro bidimensional; en este caso, nuevamente definimos a la velocidad relativa lineal como $\mathbf{g}_{12} = \mathbf{c}_1 - \mathbf{c}_2$ y $\mathbf{g}_{21} = \mathbf{c}_2 - \mathbf{c}_1$, siendo \mathbf{g}'_{12} y \mathbf{g}'_{21} las velocidades relativas resultantes, las cuales deben proyectarse en dirección de propagación k .

2.3.2. Ecuación de Enskog para un gas denso de discos rígidos

Deseamos determinar un conjunto de ecuaciones linealizadas para las ecuaciones de balance en el régimen moderadamente denso de discos rígidos usando el método de momentos de Grad^{3,4}. En este caso, el estado macroscópico es caracterizado por los campos de densidad de masa, velocidad, tensor de presión y flujo de calor. Durante el inicio de este capítulo hemos usado a la variable χ como una variable angular, pero ahora denotaremos por $\chi(\mathbf{x}, t)$ a un factor de densidad² dentro de la ecuación de transferencia, siendo a su vez x la posición de la molécula en el espacio bidimensional. El factor de densidad se introduce al tomar en cuenta que durante la colisión entre dos moléculas cualesquiera en un gas denso, hay una gran cantidad de moléculas que no están colisionando con estas dos o bien tienen sus propias colisiones, pero en ninguno de estos casos las demás moléculas podrán interactuar con las iniciales ya que solo se toman en cuenta colisiones binarias, por lo tanto, el volumen de todas las moléculas que no pueden colisionar con las primeras es de tal magnitud, que se convierte en una cantidad importante, aumentando así la probabilidad de choque para otras moléculas, ya que contarán con un volumen menor para moverse sin colisionar, a diferencia del caso de un gas diluido donde el volumen que no puede ser ocupado durante una colisión es muy pequeño para ser tomado en cuenta. Se considera que el anterior volumen excluido comienza a tener relevancia para una densidad de 10^{18} moléculas por centímetro cúbico, es decir, el caso de un

gas moderadamente denso. Ahora que conocemos la modificación adecuada para la ecuación de Boltzmann, partimos de la ecuación de transferencia de Enskog bidimensional⁴,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = \int \left\{ \chi(\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{k}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}', t) f(\mathbf{x} + a\mathbf{k}, \mathbf{c}', t) - \chi(\mathbf{x} - \frac{a}{2}\mathbf{k}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) f(\mathbf{x} - a\mathbf{k}, \mathbf{c}_1, t) \right\} a(\mathbf{g}, \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1, \quad (2.26)$$

siendo $\mathbf{g} = \mathbf{c}'_1 - \mathbf{c}$, la velocidad relativa lineal, a el diámetro de la partícula y $\chi = \chi(\mathbf{x}, t)$ la función de distribución radial. Ahora, suponiendo el cambio en la densidad del gas así como el cambio en su temperatura no muy grandes, podemos expandir:

$$\chi(\mathbf{x} \pm \frac{a}{2}\mathbf{k}, t), \quad f(\mathbf{x} + a\mathbf{k}, \mathbf{c}'_1, t) \quad \text{y} \quad f(\mathbf{x} - a\mathbf{k}, \mathbf{c}_1, t),$$

en serie de MacLaurin,

$$\chi(\mathbf{x} \pm \frac{a}{2}\mathbf{k}, t) = \chi(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \chi(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} \left(\pm \frac{a}{2} k_i \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i^2} \left(\pm \frac{a}{2} k_i \right) \left(\pm \frac{a}{2} k_j \right) + \dots \quad (2.27)$$

$$f(\mathbf{x} + a\mathbf{k}, \mathbf{c}'_1, t) = f(\mathbf{x}'_1, t) + \frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{c}'_1, t)}{\partial x_i} (ak_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}'_1, t)}{\partial x_i^2} (ak_i)(ak_j) + \dots \quad (2.28)$$

$$f(\mathbf{x} - a\mathbf{k}, \mathbf{c}_1, t) = f(\mathbf{x}'_1, t) + \frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, t)}{\partial x_i} (-ak_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, t)}{\partial x_i^2} (-ak_i)(-ak_j) + \dots \quad (2.29)$$

Introduzcamos ahora la notación: $f = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$, $f_1 = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, t)$, $f' = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}', t)$ y $f'_1 = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}'_1, t)$. Con esto último, las ecuaciones (2.27) a (2.29) se transforman en

$$\chi(\mathbf{x} \pm \frac{a}{2}\mathbf{k}, t) = \chi + \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \left(\pm \frac{a}{2} k_i \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x_i^2} \left(\pm \frac{a}{2} k_i \right) \left(\pm \frac{a}{2} k_j \right) + \dots, \quad (2.30)$$

$$f(\mathbf{x} + a\mathbf{k}, \mathbf{c}'_1, t) = f'_1 + \frac{\partial f'_1}{\partial x_i} (ak_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f'_1}{\partial x_i^2} (ak_i)(ak_j) + \dots, \quad (2.31)$$

$$f(\mathbf{x} - a\mathbf{k}, \mathbf{c}_1, t) = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial x_i} (-ak_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_1}{\partial x_i^2} (-ak_i)(-ak_j) + \dots \quad (2.32)$$

Con esta notación podemos expresar a la ecuación (2.26) como

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} &= \int \left\{ \left(\chi + \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \left(\frac{a}{2} k_i \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \left(\frac{a}{2} k_i \right) \left(\frac{a}{2} k_j \right) \right) \right. \\
&\quad \times f' \left(f'_1 + \frac{\partial f'_1}{\partial x_i} (a k_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial f'_1}{\partial x_i} (a k_i) (a k_j) \right) \\
&\quad - \left(\chi + \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \left(\frac{a}{2} k_i \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \left(\frac{a}{2} k_i \right) \left(\frac{a}{2} k_j \right) \right) \\
&\quad \left. \times f \left(f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial x_i} (-a k_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial f_1}{\partial x_i} (-a k_i) (-a k_j) \right) \right\} a(\mathbf{g}, \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1.
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Realizando el producto de la integral y agrupando los términos de un mismo orden, es decir, agrupando los productos de términos, de orden cero por términos de orden cero, los productos de orden uno por términos de orden uno, etc. obtenemos para cada sumando dentro de la integral:

$$(f'_1 f' - f_1 f) \chi a(\mathbf{g}, \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1, \tag{2.34}$$

$$a \left[\chi \left(f' \frac{\partial f'_1}{\partial x_i} + f \frac{\partial f_1}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} (f'_1 f' + f_1 f) \right] a(\mathbf{g}, \mathbf{k}) k_i, \tag{2.35}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{a^2}{2} \left\{ \chi \left(f' \frac{\partial f'_1}{\partial x_i} + f \frac{\partial f_1}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} (f'_1 f' - f_1 f) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x_i \partial x_j} (f'_1 f' - f_1 f) \right\} k_i k_j a(\mathbf{g}, \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Recordemos que ya se definió las funciones: f , f_1 , f' y f'_1 . Ahora, usando los términos (2.34) a (2.36), se renombra:

$$J_0(ff) = \chi \int (f'_1 f' - f_1 f) \chi a(\mathbf{g}, \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1, \tag{2.37}$$

$$J_I(ff) = \chi \int a \left[\chi \left(f' \frac{\partial f'_1}{\partial x_i} + f \frac{\partial f_1}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} (f'_1 f' + f_1 f) \right] a(\mathbf{g}, \mathbf{k}) k_i, \tag{2.38}$$

$$J_{II}(ff) = \frac{a^2}{2} \int \left\{ \chi \left(f' \frac{\partial f'_1}{\partial x_i} + f \frac{\partial f_1}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} (f'_1 f' - f_1 f) \right.$$

$$+ \frac{1}{4} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x_i \partial x_j} (f'_1 f' - f_1 f) \} k_i k_j a(\mathbf{g}, \mathbf{k}) d\mathbf{k} dc_1, \quad (2.39)$$

por lo que la ecuación de Enskog puede expresarse como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = J_0(ff) + J_I(ff) + J_{II}(ff). \quad (2.40)$$

A partir de esta ecuación se pueden hallar las ecuaciones de balance.

Ahora que se ha reexpresado la ecuación de Enskog, en una ecuación sin la integral explícita, si multiplicamos la ecuación (2.40) por una función asociada a una propiedad molecular -arbitraria- ψ , tenemos,

$$\frac{\partial f}{\partial t} \psi + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \psi = J_0(ff)\psi + J_I(ff)\psi + J_{II}(ff)\psi, \quad (2.41)$$

observando los términos de esta ecuación notamos que podemos usar la regla de la cadena en la siguiente forma.

Si

$$\frac{\partial}{\partial t}(f\psi) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + f \frac{\partial \psi}{\partial t} \Rightarrow \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) \psi = \frac{\partial}{\partial t}(f\psi) - f \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (2.42)$$

y si

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(f\psi) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right) + f \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \Rightarrow c_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right) \psi = c_i \frac{\partial}{\partial x_i}(f\psi) - c_i f \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \quad (2.43)$$

luego, integrando la ecuación (2.41) sobre todos los valores de c tenemos

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \psi dc + \int c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \psi dc = \int J_0(ff)\psi dc + \int J_I(ff)\psi dc + \int J_{II}(ff)\psi dc. \quad (2.44)$$

Si ahora sustituimos en la ecuación (2.44) los integrandos de las integrales del lado izquierdo por el resultado de las ecuaciones (2.42) y (2.43), definiendo:

$$\Psi = \int \psi f dc, \quad (2.45)$$

$$\phi_i^0 = \int \psi c_i f dc, \quad (2.46)$$

y llamando $d\Gamma = a(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} dc_1 dc$, se obtiene,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \phi_i^0}{\partial x_i} (\phi_i^0 + \phi_i^I + \phi_i^{II}) = P_I + P_{II} + P_{III}, \quad (2.47)$$

donde es posible hacer ver que

$$P_0 = \int \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} + c_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right) f dc + \int (\chi f_1 f (\psi' - \psi) dc, \quad (2.48)$$

$$P_I = \frac{a}{2} \int \chi \left[(\psi' - \psi) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\ln \frac{f}{f_1} \right) + \frac{\partial (\Psi' - \Psi)}{\partial x_i} \right] f f_1 k_i d\Gamma, \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} P_{II} &= \frac{a^2}{4} \int \chi \left[\frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\ln \frac{f}{f_1} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right] f f_1 k_i k_j d\Gamma \\ &\quad - \frac{a^2}{4} \int \chi (\psi' - \psi) \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f_1}{\partial x_i} \left(\ln \frac{f}{f_1} \right) k_i k_j d\Gamma \\ &\quad + \frac{a^2}{8} \int \chi (\Psi' - \Psi) \left[f_1 \frac{\partial^2}{\partial x_i} \partial x_j + f \frac{\partial^2}{\partial x_i} \partial x_j \right] k_i k_j d\Gamma, \end{aligned} \quad (2.50)$$

$$\phi_i^0 = \int \Psi c_i f dc, \quad (2.51)$$

$$\phi_i^I = \frac{a}{4} \int \chi (\Psi' - \Psi) f f_1 d\Gamma, \quad (2.52)$$

y

$$\begin{aligned} \phi_i^{II} &= \frac{a^2}{4} \int \chi \left[\frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\ln \frac{f}{f_1} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right] f f_1 d\Gamma \\ &\quad - \frac{a^2}{8} \frac{\partial}{\partial x_i} \int \chi (\Psi' - \Psi) f f_1 d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Notaremos más tarde que para una teoría linealizada, en las ecuaciones de la hidrodinámica generalizada, se puede prescindir de los términos P_{II} y ϕ_i^{II} .

2.4. Teoría de Ocho-Campos escalares

El estado microscópico de un gas denso de discos rígidos puede ser caracterizado por los ocho campos escalares:

$$\rho = \int m f dc, \quad (2.54)$$

$$v_i = \frac{1}{\rho} \int m c_i f dc, \quad (2.55)$$

$$P_{ij} = \int m C_i C_j f dc, \quad (2.56)$$

$$q_i = \int m C^2 C_i f dc, \quad (2.57)$$

siendo las ecuaciones (2.54) a (2.57) son; la densidad, velocidad, tensor de presión cinético y flujo cinético de calor. Despreciando los términos ϕ_i^{II} y P_{II} en la ecuación de transferencia se tiene,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \phi_i^0}{\partial x_i} (\phi_i^0 + \phi_i^I) = P_I + P_{II}, \quad (2.58)$$

tomando ψ en la ecuación de transferencia como m , $m C_i C_j$, $m C_i$, $m C^2 C_i / 2$ y usando la definición de *velocidad peculiar*: $C_i = c_i - v_i$. Obtenemos tras un poco de manipulación algebraica, respectivamente:

la ecuación de *balance de masa*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i^0}{\partial x_i} = 0, \quad (2.59)$$

la ecuación de *balance de momento lineal*

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i v_j + p_{ij} + p_{ij}^I) = 0, \quad (2.60)$$

la ecuación de *balance del tensor de presión cinético*

$$\begin{aligned} & \frac{\partial p_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (p_{ij} v_k + p_{ijk} + p_{ijk}^I) + \\ & (p_{jk} + p_{jk}^I) \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + (p_{ik} + p_{ik}^I) \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = P_{ij} + P_{ij}^I, \end{aligned} \quad (2.61)$$

la ecuación de *balance del flujo cinético de calor*

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i v_j + p_{ij} + p_{ij}^I) + (p_{ijk} + p_{ijk}^I) \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + (q_j + q_j^I) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \\ & \frac{\partial q_i}{\partial t} - \frac{\partial p_{ij}}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial x_k} (p_{jk} + p_{jk}^I) - \frac{\partial p_{rr}}{\partial 2\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} (p_{ij} + p_{ij}^I) = Q_i + Q_i^I. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Dado que estas expresiones surgen de una manipulación algebraica de la ecuación de transferencia, nombraremos los términos más importantes que se requieren para la teoría linealizada⁴: el tensor de presión toma la forma

$$p_{ij}^I = \int \chi m (C'_i - C_i) f f_1 k_j d\mathbf{\Gamma}, \quad (2.63)$$

el flujo del tensor de presión es

$$p_{ijk} = \int m C_i C_j C_k f dc, \quad (2.64)$$

$$p_{ijk}^I = \frac{a}{2} \int \chi m (C'_i C'_j - C_i C_j) k_k d\mathbf{\Gamma}, \quad (2.65)$$

el flujo de calor

$$q_{ij} = \frac{1}{2} \int m C^2 C_i C_j f dc, \quad (2.66)$$

$$q_{ij}^I = \frac{a}{4} \int \chi m (C'^2 C'_i - C'^2 C_i) f f_1 k_j d\mathbf{\Gamma}, \quad (2.67)$$

$$q_k^I = \frac{a}{4} \int \chi m (C'^2 - C^2) f f_1 k_k d\mathbf{\Gamma}, \quad (2.68)$$

siendo los términos de producción

$$P_{ij} = \int \chi m (C'_i C'_j - C_i C_j) f f_1 d\mathbf{\Gamma} dc, \quad (2.69)$$

$$Q_i = \frac{1}{2} \int \chi m (C'^2 C'_i - C^2 C_i f f_1) d\mathbf{\Gamma}, \quad (2.70)$$

$$P_{ij}^I = \frac{1}{2} \int \chi m (C'_i C'_j - C_i C_j f f_1) \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\ln \frac{f}{f_1} \right) k_k d\mathbf{\Gamma} dc, \quad (2.71)$$

$$Q_i^I = \frac{1}{2} \int \chi m (C'^2 C'_i - C^2 C_i f f_1) \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\ln \frac{f}{f_1} \right) k_k d\mathbf{\Gamma} dc. \quad (2.72)$$

Hasta este punto, hemos expresado en forma conveniente a los términos que aparecen en las ecuaciones de balance, pero falta la forma de las funciones de distribución. En seguida propondremos la forma que esta debe tener.

2.4.1. La función de distribución

Si podemos establecer una relación entre las ecuaciones de balance (2.59) a (2.62) y los campos básicos (2.54) a (2.57), el sistema de las ecuaciones de balance se convierte en un sistema de ecuaciones de campo para ρ , v_i , p_{ij} y q_i .

Proponemos a nuestra función de distribución cerca del equilibrio^{3,4} como:

$$f = f_0 \left[1 - \frac{p_{\langle ij \rangle}}{2\rho} \left(\frac{m}{k_b T} \right)^2 C_i C_j \right] + f_0 \left[\frac{q_i}{\rho} \left(\frac{m}{k_b T} \right)^2 \left(\frac{m C^2}{4k_b T} - 1 \right) C_i \right], \quad (2.73)$$

donde

$$f_0 = \frac{\rho}{m} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right) e^{\frac{-m C^2}{2\pi k_B T}},$$

es la función de distribución de Boltzmann para un gas bidimensional en el equilibrio.

Ahora, insertando f en las ecuaciones (2.64) a (2.67), obtenemos las *ecuaciones constitutivas*,

$$p_{ijk} = \frac{1}{2} (q_i \delta_{jk} + q_j \delta_{ik} + q_k \delta_{ij}), \quad (2.74)$$

$$q_{ij} = 2\rho \left(\frac{k_B T}{m} \right)^2 \delta_{ij} + 3 \frac{k_B T}{m} p_{\langle ijk \rangle}, \quad (2.75)$$

$$P_{ij}^I = \rho b \chi \left(\rho \frac{k_B}{m} T \delta_{ij} + \frac{1}{2} p_{\langle ij \rangle} \right), \quad (2.76)$$

$$q_i^I = \frac{3}{4} \rho b \chi q_i, \quad (2.77)$$

$$P_{ijk}^I = \frac{1}{2} \rho b \chi (q_i \delta_{jk} + q_j \delta_{ik} + \frac{1}{2} q_k \delta_{ij}), \quad (2.78)$$

$$q_{ij}^I = 2 \rho b \chi \frac{K_B T}{m} \left(\rho \frac{K_B}{m} T \delta_{ij} + \frac{7}{8} p_{\langle ij \rangle} \right), \quad (2.79)$$

$$P_{ij} = -2a \chi \frac{\rho}{m} \left(\frac{\pi K_B T}{m} \right)^{1/2} p_{\langle ij \rangle}, \quad (2.80)$$

$$Q_{ij} = -a \chi \frac{\rho}{m} \left(\frac{\pi K_B T}{m} \right)^{1/2} q_i, \quad (2.81)$$

$$P_{ij}^I = \rho b \chi \left(\rho \frac{K_B}{m} \right) \left(T \left(\frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} + \frac{1}{4} \frac{\partial q_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} \right) p_{\langle ij \rangle} \right), \quad (2.82)$$

$$Q_i^I = \frac{1}{2} \rho^2 b \chi \left(\frac{K_B}{m} \right), \quad (2.83)$$

donde $b = (\pi a^2 / 2m)$ y ρb es una cantidad llamada la co-área de las partículas.

2.4.2. Ecuaciones de campo linealizadas

Ahora estamos cercanos a la presentación de una teoría de campo linealizada para la hidrodinámica molecular. Si colocamos el valor calculado para las ecuaciones constitutivas (2.74) a (2.83) en las ecuaciones de balance (2.59) a (2.62) obtenemos un sistema de ecuaciones de campo para los campos básicos (2.54) a (2.57). O equivalentemente para

$$\rho, \quad v_i, \quad T, \quad p_{\langle ij \rangle} \quad \text{y} \quad q_i. \quad (2.84)$$

despreciando los términos no lineales y derivadas para

$$n v_i, \quad p_{\langle ij \rangle}, \quad q_i, \quad \partial \rho / \partial x_i \quad \text{y} \quad \partial T / \partial x_i \quad (2.85)$$

obtenemos las ecuaciones de campo linealizadas:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.86)$$

$$\begin{aligned} & \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \rho \frac{k_B}{m} (1 + \rho b \chi) \frac{\partial T}{\partial x_i} + \\ & \frac{k_B T}{m} (1 + 2\rho b \chi + \rho^2 b \chi \frac{\partial \chi}{\partial \rho}) \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\left(1 + \frac{1}{2} \rho b \chi\right) \frac{\partial p_{\langle ij \rangle}}{\partial x_i} = 0,$$

$$\begin{aligned} & \rho \frac{k_B}{m} \frac{\partial T}{\partial t} + \left(1 + \frac{3}{4} \rho b \chi\right) \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \\ & \rho \frac{k_B}{m} T (1 + \rho b \chi) \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \end{aligned} \quad (2.88)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial p_{\langle ij \rangle}}{\partial t} + \left(1 + \frac{3}{4} \rho b \chi\right) \frac{\partial q_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} \\ & + 2\rho \frac{k_B}{m} T \left(1 + \frac{1}{2} \rho b \chi\right) \frac{\partial q_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} = -2a\chi \frac{\rho}{m} + \left(\frac{\pi k_B T}{m}\right)^{1/2} p_{\langle ij \rangle}, \end{aligned} \quad (2.89)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial q_i}{\partial t} + 2\rho \left(\frac{k_B}{m}\right)^2 \left(1 + \frac{3}{4} \rho b \chi\right) \frac{\partial T}{\partial x_i} \\ & + \frac{k_B}{m} T \left(1 + \frac{3}{4} \rho b \chi\right) \frac{\partial p_{\langle ij \rangle}}{\partial x_j} = -a\chi \frac{\rho}{m} + \left(\frac{\pi k_B T}{m}\right)^{1/2} q_i, \end{aligned} \quad (2.90)$$

donde las ecuaciones (2.89) y (2.90) representan la parte con traza y la parte sin traza de la ecuación de balance del flujo cinético de calor respectivamente.

Capítulo 3

Matriz Hidrodinámica del gas denso de discos rígidos

3.1. Ecuaciones hidrodinámicas

Iniciaremos este capítulo tomando las ecuaciones de movimiento de nuestro gas moderadamente denso de discos rígidos. Primeramente, tomamos las variables relevantes no conservadas del sistema; la parte cinética del tensor viscoso sin traza cuya evolución está dada por⁹

$$\frac{\partial P_{ij}^{0K}}{\partial t} + 2nK_B T \chi^2 \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \chi^3 \left(\frac{\partial q_j}{\partial x_i} \right)^0 = -2 \sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi P_{ij}^{0K}, \quad (3.1)$$

y la parte cinética del flujo de calor

$$\frac{\partial q_i^K}{\partial t} + 2nm \left(\frac{K_B}{m} \right)^2 \chi^3 \frac{\partial T}{\partial x_i} + \frac{K_B T}{m} \chi^3 \frac{\partial P_{jk}^{0K}}{\partial x_i} = - \sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi q_i^K. \quad (3.2)$$

3.2. Ecuaciones constitutivas

Resolveremos ahora las ecuaciones hidrodinámicas de las variables no conservadas, para esto, expresamos las ecuaciones de los flujos en el *Espacio de Fourier* y tomaremos su componente longitudinal.

Recordamos ahora que entre las transformaciones integrales, la transformada de Fourier¹⁵ se

define como:

$$g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt, \quad (3.3)$$

su kernel la hace útil para el estudio de movimiento ondulatorio.

Ahora, en la ecuación para la parte cinética sin traza del tensor viscoso, aplicamos la transformada de Fourier sobre la derivada temporal, utilizando el teorema:

$$[f'(t)](\omega) = -i\omega g(\omega), \quad (3.4)$$

por lo que la ecuación (3.1) se convierte en

$$-i\omega P_{ij}^{0K}(\omega) + 2nK_B T \chi^2 \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \chi^3 \frac{\partial (q_j^K)^0}{\partial x_i} = -2\sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi P_{ij}^{0K}. \quad (3.5)$$

Además, dentro de la teoría de transformadas de Fourier, nos encontramos con el siguiente teorema¹⁵.

$$\frac{\partial r_j(k_i)}{\partial x_i} = \int [-ik_i g(k_i)] e^{-ik_j r_j} dk_i. \quad (3.6)$$

Este teorema nos muestra que $-ik_i g(k_i)$ es la transformada de $\frac{\partial r_j(k_i)}{\partial x_i}$, por lo que $\partial/\partial x_i = -ik_i$.

Con este conocimiento, se aplica ahora la transformada de Fourier sobre la función dependiente espacial tomando en cuenta únicamente la componente longitudinal, y obtenemos.

$$\begin{aligned} & (-i\omega) P_{ij}^{0K}(k_i, \omega) + 2nK_B T \chi^2 (-ik_i u_i(k_j, \omega)) + \\ & \chi^3 (-ik_i q_i(k_j, \omega)) = -2\sqrt{\frac{\pi a K_B T}{m}} n \chi \cdot P_{ij}^{0K}(k_j, \omega). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Llamando $\frac{\chi}{\tau_p^0} = 2\sqrt{\frac{K_B T}{\pi a^2 m}}$, se multiplica la ecuación (3.7) por $\frac{\tau_p^0}{\chi}$ para obtener,

$$\left(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi}\right) P_{ij}^{0K}(k_i, \omega) + \frac{\tau_p^0}{\chi} 2nK_B T \chi^2 (-ik_i u_i(k_j, \omega)) - \tau_p^0 \frac{\chi^3}{\chi} q_i(k_i, \omega) = 0, \quad (3.8)$$

además

$$\tau_p^0 = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{\pi a^2 K_B T}},$$

entonces

$$\tau_p^0 2nK_B T = \frac{K_B T m}{\pi} / a = \eta_0,$$

siendo τ_p^0 , η_0 , el tiempo característico de relajación asociado al tensor de presión y la viscosidad cortante usual del régimen hidrodinámico, respectivamente.

Con esta información (3.8) puede expresarse como

$$\left(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi}\right) P_{ij}^{0K}(k_i, \omega) + \eta_0 \frac{\chi^2}{\chi} (-ik_i u_i(k_j, \omega)) + \tau_p^0 \frac{\chi^3}{\chi} (-ik_i q_i(k_j, \omega)) = 0, \quad (3.9)$$

la parte longitudinal de esta última ecuación se obtiene de proyectar sobre la dirección de propagación, es decir, se multiplica por ik_i para obtener

$$\begin{aligned} & \left(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi}\right) ik_i ik_i : P_{ij}^{0K}(k_i, \omega) - \\ & \eta_0 \frac{\chi^2}{\chi} k^2 (ik_i u_i(k_j, \omega)) - \tau_p^0 \frac{\chi^3}{\chi} k^2 (ik_i q_i(k_j, \omega)) = 0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Partimos ahora en la misma forma que hicimos con el tensor viscoso, pero para la parte cinética del flujo de calor, esto es, tomando solo la componente longitudinal de la ecuación (3.2) se tiene,

$$\frac{\partial q_i^K}{\partial t} + 2nm \left(\frac{K_B}{m}\right)^2 \chi^3 \frac{\partial T}{\partial x_i} + \frac{K_B T}{m} \chi^3 \frac{\partial (P_{jk}^{0K})}{\partial x_i} = -2\sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi q_i^K, \quad (3.11)$$

y se aplica a esta ecuación el primer teorema de los ya mencionados para obtener

$$-i\omega q_i^K(\omega) + 2nm \left(\frac{K_B}{m}\right)^2 \chi^3 \frac{\partial T}{\partial x_i} T(\omega) +$$

$$\frac{K_B T}{m} \chi^3 \frac{\partial P_{jk}^{0K}(\omega)}{\partial x_i} = -\sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi q_i^K(\omega), \quad (3.12)$$

nuevamente, apliquemos el segundo teorema para obtener

$$\begin{aligned} -i\omega q_i^K(k_i, \omega) + 2nm \left(\frac{K_B}{m} \right)^2 \chi^3 (-ik_i) T(k_i, \omega) - \\ \frac{K_B T}{m} \chi^3 - ik_i P_{ik}^{0K}(k_i, \omega) = -\sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi q_i^K(k_i, \omega). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Ahora, llamamos $\tau_q = \frac{\tau_q^0}{\chi n} = \frac{1}{\chi} \sqrt{\frac{m}{K_B T \pi a^2}}$ el tiempo de relajación.

Si multiplicamos la ecuación (3.13) por τ_q^0 , se tiene

$$\begin{aligned} -i\omega \tau_q^0 q_i^K(k_i, \omega) - 2nm \left(\frac{K_B}{m} \right)^2 \tau_q^0 \chi^3 (ik_i T(k_i, \omega)) - \\ \frac{K_B T}{m} \tau_q^0 \chi^3 ik_i P_{ij}^{0K}(k_i, \omega) = -\chi q_i^K(k_i, \omega). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Observamos que el término

$$\frac{1}{n} \frac{\sqrt{m}}{\pi a^2 K_B T} 2nm \frac{K_B^2}{m^2} = \frac{2}{am} \frac{\chi^3}{\sqrt{m}} \sqrt{\frac{K_B^3}{\pi T}} = \lambda_0 \chi^3, \quad (3.15)$$

por lo que podemos escribir la ecuación (3.14) como

$$\begin{aligned} -i\omega \frac{\tau_q^0}{\chi} q_i^K(k_i, \omega) - \lambda_0 \frac{\chi^3}{\chi} (ik_i T(k_i, \omega)) - \\ - \frac{K_B T}{m} \tau_q^0 \frac{\chi^3}{\chi} ik_i P_{ij}^{0K}(k_i, \omega) + q_i^K(k_i, \omega) = 0. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Pero estamos interesados solo en los fenómenos longitudinales, por lo que nuevamente cambiamos de espacio proyectando en dirección de propagación del movimiento i.e.

$$\left(1 - i\omega \frac{\tau_q^0}{\chi} \right) ik_i q_i^K(k_j, \omega) - \lambda_0 \frac{\chi^3}{\chi} (ik_i T(k_i, \omega)) + \frac{K_B T}{m} \tau_q^0 \frac{\chi^3}{\chi} ik_i ik_i : P_{ij}^{0K} = 0. \quad (3.17)$$

A partir de las ecuaciones (3.10) y (3.17) podemos obtener las ecuaciones constitutivas.

3.2.1. Ecuaciones constitutivas generalizadas

Para obtener una descripción hidrodinámica generalizada de un gas denso de discos rígidos en el espacio reducido de variables conservadas $\rho(k_i, \omega)$, $u_i(k_i, \omega)$, $T(k_i, \omega)$, se requiere resolver las ecuaciones de movimiento del tensor de presiones P_{ij}^{0K} , y del flujo de calor⁹ $q_i^K(k_i, \omega)$ desacoplando las ecuaciones:

$$\left(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi}\right) ik_i ik_j : P_{ij}^{0K}(k_i, \omega) - \eta_0 \frac{\chi^2}{\chi} k^2 (ik_i u_i(k_j, \omega)) - \tau_p^0 \frac{\chi^3}{\chi} k^2 (ik_i q_i(k_j, \omega)) = 0 \quad (3.18)$$

y

$$\left(1 - i\omega \frac{\tau_q^0}{\chi}\right) ik_i q_j^K(k_i, \omega) - \lambda_0 \frac{\chi^3}{\chi} (ik_i T(k_i, \omega)) + \frac{K_B T}{m} \tau_q^0 \frac{\chi^3}{\chi} ik_i ik_i : P_{ij}^{0K} = 0. \quad (3.19)$$

El desacoplamiento se realiza al despejar el término $ik_i q_i^K(k_j, \omega)$ de la ecuación (3.18), e insertando en la ecuación (3.19), después del desacoplamiento se recurre a la expresión para los flujos colisionales de transporte⁹, estas son:

$$P^I(x_i, t) = \left(\frac{1}{2} P^{0K} + n K_B T \delta_{ij}\right) \chi b \rho$$

y

$$q_i^I(x_i, t) = \frac{3}{4} \chi b \rho q_i^K.$$

En las que se colocan las expresiones obtenidas para $ik_i q_i^K(k_j, \omega)$ e $ik_i ik_i : P_{ij}^{0K}(k_i, \omega)$. i.e.

$$ik_i q_i^K(k_j, \omega) = \lambda(k_i, \omega) k^2 T(k_i, \omega) - \Gamma(k_i, \omega) k^2 T ik_i u_i(k_j, \omega) \quad (3.20)$$

y

$$ik_i ik_i : P_{ij}^{0K}(k_i, \omega) = nm\nu(k_i, \omega)k^2(ik_i u_i(k_j, \omega)) + \Gamma(k_i, \omega) \frac{k^4}{T} T(k_i, \omega) \quad (3.21)$$

Observamos que se tienen coeficientes $\lambda(k_i, \omega)$, $\nu(k_i, \omega)$, $\Gamma(k_i, \omega)$, llamados conductividad térmica generalizada, la componente longitudinal de la viscosidad cortante y el coeficiente de termotriscción respectivamente. Y se han deducido con la siguiente forma

$$\lambda(k_i, \omega) = \lambda_0 \frac{(\chi^{(3)})^2}{\chi} \left(1 - i\omega \frac{\tau_q^0}{\chi} + \frac{1}{2} \frac{K_B T}{m} \left(\frac{\chi^{(3)}}{\chi} \right)^2 \frac{\tau_p^0 \tau_q^0 k^2}{\left(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi} \right)} \right)^{-1}, \quad (3.22)$$

$$\nu(k_i, \omega) = \frac{\eta_0}{nm} \lambda_0 \frac{(\chi^{(2)})^2}{\chi} \left(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi} + \frac{1}{2} \frac{K_B T}{m} \left(\frac{\chi^{(3)}}{\chi} \right)^2 \frac{\tau_p^0 \tau_q^0 k^2}{\left(1 - i\omega \frac{\tau_q^0}{\chi} \right)} \right)^{-1} \quad (3.23)$$

y

$$\Gamma(k_i, \omega) = \frac{\chi^{(2)}}{\chi} \frac{\tau_q^0}{\left(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi} \right)} \lambda(k_i, \omega). \quad (3.24)$$

Con esta información que se sumará al uso de las ecuaciones de la Hidrodinámica, será posible encontrar la Matriz Hidrodinámica del sistema.

Solo para resaltar la importancia de los coeficientes generalizados, podemos observar que tanto el tensor de presión como el vector de flujo de calor totales pueden escribirse para un caso más general tal como lo propone Brilliantov y Thorsten²¹ en la forma:

$$P_{ij} = nT\delta_{ij} - \eta(k_i, \omega) \left(\frac{\partial x_i}{\partial v_j} + \frac{\partial x_j}{\partial v_i} - \delta_{ij} \frac{\partial x_i}{\partial v_j} \right) \quad (3.25)$$

y

$$q_i = -\lambda(k_i, \omega) \frac{\partial T}{\partial x_i} - \mu(k_i, \omega) \frac{\partial n}{\partial x_i}. \quad (3.26)$$

Notando que $\eta(k_i, \omega)$ es la viscosidad de bulto, y $\mu(k_i, \omega)$ es un coeficiente de transporte que

depende de la temperatura. Si bien estas dos últimas ecuaciones son deducidas para un gas bidimensional granular, el resultado bien puede reducirse haciendo las debidas consideraciones al caso de un gas bidimensional de discos rígidos.

3.2.2. Ecuaciones hidrodinámicas linealizadas

Podemos ahora escribir un conjunto completo linealizado de ecuaciones hidrodinámicas en términos de las variables relevantes del sistema y sus derivadas, recordando que estas son:

la *ecuación de densidad de número*

$$\frac{\partial n}{\partial t} + n \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = 0, \quad (3.27)$$

la *ecuación de ímpetu lineal*

$$nm \frac{\partial u_i}{\partial t} + nK_B \chi^{(4)} \frac{\partial T}{\partial t} + K_B T \left(\chi^{(8)} + \frac{\partial \chi}{\partial t} b n^2 \right) \frac{\partial n}{\partial x_i} + \chi^{(2)} \frac{\partial P_{ij}^{0K}}{\partial x_i} = 0 \quad (3.28)$$

y la *ecuación de temperatura cinética*

$$nK_B \frac{\partial T}{\partial t} + nK_B T \chi^{(4)} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \chi^{(3)} \frac{\partial q_j^K}{\partial x_i} = 0. \quad (3.29)$$

Deseamos transformar ahora estas ecuaciones diferenciales en un sistema de ecuaciones algebraicas.

3.2.3. Transformada de Laplace-Fourier

Ahora, para convertir las expresiones para las variables relevantes en ecuaciones algebraicas, se aplica la *Transformada de Laplace*, esta es una transformada integral¹⁵ de la forma:

$$\int_0^{\infty} e^{-st} F(t) dt, \quad (3.30)$$

por lo que la transformada de Laplace $f(s)$ de una función $F(t)$ se define por

$$f(s) = \mathfrak{L}[F(t)] = \int_0^{\infty} e^{-st} F(t) dt, \quad (3.31)$$

donde la integral infinita de $F(t)$; $\int_0^{\infty} F(t) dt$, no necesariamente existe. No obstante, si existen constantes s_0 , M y t_0 tal que para todo $t \geq t_0$, $|e^{-s_0 t} F(t)| \leq M$, la transformada de Laplace existirá para $s > s_0$.

Además, se observa que la transformada de Fourier para cierto rango del dominio de t ; $t \in (t_1, t_2)$, coincide con la transformada de Laplace:

$$\int_0^{\infty} e^{-st} F(t) dt = \frac{c}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt = g(\omega). \quad (3.32)$$

3.2.4. Ecuaciones algebraicas

Aplicando entonces Laplace-Fourier sobre la ecuación de densidad de número se obtiene

$$\mathfrak{L}\left[\frac{\partial n}{\partial t}\right] + \mathfrak{L}\left[n \frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right] = sn(\mathbf{t}) + n_0 \mathfrak{L}\left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right] = 0, \quad (3.33)$$

por lo que podemos usar los teoremas

$$\left[\frac{f(r_j)}{\partial x_i}\right]^T = -ik_i g(k_i) \quad \text{y} \quad [f'(t)]^T(\omega) = -i\omega g(\omega), \quad (3.34)$$

que al aplicarlos a la ecuación de densidad de número tomado solamente la componente longitudinal, esta se convierte en

$$\mathfrak{L}\left[\frac{\partial n}{\partial t}\right] + \mathfrak{L}\left[n \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right] = sn(\mathbf{t}) + n_0 + n(k_i, \omega) \mathfrak{L}\left[\frac{\partial u_i n}{\partial x_j}\right] = 0, \quad (3.35)$$

por lo que en el espacio k_i, ω , la ecuación de densidad de número se expresa como

$$-i\omega n + n_0 - n(k_i, \omega) ik_i u_i = 0. \quad (3.36)$$

Proyectando en dirección de propagación es decir por ik_i , aporta ecuación

$$-i\omega n - nik_i u_i = 0. \quad (3.37)$$

Para la ecuación de impetu lineal, aplicando Laplace

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}\left[nm\frac{\partial u_i}{\partial t} + K_B T \left(\chi^{(8)} + \frac{\partial \chi}{\partial t} bn^2\right) \frac{n}{\partial x_i}\right. \\ \left. + nK_B \chi^{(4)} \frac{n}{\partial x_i} + \chi^{(2)} \frac{P_{ij}^{0K}}{\partial x_i}\right] = 0, \end{aligned} \quad (3.38)$$

tomando en cuenta solo la dirección logitudinal

$$\begin{aligned} nm(su_i + (u_i)_0) + nK_B \chi^{(4)} \mathfrak{L} \frac{\partial T}{\partial x} + \chi^{(2)} \mathfrak{L} \frac{\partial P_{ij}^{0K}}{\partial x_i} + \\ K_B T \left(\chi^{(8)} + \frac{\chi}{\partial t} bn^2\right) \mathfrak{L} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = 0, \end{aligned} \quad (3.39)$$

entonces

$$nm(-i\omega)u_i + nK_B \chi^{(4)}(-ik_i)T + K_B T(-ik_i)n + \chi^{(2)}(-ik_i)P^{0K} = 0, \quad (3.40)$$

proyectamos ahora en la dirección $-ik_i$ para obtener la componente longitudinal de la ecuación (3.40), y tenemos

$$\begin{aligned} nmk_i^2(-i\omega)u_i(k_i, \omega) + nK_B \chi^{(4)}k_i^2 ik_i T(k_i, \omega) \\ + K_B T k_i^2(-ik_i)n + \chi^{(2)}(-ik_i)P_{ij}^{0K} = 0. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Para la ecuación de temperatura cinética, aplicando Laplace-Fourier

$$\mathfrak{L}\left[nK_B \frac{\partial T}{\partial t} + nK_B T \chi^{(4)} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \chi^{(3)} \frac{\partial q_j^k}{\partial x_i}\right] = 0, \quad (3.42)$$

tomando en cuenta solamente la componente longitudinal de la ecuación

$$\mathfrak{L}\left[nK_B \frac{\partial T}{\partial t} + nK_B T \chi^{(4)} \frac{\partial u_i}{\partial x} + \chi^{(3)} \frac{\partial q_i^k}{\partial x}\right] = 0, \quad (3.43)$$

entonces

$$nK_B(-i\omega)T(k_i, \omega) + T_0 + nK_B T \chi^{(4)}(-ik_i)u_i + \chi^{(3)}(-ik_i)q_i^k = 0. \quad (3.44)$$

Debemos notar que en las ecuaciones (3.37), (3.41) y (3.44) hemos omitido los valores iniciales: n_0 , u_{i0} y T_0 . Esto debido a que estarán presentes en una de las formas en que podemos expresar la matriz hidrodinámica.

Ahora, utilizando los valores obtenidos en la sección anterior para $ik_i q_i(k_i, \omega)$ e $ik_i ik_i : P_{ij}^{0K}$, insertándolos en la ecuación algebraica de la temperatura cinética y con un mínimo de manipulación algebraica para las ecuaciones (3.37), (3.41) y (3.44) podemos presentarlas en la forma

$$-i\omega n^* = -\left(\frac{\chi^P}{\alpha}\right)^{1/2} iku_l^*, \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned} -i\omega u_l^* &= -\left(\frac{\chi^P}{\alpha}\right)^{1/2} ikn^* - \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{1/2} \chi^{(4)} ikT^* \\ -\nu_l k^2 u_l^* + \Gamma \frac{1}{K_B T n} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{1/2} ik^3 T^*, \end{aligned} \quad (3.46)$$

$$-i\omega T_l^* = -\chi^{(4)} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{1/2} iku_l^* - \lambda k^2 \frac{1}{K_B n} T^* + \Gamma \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{1/2} \frac{ik^3}{K_B T n}. \quad (3.47)$$

3.2.5. Matriz Hidrodinámica

Notamos que lo que hemos hecho hasta ahora no es sino aplicar la transformación de *Laplace-Fourier* al conjunto de ecuaciones diferenciales hidrodinámicas linealizadas, es decir en notación de transformaciones lineales, podemos escribir a esta operación como

$$-i\omega \mathbf{A}_i = \mathbf{L}_{ij} \mathbf{A}_j, \quad (3.48)$$

siendo

$$\mathbf{L}_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -ik \left(\frac{\chi^P}{\alpha} \right)^{1/2} & 0 \\ -ik \left(\frac{\chi^P}{\alpha} \right)^{1/2} & -\nu_l k^2 & -\left(\frac{1}{\alpha} \right) \frac{\chi^{(4)} ik + \Gamma}{K_B T n} ik^3 \\ 0 & -\left(\frac{1}{\alpha} \right) \left(\frac{\chi^{(4)} ik + \Gamma}{K_B T n} \right)^{1/2} ik^3 & \frac{-\lambda k^2}{K_B n} \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

Es decir $\mathbf{L}_{ij} = \mathbf{L}_{ij}(\mathbf{k}, \omega)$, pero podemos expresar operacionalmente la dependencia en los coeficientes de transporte generalizados en la forma

$$\mathbf{L}_{ij}(\mathbf{k}, \omega) = i\Omega_{ij}(\mathbf{k}) - H_{ij}(\mathbf{k}, \omega), \quad (3.50)$$

o matricialmente como,

$$\Omega_{ij}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & -ik \left(\frac{\chi^P}{\alpha} \right)^{1/2} k & 0 \\ -\left(\frac{\chi^P}{\alpha} \right)^{1/2} k & 0 & -\left(\frac{1}{\alpha} \right)^{1/2} \chi^{(4)} ik \\ 0 & -\left(\frac{1}{\alpha} \right)^{1/2} \chi^{(4)} ik & 0 \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

y

$$H_{ij}(\mathbf{k}, \omega) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \nu_l k^2 & -\Gamma \frac{1}{K_B T n} \left(\frac{1}{\alpha} \right)^{1/2} ik^3 \\ 0 & -\Gamma \frac{1}{K_B T n} \left(\frac{1}{\alpha} \right)^{1/2} ik^3 & \lambda k^2 \frac{1}{K_B n} \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Podemos escribir también la matriz hidrodinámica en forma extendida tomando en consideración $z = -i\omega$, siendo

$$\mathbf{A}^T = [n^*, u_l^*, T^*](k, z), \quad (3.53)$$

$$\mathbf{A}_0^T = [n^*, u_l^*, T^*](k, 0), \quad (3.54)$$

o en forma completa

$$\mathbf{H}(k, z)\mathbf{A}(k, z) = \mathbf{A}(k, 0), \quad (3.55)$$

donde,

$$\mathbf{H}(k, z) = \begin{pmatrix} z & -ik \left(\frac{\chi^P}{\alpha} \right)^{1/2} & 0 \\ -ik \left(\frac{\chi^P}{\alpha} \right)^{1/2} & z - \nu_l k^2 & -\left(\frac{1}{\alpha} \right) \frac{\chi^{(4)} ik + \Gamma}{K_B T n} ik^3 \\ 0 & -\left(\frac{1}{\alpha} \right) \frac{\chi^{(4)} ik + \Gamma}{K_B T n} ik^3 & \frac{z - \lambda k^2}{K_B n} \end{pmatrix}. \quad (3.56)$$

Siendo los valores de z los posibles *modos hidrodinámicos*. El siguiente capítulo tratará del cálculo explícito de los modos hidrodinámicos.

Capítulo 4

Modos Normales del gas denso de discos rígidos

Los modos normales de un sistema oscilante son patrones de movimiento para los cuales todas las partes del sistema se mueven sinusoidalmente con la misma frecuencia, con una relación con la fase dada. El movimiento libre descrito por los modos normales toma lugar a frecuencias dadas. Estas frecuencias son conocidas como *frecuencias naturales* o *frecuencias resonantes*. En este caso nos referiremos a los modos normales o modos hidrodinámicos de nuestro gas denso de discos rígidos.

4.1. Dispersión de luz o neutrones

La dispersión de la luz es el fenómeno por el cual distintas longitudes de onda se refractan con ángulos distintos al atravesar medios materiales. Sabemos que la velocidad de la luz en el vacío es constante e independiente de su longitud de onda, sin embargo, su velocidad en cualquier otro medio distinto al vacío depende de la longitud de onda que tenga. Esta dependencia se debe a las estructuras moleculares de los materiales y es la responsable de que, en última instancia, el índice de refracción dependa de la longitud de onda.

Por otro lado, la dispersión inelástica de neutrones es una técnica espectroscópica que utiliza neutrones en lugar de fotones. Se usa en investigación de materia condensada para estudiar movimiento atómico y molecular, así como excitaciones magnéticas y de campo cristalino, aprovechando el hecho de que los neutrones tienen espín. Se distingue de otras técnicas de dispersión de neutrones porque estudia la interacción inelástica entre los neutrones y la muestra, esto es, resuelve no sólo el cambio de energía asociado a ω , sino también el vector de

dispersión k como la diferencia entre el vector de ondas entrante y el saliente. Ambas formas de dispersión son utilizadas en hidrodinámica molecular.

4.1.1. Rango de empleo

Los métodos experimentales de dispersión de luz y neutrones¹, como el de la figura 4.1, son los que proveen una medición directa de la función de correlación de densidad, y prueban regiones muy diferentes de número de onda y frecuencia, tal que los resultados generalmente muestran comportamientos distintos. Hablando en forma muy general, la dispersión de luz prueba la región pequeña de k_i, ω donde las ecuaciones de la hidrodinámica son válidas, mientras que la dispersión de neutrones prueba la región finita de k_i, ω donde los efectos de la dinámica molecular deben ser considerados. También, la simulación computacional puede ser usada para estudiar la región finita.

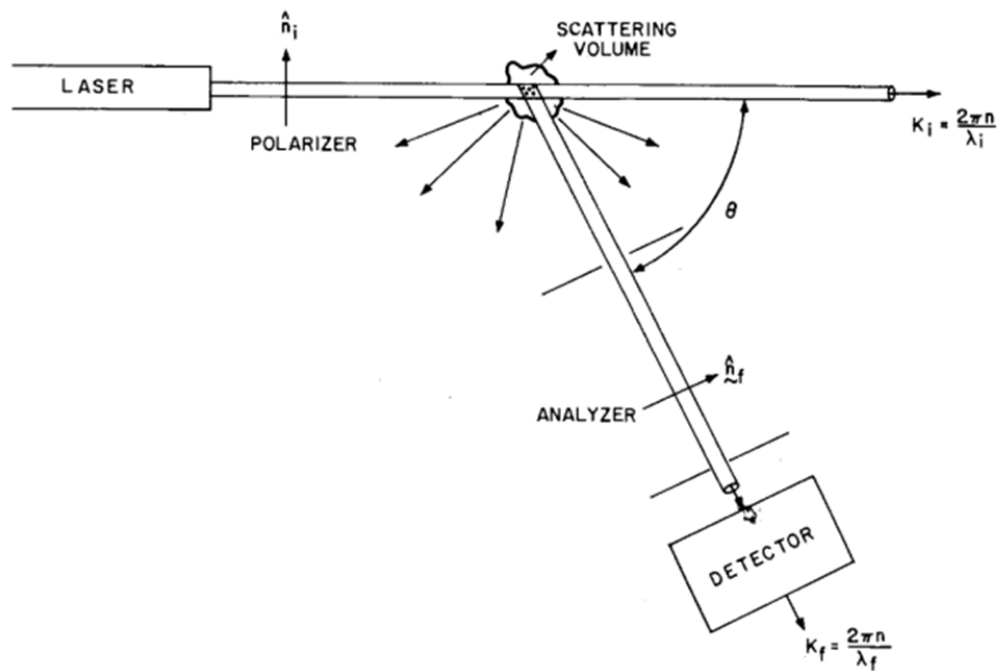


Figura 4.1: Dispersión de luz. La longitud de onda es aquella asociada con la transferencia de momento en la dispersión y en este caso está dado por $\lambda = \lambda_0/2\text{sen}(\theta/2)$. (Figura tomada de internet).

En los experimentos de dispersión observamos que las variables relevantes k y ω , no son el número de onda y frecuencia de la radiación incidente, sino más bien, el número de onda y la frecuencia son transferidos en el proceso de dispersión. Denotamos la energía y el vector de onda de la radiación como E_0 y k_s . Las cantidades que nos interesan son la intensidad

dispersada, la frecuencia y número de onda transferidos: $\omega = (E_0 - E_s)\hbar^{-1}$ y $k = |k_{i0} - k_{is}|$, siendo $\lambda = 2\pi/k$. El mejoramiento durante decadas pasadas de los láseres y el desarrollo de espectroscopía de alta resolución han hecho a la dispersión de luz una herramienta de alta precisión para medir fluctuaciones de densidad. Las propiedades dinámicas que pueden ser extraídas de una medición de dispersión de luz dependen del cociente entre la longitud de onda característica de la condición de dispersión y el camino libre medio entre colisiones en el fluido. La longitud de onda es aquella asociada con la transferencia de momento en la dispersión y en este caso está dado por $\lambda = \lambda_0/2\text{sen}(\theta/2)$, siendo λ_0 es la longitud de onda del laser y θ el ángulo de dispersión, el ángulo entre el haz incidente y el dispersado. Lo precedente indica que lambda específica la longitud de onda de las fluctuaciones de densidad siendo medidas. Para un laser de Helio-Neón (6328 Å) λ puede variar desde 36000 Å a 3200 Å, que corresponde a: 10° de radiación entrante y 170° de radiación saliente respectivamente.

4.2. Ecuación secular y polinomio característico

Hemos expresado en una forma muy conveniente a las ecuaciones de la Hidrodinámica, es decir en la forma de la matriz hidrodinámica¹⁴. Ahora podemos emplearla para hallar los modos hidrodinámicos, esto se hace a partir de calcular el determinante de la ecuación secular de nuestra matriz y de una comparación con el polinomio característico que también se obtiene del determinante, entonces operamos de la siguiente forma:

Empleando la forma completa

$$\mathbf{H}(k, z)\mathbf{A}(k, z) = \mathbf{A}(k, 0), \quad (4.1)$$

siendo la forma matricial de $\mathbf{H}(k, z)\mathbf{A}(k, z)$;

$$\mathbf{H}(k, z) = \begin{pmatrix} z & -ik \left(\frac{\chi^P}{\alpha}\right)^{1/2} & 0 \\ -ik \left(\frac{\chi^P}{\alpha}\right)^{1/2} & z - \nu_l k^2 & -\left(\frac{1}{\alpha}\right) \frac{\chi^{(4)}ik + \Gamma}{K_B T n} ik^3 \\ 0 & -\left(\frac{1}{\alpha}\right) \frac{\chi^{(4)}ik + \Gamma}{K_B T n} ik^3 & \frac{z - \lambda k^2}{K_B n} \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

donde los valores de z son los posibles *modos hidrodinámicos*, observamos que

$$\det(\mathbf{H}(k, z)) = \begin{vmatrix} z & -ik \left(\frac{\chi^P}{\alpha} \right)^{1/2} & 0 \\ -ik \left(\frac{\chi^P}{\alpha} \right)^{1/2} & z - \nu_l k^2 & - \left(\frac{1}{\alpha} \right) \frac{\chi^{(4)} ik + \Gamma}{K_B T n} ik^3 \\ 0 & - \left(\frac{1}{\alpha} \right) \frac{\chi^{(4)} ik + \Gamma}{K_B T n} ik^3 & \frac{z - \lambda k^2}{K_B n} \end{vmatrix}. \quad (4.3)$$

Si desarrollamos la expresión anterior, llamando $c_0 = (1/\alpha)^{1/2}$, colocado explícitamente los valores de los coeficientes generalizados $\lambda(k_i, \omega)$, $\nu(k_i, \omega)$ y $\Gamma(k_i, \omega)$ en esta expresión y despreciando los términos para potencias de k mayores a 5, podemos expresar al $\det(\mathbf{H}(k, z))$ como

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{H}(k, z)) = & z^5 \tau_p \tau_q + z^4 (\tau_p + \tau_q) + \\ & z^3 \left[\frac{(\chi^{(3)})^2}{\chi} \tau_p \left(\frac{\chi}{2\alpha} \tau_q k^2 - \frac{k^2}{n K_B} \lambda_0 - \frac{k^2 \eta_0}{nm} \right) + k^2 \chi^{(P)} c_0^2 \tau_p \tau_q + 1 \right] + \\ & z^2 \left[k^2 \chi^{(P)} c_0^2 \tau_p + k^2 \chi^{(P)} c_0^2 \tau_q \frac{1}{n K_B} \lambda_0 \frac{(\chi^{(3)})^2}{\chi} - \frac{\eta_0}{nm} \frac{(\chi^{(2)})^2}{\chi} k^2 \right] + \\ & z \left[k^2 c_0^2 - 2c_0 k^4 \frac{\chi^{(4)}}{n K_B T} \lambda_0 \frac{(\chi^{(3)})^2}{\chi} \right] \\ & z \left[k^2 \chi^{(P)} c_0^2 \left(\frac{(\chi^{(3)})^2}{2\alpha} \tau_p \tau_q k^2 - \frac{k^2}{n K_B} \lambda_0 \frac{(\chi^{(3)})^2}{\chi} + 1 \right) \right] \\ & - \frac{k^4}{n K_B} \chi^{(P)} c_0^2 \lambda_0 \frac{(\chi^{(3)})^2}{\chi}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Esta expresión la habremos de comparar con el polinomio característico del determinante (Ecuación (4.3)). Ahora, debemos suponer que cada raíz puede expandirse en forma polinomial en términos de k es decir

$$\begin{aligned} z_i = & z_i^{(0)} + z_i^{(1)} ik + z_i^{(2)} ik^2 + \dots \\ & i = \overline{1, 5}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Así, comparando los coeficientes del determinante con los coeficientes del polinomio carac-

terístico y localizando los términos dentro de los coeficientes que son multiplicados por k^0 , k^1 , k^2 , etc., podemos nuevamente comparar los coeficientes del polinomio característico con los términos de la serie (ecuación (4.5)) y se obtiene una ecuación para cada potencia de k , de tal forma que obtenemos un sistema de ecuaciones tal que, al resolverlo, obtenemos las raíces o modos normales en la forma:

$$z_1 = ic'_0\sqrt{\alpha_s}k - \Gamma'_0k^2, \quad (4.6)$$

$$z_2 = -ic'_0\sqrt{\alpha_s}k - \Gamma'_0k^2, \quad (4.7)$$

$$z_3 = -\frac{2}{3}\frac{\lambda'_0}{nK_B}\frac{\chi^{(P)}}{\alpha_s}k^2, \quad (4.8)$$

$$z_4 = -\frac{1}{\tau_p} + \frac{2}{3}\frac{\lambda'_0}{nK_B}\frac{\chi^{(P)}}{\alpha_s}k^2, \quad (4.9)$$

$$z_5 = -\frac{1}{\tau_q} + \frac{2}{3}\frac{\lambda'_0}{nK_B}k^2. \quad (4.10)$$

Siendo $c_0^2 = \frac{K_B T}{m}$, $\chi(k, z)^p = \frac{2}{3}\frac{\lambda(k, z)}{nm}$, $\alpha_s = [(\chi^{(4)})^2 + \chi^{(P)}]c_0^2$, $\chi^{(\nu)} = [1 + \frac{1}{4}\chi bn]$, con $\nu = 1, 2, 3, \dots$, $\chi^{(\rho)} = [1 + 2\chi bn + \frac{\partial\chi}{\partial n}bn^2]$ y $\Gamma_0 = \frac{T}{4\chi^{(4)}}\chi^{(2)}(\chi^{(3)})^2\tau_q\lambda_0$, con $\lambda_0 = \frac{2}{a}\left(\frac{K_B^3 T}{m\pi}\right)^{1/2}$.

Notando solamente, que en cada caso se ha adimensionalizado.

4.2.1. Otros métodos para el cálculo de los modos colectivos

El procedimiento que hemos empleado para calcular los modos colectivos hidrodinámicos no es único. Por ejemplo, para el caso de líquidos, Bonn y Jip¹ exponen que a partir de la ecuación de continuidad que expresa la conservación de la masa, la ecuación de fuerza que expresa la conservación de momento y la ecuación de intercambio de calor que expresa la conservación de energía, junto con un análisis termodinámico donde se toman en cuenta las pequeñas variaciones que sufren las variables termodinámicas desviándose del equilibrio, es posible llegar a un conjunto de ecuaciones hidrodinámicas linealizadas tales que, al igual que en el caso anterior, es posible hallar los modos colectivos normales a partir de estas. El

procedi-miento es como se relata a continuación.

Tomando las ecuaciones mencionadas en el parrafo anterior, si nuestro sistema puede ser descrito por una ecuación de estado que involucre a ρ y T , entonces dichas ecuaciones pueden escribirse como:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_i) = 0, \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}v_i + \gamma^{-1}c^2(\rho^{-1}\frac{\partial}{\partial x_i}\rho + \alpha\frac{\partial}{\partial x_i}T) - \nu_1\frac{\partial^2}{\partial x^i x_j}v_i \\ - \nu_1\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial}{\partial x_j}v_i\right) - \nu_2\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial}{\partial x_j}v_i\right) = 0, \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T + v_i\frac{\partial}{\partial x_j}T + \alpha^{-1}(\gamma - 1)\frac{\partial}{\partial x_j}v_i - (\rho C_v)^{-1}\left(\kappa\frac{\partial^2}{\partial x_i x_j}T + \phi_\eta\right) = 0, \quad (4.13)$$

y tomando en cuenta la importante suposición de la existencia de *fluctuaciones*, es decir, que tras pequeñas perturbaciones las variables de estado ρ , T y la velocidad v_i sufren pequeñas desviaciones con respecto a su estado de equilibrio, matemáticamente:

$$\delta\rho = \rho - \rho_0, \quad \delta T = T - T_0, \quad \delta v_i = v_i, \quad (4.14)$$

siendo las variables con subíndice cero las que denotan el estado de equilibrio. Ahora, aplicando una doble transformada de Fourier para las ecuaciones hidrodinámicas, estas toman la siguiente forma:

$$[s + (\gamma - 1)\chi k^2]\delta\tilde{p}_k(s) + c^2\tilde{w}_k(s) +$$

$$\rho_0\alpha^{-1}(\gamma - 1)\chi\delta\tilde{s}_k(s) = \delta\tilde{p}_k(0), \quad (4.15)$$

$$[s + (\nu_1 k^2 - 1)]\tilde{w}_k(s) - k^2\tilde{p}_k(s) = \tilde{w}_k(0), \quad (4.16)$$

$$[s + \chi k^2]\delta\tilde{s}_k(s) + \rho_0\alpha^{-1}\chi k^2\delta\tilde{p}_k(s) = \tilde{s}_k(0), \quad (4.17)$$

$$[s + \nu_1 k^2]\tilde{\mu}_{1,k}(s) = \tilde{\mu}_{1,k}(0), \quad (4.18)$$

$$[s + \nu_l k^2] \tilde{\mu}_{2,k}(s) = \tilde{\mu}_{2,k}(0). \quad (4.19)$$

Con estas ecuaciones es posible realizar el análisis de los modos normales, ya que solo requerimos calcular el determinante de las ecuaciones (4.15) a (4.19), i.e.,

$$\begin{vmatrix} [s + (\gamma - 1)\chi k^2] & c^2 & \rho_0 \alpha^{-1} (\gamma - 1)\chi & 0 & 0 \\ -k^2 & [s + (\nu_l k^2)] & 0 & 0 & 0 \\ \rho_0 \alpha^{-1} \chi k^2 & 0 & [s + (\gamma - 1)\chi k^2] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & [s + \nu k^2] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & [s + \nu k^2] \end{vmatrix} = 0, \quad (4.20)$$

siendo el término $\nu_l = \left(\frac{4}{3}\eta + \eta_B\right) \rho_0^{-1}$ la llamada viscosidad longitudinal. Luego, las raíces solución para este determinante son

$$z_1 = -\nu k^2 \quad (4.21)$$

$$z_2 = -\nu k^2 \quad (4.22)$$

$$z_3 = -\chi k^2, \quad (4.23)$$

$$s_4 = +ick - \Gamma k^2, \quad (4.24)$$

$$z_5 = -ick - \Gamma k^2, \quad (4.25)$$

siendo $\Gamma = 1/2[\nu_l + (\gamma - 1)\chi]$.

Las primeras dos raíces corresponden a modos de corte transversos, mientras que las tres siguientes raíces corresponden a modos longitudinales.

De manera análoga a como lo expone Bon y Jip¹, pero para un gas granular, es decir, un gas

de esferas no ideales o rugosas, Brilliantov y Thorsten²¹ partieron de las ecuaciones hidrodinámicas en el espacio del tiempo de colisión en la forma:

$$\frac{\partial \rho(k_i)}{\partial \tau} = -ik_i \cdot v_j(k_i), \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial v_i(k_j)}{\partial \tau} = \frac{1}{4}\zeta^* v_i(k_j) - \frac{1}{2} - ik_i(\rho(k_i) + T(k_i)) - \eta^* \left[k^2 v_i(k_j) + \frac{1}{3} k_i \cdot v_j(k_i) \right], \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial v_i(k_j)}{\partial \tau} = -\frac{1}{4}\zeta^*(\rho(k_i) + 2T(k_i)) - \frac{5}{2}k^2(\kappa^* \rho(k_i) + \mu^* T(k_i)) - \frac{2}{3}(ik_i \cdot v_j(k_i)). \quad (4.28)$$

Estas ecuaciones dependen del tiempo adimensional y de las coordenadas espaciales, además, estas ecuaciones pueden ser escritas en forma matricial como

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \mathbf{M}\psi. \quad (4.29)$$

El vector de cinco componentes ψ contiene a $\rho(k_i)$, $T(k_i)$ y las tres componentes del vector v_j . Las ecuaciones (4.15) a (4.19) para $\rho(k_i)$, $T(k_i)$ y v_j están acopladas. Los eigenvectores de la matriz \mathbf{M} de 5x5, están definidos por

$$\mathbf{M}_l \psi_l = \lambda_l(k_i) \psi_l, \quad (4.30)$$

$$l = \overline{1, 5},$$

de tal forma que, estos vectores son los *modos hidrodinámicos*.

En este punto es interesante poder acrecentar un poco más nuestro entendimiento sobre dispersión de luz en un gas denso, así como de las variaciones en las variables hidrodinámicas con el estudio de Dilcléa Dobrowolski, et al.¹³, ya que ahí se determina el espectro de dispersión de luz en un gas denso monoatómico a partir de un modelo cinético de la ecuación de Enskog, en donde la función de distribución de referencia es una función de los gradientes de la velocidad y la temperatura.

Retornando a nuestro cálculo de los modos colectivos de la sección 4.2, y a partir de éstos modos, es importante formar un análisis visual, mediante gráficas de los modos hidrodinámicos.

4.2.2. Análisis gráfico de los modos hidrodinámicos

Elegimos gas de oxígeno atómico para obtener sus modos normales de oscilación. Suponemos una temperatura ambiente de 300° Kelvin, y graficamos las raíces para este gas, es decir, se grafica número de onda k vs *modos hidrodinámicos*, además, la gráfica para cada modo será denotada con un color diferente. Observando que el oxígeno tiene las propiedades que se muestran en el cuadro 4.1.

Cuadro 4.1: Propiedades físicas del oxígeno

Número atómico	peso molecular (umas)	radio atómico (\AA)	densidad (kg/m^3)
8	15.9994	0.6	1.4290

Con esta información, graficamos el número de onda k vs *modos hidrodinámicos*, tomando k en el intervalo $[0, 1]$ y variando la densidad del sistema. Hay que observar que la densidad debe variarse desde el caso del gas diluido hasta el caso del gas denso. Tomando los valores $nb = 0.2, 0.6$ y 1 , obtenemos las siguientes 6 gráficas:

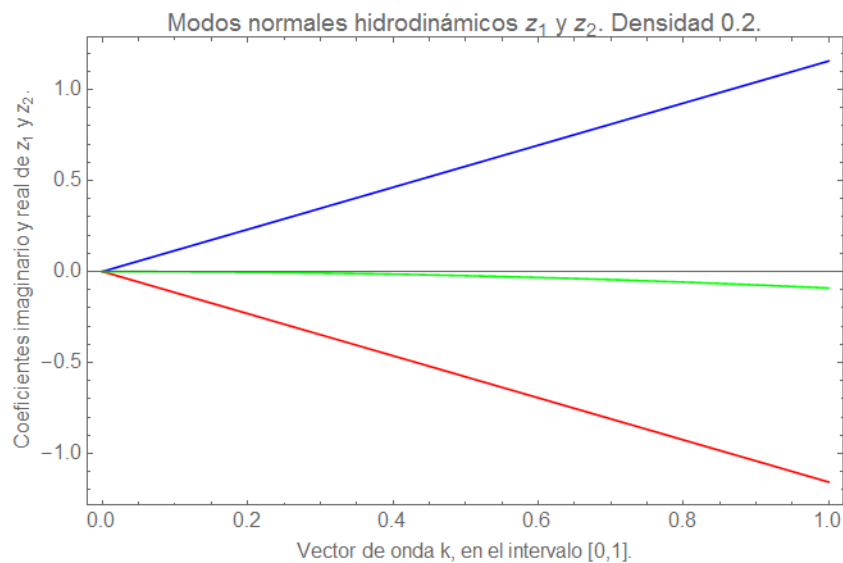


Figura 4.2: Modos primero y segundo; vector de onda k vs. z_1 y z_2 . $nb = 0.2$.

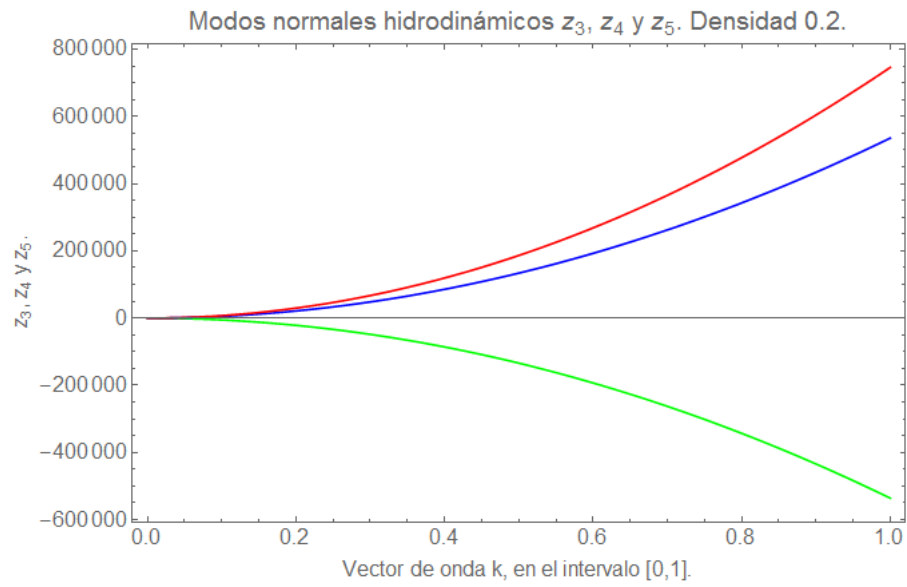


Figura 4.3: Modos tercero, cuarto y quinto; vector de onda k vs. z_3, z_4 y z_5 . $nb = 0.2$.

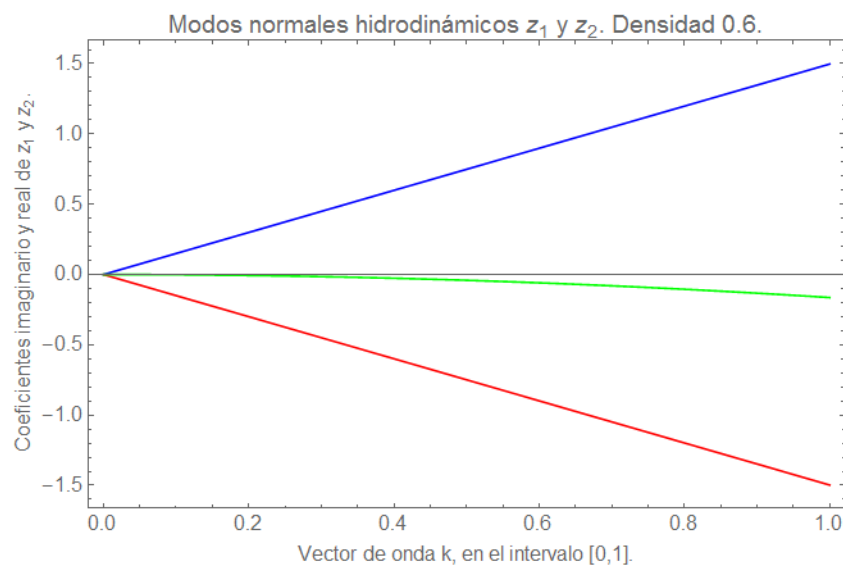


Figura 4.4: Modos primero y segundo; vector de onda k vs. z_1 y z_2 . $nb = 0.6$.

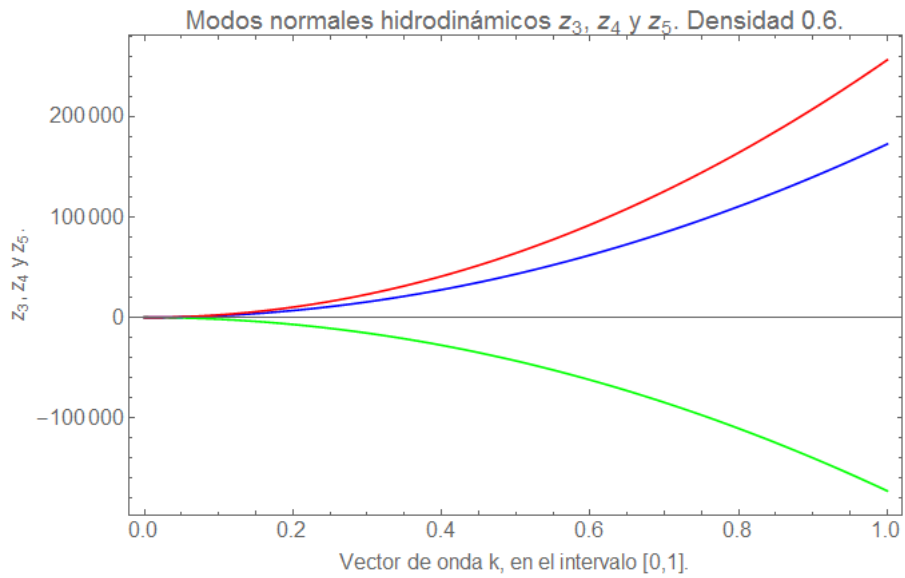


Figura 4.5: Modos tercero, cuarto y quinto; vector de onda k vs. z_3, z_4 y z_5 . $nb = 0.6$.

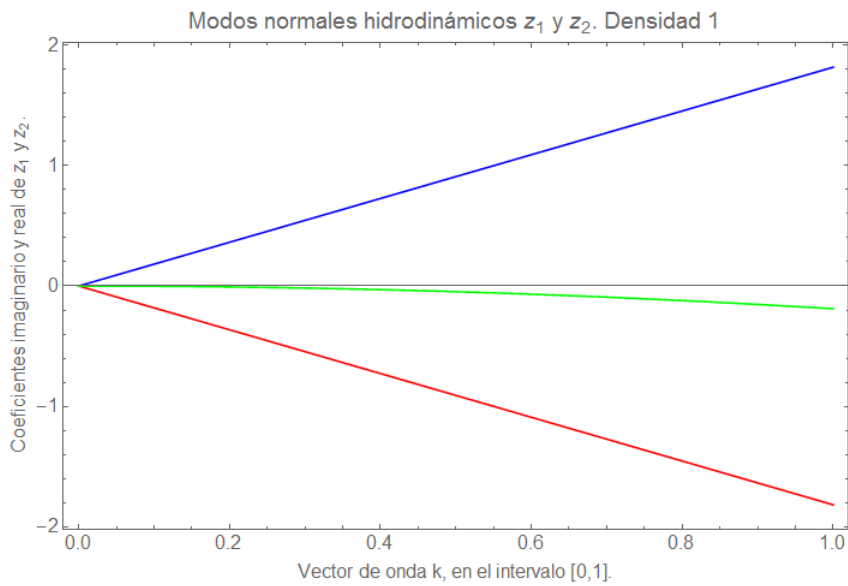


Figura 4.6: Modos primero y segundo; vector de onda k vs. z_1 y z_2 . $nb = 1$.

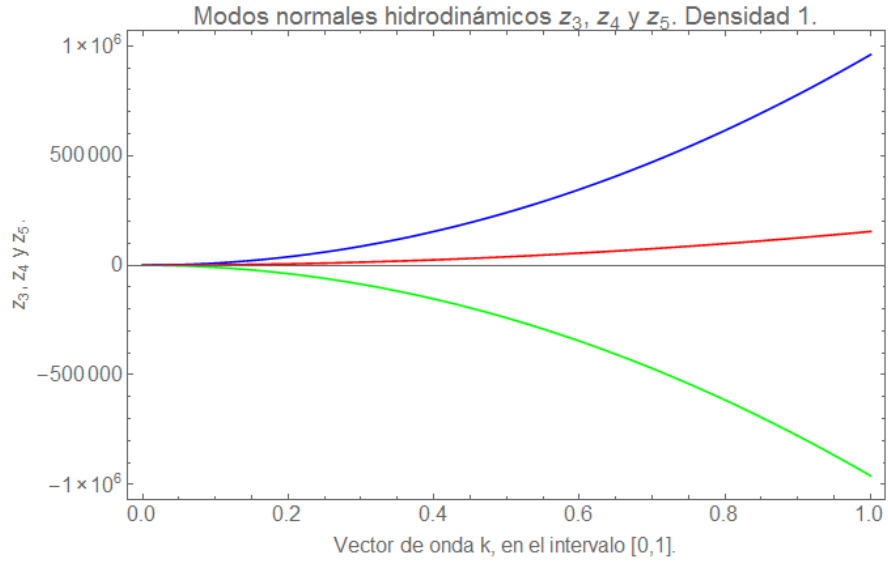


Figura 4.7: Modos tercero, cuarto y quinto; vector de onda k vs. z_3 , z_4 y z_5 . 1.

4.2.3. Valoración física de las gráficas

En cada caso graficamos los modos hidrodinámicos en dos partes, en el primer caso: Figuras 4.2, 4.4 y 4.6, graficamos el número de onda k vs *modos hidrodinámicos*, tomando k en el intervalo $[0, 1]$ y las raíces en el intervalo $[-1.5, 1.5]$ el caso corresponde a las dos primeras raíces, donde se observan la recta para la parte imaginaria de la primera raíz z_1 en color azul, la curva para la parte real de la primera y segunda raíces en color verde, la recta para la parte imaginaria de la segunda raíz en color rojo. En el segundo caso: Figuras 4.3, 4.5 y 4.7, graficamos número de onda k vs *modos hidrodinámicos*, tomando k en el intervalo $[0, 1]$ y las raíces en el intervalo $[-12, 0] \cup [0, 8 \times 10^5]$, $[-4, 0] \cup [0, 3 \times 10^5]$ y $[-2, 0] \cup [0, 2 \times 10^5]$. La gráfica corresponde a las raíces tercera, cuarta y quinta donde se observan la curva para la tercera raíz en color azul, curva para la cuarta raíz en color verde y la curva para la quinta raíz en color rojo.

Podemos observar que en cada caso y para valores muy cercanos a cero del vector de onda, todas las curvas se encuentran cercanas. Físicamente estamos observando que para valores muy grandes de la amplitud de onda λ o valores no muy grandes de la frecuencia ω se observa que nuestro sistema de gas denso oscila de manera ligeramente similar para cada modo colectivo, no obstante, el comportamiento de cada modo es bien diferenciado de los otros modos incluso a frecuencias bajas. En el mismo sentido para frecuencias altas, i.e., valores grandes del vector de onda, observamos que los modos divergen mucho unos de otros. Por lo que, podemos concluir que entre más energía entregada al sistema en forma de radiación de luz o neutrones, los modos colectivos difieren mucho unos de otros, por lo que esta teoría es confiable al diferenciar

claramente la forma de oscilación general del sistema. Evidentemente y como ejemplo, al calcular la energía por fotón para un valor del vector de onda $k = 0.5$, obtenemos una energía $E = 1.5807 \times 10^{-29} J$, en ese caso ya es muy clara la diferencia de comportamientos de los modos normales, más aún, los modos divergen rápidamente conforme aumenta la frecuencia que, en la escala en la que se presentan las gráficas los modos tercero a quinto se puede observar un comportamiento no lineal.

4.3. Tiempos de relajación

Otras variables importantes tanto por la información física que nos aportan como por que están presentes en los coeficientes de los modos colectivos normales son: el tiempo de relajación asociado al tensor de presión τ_p , y el tiempo de relajación asociado a el flujo de calor τ_q . Estos nos dicen físicamente el tiempo que le toma a nuestro sistema tras una perturbación, para volver al estado de equilibrio estable. Observamos graficamente que se comportan en la siguiente forma.

Para los tiempos de relajación en el equilibrio tenemos; el tiempo de relajación asociado al flujo de calor τ_q^0 y el tiempo de relajación asociado al tensor de presión τ_p^0 con comportamientos que son dependientes del inverso de la densidad nb , como se puede observar en la figura 4.8:

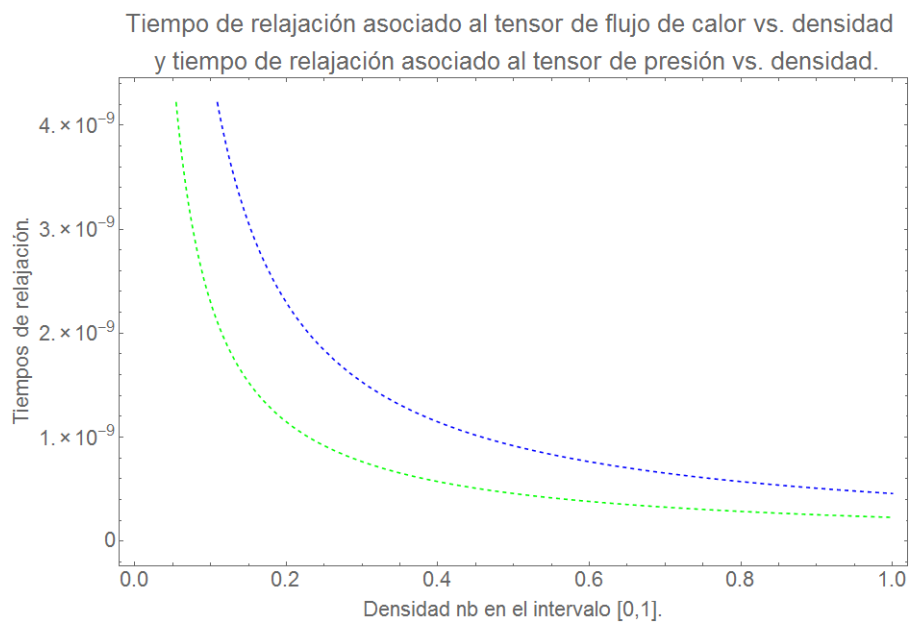


Figura 4.8: Tiempo de relajación en el equilibrio asociado al flujo de calor τ_q^0 vs. densidad nb en azul, y tiempo de relajación en el equilibrio asociado al tensor de presión τ_p^0 vs. densidad nb en verde. Tiempos de relajación dados en segundos, densidad nb en el intervalo $[0,1]$.

Se observa que el tiempo de relajación asociado al tensor de presión es más corto que el tiempo de relajación asociado a el flujo de calor, siendo en ambos casos su orden de magnitud de 10^{-10} segundos. Al igual que en las gráficas para los modos normales, hemos tomado un rango para la densidad nb en $[0, 1]$.

4.3.1. τ_q y τ_p

Para los tiempos de relajación que han de darse después de una perturbación externa a nuestro sistema, adimensionalizamos ya que este es un comportamiento aún más general que comprende a los tiempos de relajación en el equilibrio. Así, el tiempo de relajación asociado al flujo de calor $\tau_q = \tau_q^0/\chi$ y el tiempo de relajación asociado al tensor de presión $\tau_p = \tau_p^0/\chi$, cuyos comportamientos son dependientes del inverso del factor de densidad y del inverso de la densidad, χn , se muestran en la figura 4.9.

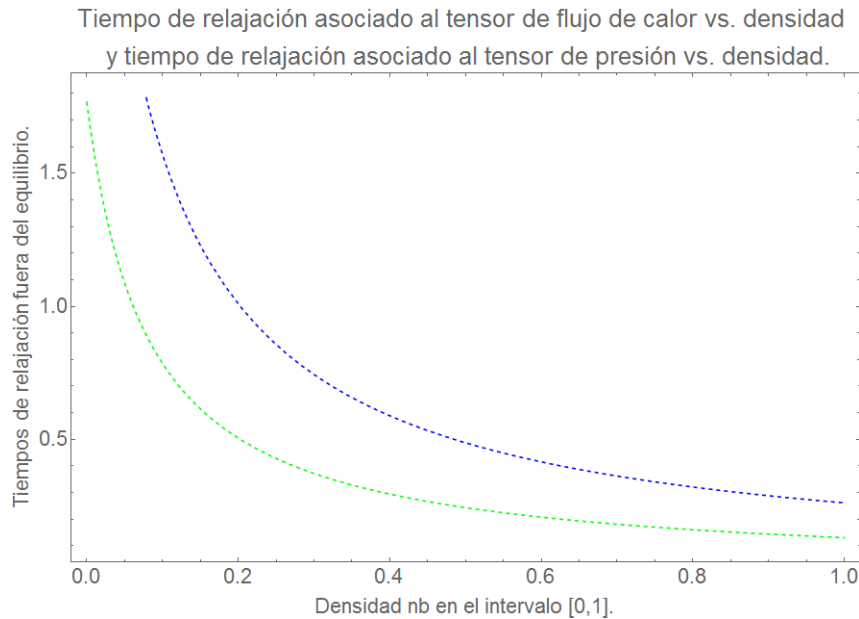


Figura 4.9: Tiempo de relajación asociado al flujo de calor τ_q vs. densidad nb en azul, y tiempo de relajación asociado al tensor de presión τ_p vs. densidad nb en verde. Densidad nb en el intervalo $[0,1]$.

Claramente se observa que el tiempo de relajación asociado al tensor de presión es más corto que el tiempo de relajación asociado a el flujo de calor, no obstante, ambos decaen con respecto a $1/\chi n$, tendiendo ambas curvas a cero para valores de densidad grandes. Físicamente esto demuestra como se espera, la validez de las leyes de la termodinámica ya que está presente el fenómeno de disipación.

4.3.2. Resultados alternativos para el cálculo de los tiempos de relajación

En otros trabajos como el realizado por Cukrowski et al¹⁷. Que muestra como resultado, entre algunos otros, los tiempos de relajación, Su investigación trata de la extensión de los modelos de relajación de energía traslacional en gases diluidos al caso de sistemas con reacciones químicas, la cual consta tanto del desarrollo de los cálculos analíticos sobre los modelos de reacciones químicas, como de la modelación computacional de relajación traslacional de una mezcla binaria tomando varios modelos de reacciones químicas como, por ejemplo, el modelo de *Prigogine-Xhrouete* o el modelo de *línea de centros*. Dentro de los cálculos analíticos exponen que la relajación de la energía traslacional en la mezcla de dos componentes en el gas diluido puede ser descrita por la ecuación

$$\frac{d\langle E_A \rangle}{dt} = \frac{1}{\tau} \langle E_A - E_B \rangle, \quad (4.31)$$

donde E_A , E_B denotan las energías traslacionales para las especies A y B respectivamente, $\langle (\dots) \rangle$ denota el promedio sobre la velocidad de distribución y τ denota el tiempo de relajación. Bajo la suposición de que $E_B = 0$, podemos escribir la ecuación para el tiempo inicial para el proceso de alcanzar el equilibrio como

$$\tau = -\frac{\langle (E_A)_0 \rangle}{(d\langle E_A \rangle / dt)_0}. \quad (4.32)$$

Ahora bien, como resultado de su cálculo analítico para esferas duras, la ecuación que nos aporta el tiempo de relajación es de la forma:

$$\tau = -\frac{3 n_A k_B T_A}{4 m_A} (\langle (c'_A)_0 \rangle^2 - (c_A)_0^2)_{coll}^{-1}, \quad (4.33)$$

siendo m_A , c_A , c'_A , n_A y T_A , la masa, la velocidad de una partícula antes de colisión, la velocidad de una partícula post colisión, el número de partículas, y la temperatura del conjunto de moléculas todas asociadas al gas de especie $-A-$ respectivamente, y

$$\langle (\dots) \rangle_{coll} = \int f_A^0 f_B^0 (\dots) \sigma_{AB} g_{AB} d\Omega_{AB} dc_A dc_B,$$

es el promediado en el cilindro colisional tal como lo dedujimos en el capítulo 2.

Ahora bien, hemos mostrado de acuerdo a Cukrowski et al¹⁷. En forma analítica, que el tiempo de relajación está dado por la ecuación (4.31), pero dentro de su cálculo computacional

utilizaron la siguiente ecuación para el tiempo de relajación

$$\tau = -5\Delta t E_A^{(0)} / (E_A^{(5)} - E_A^{(0)}), \quad (4.34)$$

aportando un valor del orden de 2.30×10^{-11} segundos a 9.00×10^{-11} segundos aproximadamente, lo cual indica que el orden de magnitud para nuestros tiempos de relajación en el gas denso de discos rígidos, es un resultado consistente.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo hemos desarrollado el modelo cinético bidimensional para un gas denso de discos ideales, es decir, resolvimos la ecuación de Enskog para la teoría de 8 campos, de donde, a partir de los campos básicos ρ , v_i , p_{ij} y q_i , que pueden deducirse de la Teoría Cinética de Gases y mediante el método de momentos de Grad, este modelo bidimensional nos aporta la forma adecuada para las variables conservadas: densidad de número, velocidad u_l y temperatura T , las cuales son variables relevantes del sistema. Por otro lado, también hemos recurrido a las variables relevantes no conservadas del sistema: la parte cinética del tensor viscoso sin traza y el flujo de calor. Mediante transformar las expresiones para la evolución temporal de las variables conservadas al espacio k_i y ω y su posterior desacoplamiento, hallamos los coeficientes generalizados. Como los coeficientes generalizados estarán presentes en las ecuaciones para la evolución temporal de las variables relevantes del sistema: la ecuación de densidad de número, la ecuación de impetu lineal y la evolución temporal de la temperatura cinética, y dado que éstas al ser llevadas al espacio k_i, ω tienen en sus coeficientes, entre otra información, a los coeficientes generalizados, podemos concluir que al hallar los modos normales en los cuales están presentes los coeficientes generalizados, así como los tiempos de relajación, prácticamente toda la información del sistema hidrodinámico ha sido empleada para obtener los modos colectivos. La observación más importante que se obtuvo del análisis de las gráficas de los modos colectivos hidrodinámicos es que entre más energía entregada al sistema en forma de radiación de luz o neutrones, los modos colectivos divergen bastante en comportamiento, por lo que este modelo es confiable ya que puede diferenciarse la forma de las oscilaciones generales de nuestro sistema bidimensional de gases densos de discos rígidos claramente. En el mismo sentido, los trabajos modernos sobre dispersión de luz en mezclas de gases binarios¹⁸ que podrían extenderse al cálculo de discos rígidos, así como el cálculo

de modos hidrodinámicos para gases de discos no ideales¹⁹, es decir, elásticos y la deducción de coeficientes de transporte mediante simulación computacional de un modelo bidimensional de discos ideales²⁰, muestran que nuestro modelo es importante para posteriormente estudiar trabajos más profundos y complejos en hidrodinámica generalizada. Es también importante notar que para los tiempos de relajación se observa que el tiempo de relajación asociado al tensor de presión es más corto que el tiempo de relajación asociado al flujo de calor, pero no mucho más corto, de tal forma que el orden de magnitud para ambos es de 10^{-10} segundos, no obstante, ambos decaen proporcionalmente a $1/n$ tendiendo ambas curvas a cero para valores de densidad grandes. Esto físicamente nos muestra como se espera la validez de las leyes de la termodinámica, ya que este comportamiento se debe a que está presente el fenómeno de disipación. Además, esto estaría indicando que una perturbación en nuestro medio debido a un gradiente de temperatura es apenas un poco más intensa que una perturbación debida a una diferencia de presión. Teniendo en cuenta que la causa inicial de la aparición de un gradiente de temperatura, en el gas denso de discos rígidos es la dispersión de luz o neutrones.

En un sentido muy individual creo que esta teoría funcionará bien para caracterizar cualquier tipo de gas que se encuentre adherido a cualquier superficie siempre que no ocurra adsorción del gas por parte del material al cual está acoplado, y siempre que sea posible realizar correctamente la medición mediante dispersión de luz o neutrones. Lo anterior puede ser válido, dado que fue en un proceso análogo, pero con radiación infrarroja, el que se empleó en series de experimentos para caracterizar los modos vibracionales²² de distintos compuestos orgánicos, durante el desarrollo de la Química en el siglo pasado. Estos análisis para los gases densos de discos rígidos, servirán de ayuda para saber si podría ocurrir alguna forma de oxidación o corrosión antes de que empiecen a ocurrir procesos de adsorción y/o condensación sobre el material adjunto. Evidentemente lo anterior podrá realizarse siempre que se caractericen los modos colectivos hidrodinámicos para distintos gases en contacto con distintos materiales, por lo que rondas de experimentos de este tipo pueden ser de utilidad para la industria química y de contención de gases.

Bibliografía

- [1] Jean Pierre Boon, Sidney Yip. Molecular hydrodynamics, (Dover pub. 1980).
- [2] Sydney Chapman, Thomas George Cowling. The mathematical theory of non-uniform gases, (Cambridge pub. 1991).
- [3] Gilberto Madeiros Kremer. An Introduction to the Boltzmann Equation and Transport Processes in Gases, (Springer pub. 2010).
- [4] W. Marques Junior. Kinethic Theory for a Dense Gas of Rigid Disks. Brazilian Journal of Physics. 24, 3, (1994).
- [5] Felix Shapirov. Fundamentals for rarified gas dynamics, (wyley-VCH 2016).
- [6] R. M. Velasco y L. S. García Colín. Kinethic approach to generalizad hydrodinamics. Departament of Physics, UAM-Iztapalapa 0934 (1991).
- [7] M. Mayorga, R. M. Velasco, Bulk viscosity of dilute molecular gases. Phys. 92 (1997), 49-54.
- [8] A. Rangel Huerta, Ph. D. Thesis, Depto. de FÌsica CBI, UAM-Iztapalapa (1996).
- [9] A. Rangel Huerta. Hidrodinámica generalizada en gases bidimensionales moderadamente densos de discos rígidos. Revista Mexicana de Física 45 (4) (1999).
- [10] P. Goldstein Menache, Ph D. Thesis, Depto. de FÌsica CBI, UAM-Iztapalapa (1997).
- [11] M. A. Gallis, J. R. Torczynski, and D. J. Rader. Molecular gas dynamics observations of Chapman-Enskog behavior and departures therefrom in nonequilibrium gases. PHYSICAL REVIEW E 69, 042201 (2004).
- [12] G. Kremer. Transport coefficients of a granular gas of inelastic rough hard spheres. PHYSICAL REVIEW E 90, 022205 (2014).

- [13] Dilcléia Dobrowolski, Et al. Light Scattering in monatomic dense gases from a kinetic model of the Enskog equation. *Physica A* 310, (2001).
- [14] A. Rangel Huerta y R. M. Velasco. Light scattering in the kinethic regime. *Physica A* 264, 00410-5 (1990).
- [15] George Brown Arfken, et al. *Mathematical Methods for Physicists*, (Elsevier pub. 2013).
- [16] Pierre Resibois, Michel de Leener. *Classical Kinethic Theory of Fluids*, (John Wiley and Sons pub. 1977).
- [17] G.S. Cukrowski, S. Fritzsche, and J. Popielawski. Theory of translational energy relaxation in binary mixtures of dilute gases with chemical reaction. *ACTA PHYSICA POLONICA A* 82, No. 6 (1992).
- [18] Z. Gu, W. Ubachs, W. Marquez, Jr., y W. van de Water. G. Kremer. Rayleigh-Brillouin Scattering in Binary-Gas Mixtures. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 114, 243902 (2015).
- [19] J. W. Dufty y J.J. Brey. Hydrodynamic Modes for granular gases s. *PHYSICAL REVIEW E* 68, 030302(R), (2003).
- [20] H. Zhao y H. Zhao. The hard-disk fluid revisited. Cornell University Library. *STATISTICAL MECHANICS*, arXiv:1511.00455, (2016).
- [21] Nikoliai Brilliantov y Thorsten Pöschel. *Kinethic Theory of Granular Gases*, (Oxford University Press pub. 2004).
- [22] Nelson Alpert. *IR-Theory and Practice of Infrared Spectroscopy*, Plenum/Roseta, New York (1983).



BUAP

MEMORANDUM

Para:	Dra. Minerva González Melchor. (Presidenta). Dr. Alfredo Díaz de Anda. Dr. Víctor Dossetti Romero. Dr. José Alejandro Rangel Huerta. (Asesor).
De:	Dr. Felipe Pérez Rodríguez, Secretario Académico.
Asunto:	Se cita al examen de grado de Maestría en Ciencias (Física) del Fís. Alberto Israel Gómez Paredes (MCF).
Fecha:	24 de noviembre de 2017.

Me permito informarles que el Comité Académico del IFUAP, los ha designado integrantes del Comité para el EXAMEN DE GRADO DE MAESTRÍA EN CIENCIAS (FÍSICA) del Fís. Alberto Israel Gómez Paredes, con su tesis cuyo título es: *"Hidrodinámica molecular de gases densos de discos rígidos"*, que presentará el próximo día: Jueves 30 de noviembre, 2017 a las 12:00hrs. en el Auditorio del IFUAP.

Dr. Felipe Pérez Rodríguez
Secretario Académico

Instituto de Física
"Ing. Luis Rivera
Terrazas"

Av. San Claudio esq. 18 sur, edif 110 A, B y C.
Ciudad Universitaria, Col. San Manuel,
Puebla, Pue. C.P. 72570
01(222) 2295610, Fax: ext. 5611