TEORIA CINETICA: Resolución de ECUACIONES CINÉTICAS para obtener información sobre PROPIEDADES DE TRANSPORTE

Expresiones MICROSCÓPICAS a los coeficientes de transporte introducidos de forma fenomenológica en la Hidrodinámica clásica.

Descripción Microscópica: $f(\vec{r}, \vec{v}; t)\, d^3\vec{r}\, d^3\vec{v}$

Número medio de partículas que en t están entre $(\vec{r}, \vec{r}+d\vec{r})$ y con $(\vec{v}, \vec{v}+d\vec{v})$

En esta función está contenida toda la información.

Gas DILUIDO: $n = \dfrac{N}{V} \ll 1$

Ecuación de evolución: $$\frac{\partial f}{\partial t} = \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{FLUJO} + \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{COLISIONES}$$

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{FLUJO} = -\vec{v}\cdot\nabla f - \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\left(\vec{F} f\right)$$

(1872) BOLTZMANN: Hipótesis Mecánica + Estadística

① Gas Diluido y Potencial de Interacción de corto alcance

$f(\vec{r},\vec{v};t)$ [illegible] :

a) Duración de colisión molecular (f depende del instante)

b) Distancia del orden del alcance del potencial (f depende del pto)

$\Longrightarrow$ COLISIONES BINARIAS LOCALIZADAS EN EL ESPACIO Y EL TIEMPO

② CAOS MOLECULAR : No hay CORRELACIÓN entre las partículas que colisionan

$$f(\vec{r}_1,\vec{v}_1;\vec{r}_2,\vec{v}_2) = f(\vec{r},\vec{v}_1;\vec{r},\vec{v}_2) \underset{\text{CAOS}}{\overset{\uparrow}{=}} f(\vec{r},\vec{v}_1)\, f(\vec{r},\vec{v}_2)$$

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col.} = \int d\vec{v}_1 \int d\Omega\; g\, I(g,\chi)\left[f(\vec{v}\,')\,f(\vec{v}_1\,') - f(\vec{v})\,f(\vec{v}_1)\right] \equiv J[f,f]$$

$(\vec{v},\vec{v}_1) \longrightarrow (\vec{v}\,',\vec{v}_1\,')$: $g \equiv |\vec{v}-\vec{v}_1|$

$I(g,\chi) \equiv$ SECCIÓN EFICAZ DIFERENCIAL

PROPIEDADES : a) ECUACIONES DE CONSERVACIÓN

$$\int d\vec{v}\, \left\{1,\, m\vec{v},\, \frac{m}{2}v^2\right\} J[f,f] = 0$$

INVARIANTES COLISIONALES

Conservación masa

$$\frac{dn}{dt} = -n\nabla\cdot\vec{u}$$

Conservación momento

$$mn\frac{d\vec{u}}{dt} = -\nabla\cdot\overline{\overline{P}} + \frac{\rho}{m}\vec{F}$$

Conservación energía

$$\frac{3}{2}nk_B\frac{dT}{dt} = -\nabla\cdot\vec{q} - \overline{\overline{P}}:\nabla\vec{u}$$

Momentos hidrodinámicos

$$n = \int d\vec{v}\, f$$

$$n\vec{u} = \int d\vec{v}\,\vec{v} f$$

$$\frac{3}{2}nk_BT = \frac{m}{2}\int d\vec{v}\,(\vec{v}-\vec{u})^2 f$$

Flujos hidrodinámicos

Tensor de presión $\overline{\overline{P}} = \int d\vec{v}\, m\,(\vec{v}-\vec{u})(\vec{v}-\vec{u})\, f$

Flujo de calor $\vec{q} = \int d\vec{v}\,\frac{m}{2}(\vec{v}-\vec{u})^2(\vec{v}-\vec{u})\, f$

Ecs de balance NO son cerradas. Primera aproximación:

Ecs hidrodinámicas de NAVIER-STOKES

$$\overline{\overline{P}} = -\underset{\text{"VISCOSIDAD"}}{\eta}\left[\frac{\nabla\vec{u}+(\nabla\vec{u})^{t}}{2} - \frac{1}{3}\nabla\cdot\vec{u}\,\overline{\overline{I}}\right]$$

$$\vec{J} = -\lambda \nabla T$$

"CONDUCTIVIDAD TÉRMICA"

b) TEOREMA H

Evolución irreversible de un sistema hacia el equilibrio

$$\int d\vec{v} \, [\partial_t + \vec{v}\cdot\nabla] f(\vec{r},\vec{v};t) \ln f(\vec{r},\vec{v};t) \leq 0$$

Evolución de sistema aislado hacia la distribución de MAXWELL-BOLTZMANN de equilibrio

$$f^{eq}(v) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m}{2k_B T} v^2\right)$$

Gran COMPLEJIDAD MATEMÁTICA de $J[f,f]$. Estudiar MODELOS DE INTERACCIÓN sencillos

Potenciales repulsivos $V(r) = k\, r^{-\mu}$

$$\chi = \chi(g^2 b^\mu)$$

$$\Downarrow$$

$$g I(g,\chi) = g^{1-\frac{4}{\mu}} \, \alpha(\cos\chi)$$

$\mu = 4$: $g I(g,\chi) = \alpha(\cos\chi)$ Modelo de MAXWELL.

$\mu < 4$: Interacciones BLANDAS

$\mu > 4$: Interacciones DURAS

Caso límite : $\mu \to \infty$ $\quad g I \sim g$ $\quad$ Modelo de ESFERAS DURAS

Modelo VHP (very hard particles) $g I(g, \chi) = g^2 \propto (\cos \chi)$

No corresponde a potencial físico real

Modelos Cinéticos: Ecuaciones MATEMÁTICAMENTE más sencillas que la de Boltzmann pero FÍSICAMENTE retengan sus aspectos esenciales

$J[f,f] \simeq$ Operador más simple en que no aparezca explícitamente la dinámica de COLISIONES

Reescribamos la ecuación de Boltzmann

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\cdot\nabla\right) f(\vec{r},\vec{v};t) = -\zeta(\vec{r},\vec{v};t)\left[f(\vec{r},\vec{v};t) - f_R(\vec{r},\vec{v};t)\right]$$

Frecuencia de colisión $\zeta(\vec{r},\vec{v};t) = \int d\vec{v}_1 \int d\Omega\, g\, I(g,\chi)\, f(\vec{r},\vec{v}_1;t)$

Función de referencia $f_R(\vec{r},\vec{v};t) = [\zeta(\vec{r},\vec{v};t)]^{-1} \int d\vec{v}_1 \int d\Omega\, g\, I(g,\chi)\, f(\vec{r},\vec{v}';t)\, f(\vec{r},\vec{v}_1';t)$

Ecuación de relajación temporal: COLISIONES $\Rightarrow$ f relaja a f_R después de un ζ^{-1}

$$f(\vec{r},\vec{v};t) = e^{-t\vec{v}\cdot\nabla}\, U(\vec{r},\vec{v};t)\, f(\vec{r},\vec{v};0) + \int_0^t ds\, e^{-t\vec{v}\cdot\nabla}\, U(\vec{r},\vec{v};t)\, U^{-1}(\vec{r},\vec{v};s)\, e^{s\vec{v}\cdot\nabla}\, \zeta(\vec{r},\vec{v};s)\, f_R(\vec{r},\vec{v};s)$$

$$U(\vec{r},\vec{v};t) = \exp\left[-\int_0^t ds\, e^{s\vec{v}\cdot\nabla}\, \zeta(\vec{r},\vec{v};s)\right]$$

$$e^{-\vec{a}\cdot\nabla}\, G(\vec{r}) = G(\vec{r}-\vec{a})$$

Expresión formal ya que f_R es una FUNCIONAL de f

Complejidad de $J(\vec{r},\vec{v};t)$. Casos simples :

$gI \equiv \alpha(\cos\chi)$ (Modelo de Maxwell) : $J_M(\vec{r},\vec{v};t) \equiv J_M(\vec{r};t) = C_M\, n(\vec{r};t)$

$gI \equiv g^2\alpha(\cos\chi)$ (Modelo VHP) : $J_{VHP}(\vec{r},\vec{v};t) \equiv C_{VHP}\, n(\vec{r};t)\left[3\frac{k_B}{m}T(\vec{r};t) + V^2(\vec{r};t)\right]$

donde $V(\vec{r};t) \equiv \vec{v} - \vec{u}(\vec{r};t)$

No somos capaces de resolver EXPLÍCITAMENTE la ec. de Boltzmann

BHATNAGAR, GROSS y KROOK (BGK) (Phys. Rev. 94 , 511 (1954)) :

Modelo BGK . Hipótesis : ⓐ $f_R(\vec{r},\vec{v};t) \equiv f_{EL}(\vec{r},\vec{v};t)$

$$f_{EL}(\vec{r},\vec{v};t) = n(\vec{r};t)\left[\frac{m}{2\pi k_B T(\vec{r};t)}\right]^{3/2} \exp\left[-\frac{m}{2k_B T(\vec{r};t)} V^2(\vec{r};t)\right]$$

ⓑ Frecuencia de colisión INDEPENDIENTE de $\vec{v}$. Colisiones tratadas de modo estadístico o efectivo

$$J(\vec{r};t) = \frac{1}{n(\vec{r};t)} \int d\vec{v}\; J_{EL}(\vec{r},\vec{v};t)\; f_{EL}(\vec{r},\vec{v};t)$$

$$= \frac{1}{n(\vec{r};t)} \int d\vec{v} \int d\vec{v}_1 \int d\Omega\; gI(g,\chi)\, f_{EL}(\vec{r},\vec{v}_1;t)\, f_{EL}(\vec{r},\vec{v};t)$$

Potenciales $r^{-\mu}$: $gI(g,\chi) = g^{1-\frac{4}{\mu}}\, \alpha(\cos\chi)$

$$\zeta(\vec{r};t) \equiv \zeta\left[n(\vec{r};t) ; T(\vec{r};t) \right]$$

$$= \zeta_0(\mu) \; n \, T^{\frac{1}{2} - \frac{2}{\mu}}$$

$$J[f,f] \equiv Q(f)$$

$$= -\zeta(f - f_{EL}) \qquad \text{Modelo BGK}$$

¿Retiene las propiedades esenciales de Boltzmann?

1. Ecs de conservación : $\int d\vec{v} \left\{ 1, m\vec{v}, \frac{m}{2} v^2 \right\} Q(f) \overset{?}{=} 0$ SI

ya que $\int d\vec{v} \left\{ 1, m\vec{v}, \frac{m}{2} v^2 \right\} f = \int d\vec{v} \left\{ 1, m\vec{v}, \frac{m}{2} v^2 \right\} f_{EL}$

2. Teorema $\mathcal{H}$ de Boltzmann : $\int d\vec{v} \, \ln f \; Q(f) \overset{?}{\leq} 0$ SI

$$\int d\vec{v} \, \ln f \; \zeta(f_{EL} - f) = \zeta \int d\vec{v} \, (f_{EL} - f) \ln (f / f_{EL}) + \zeta \int d\vec{v} \, (f_{EL} - f) \ln f_{EL} \leq 0$$

ya que $(x - y) \ln (y/x) \leq 0$

Simplicidad APARENTE del modelo : $f_{EL}[n, \vec{u}, T]$ siendo dichos momentos FUNCIONALES de $f(\vec{r}, \vec{v}; t)$. Término de colisión es más simple que el de Boltzmann

Aproximación lineal: Modelo BGK LINEALIZADO

Estado próximo al de equilibrio absoluto

$$f(\vec{r},\vec{v};t) = f^{eq}(v) + \delta f(\vec{r},\vec{v};t)$$

$$n(\vec{r};t) = n_0 + \delta n(\vec{r};t)$$

$$\vec{u}(\vec{r};t) = \delta\vec{u}(\vec{r};t) \qquad n_0, T_0 \equiv \text{ctes}$$

$$T(\vec{r};t) = T_0 + \delta T(\vec{r};t)$$

$$f_{EL}(\vec{r},\vec{v};t) = (n_0+\delta n)\left[\frac{m}{2\pi k_B(T_0+\delta T)}\right]^{3/2} \exp\left[-\frac{m}{2k_B(T_0+\delta T)}|\vec{v}-\delta\vec{u}|^2\right]$$

$$= f^{eq}(v)\left[1 + \frac{\delta n(\vec{r};t)}{n_0} + \frac{m\vec{v}}{k_BT_0}\cdot\delta\vec{u}(\vec{r};t) + \frac{1}{T_0}\left(\frac{mv^2}{2k_BT_0} - \frac{3}{2}\right)\delta T(\vec{r};t)\right] + \mathcal{O}(\delta^2)$$

Operador de colisión linealizado

$$Q^L(f) = \zeta_0\left[\frac{\delta n}{n_0} + \frac{m\vec{v}}{k_BT_0}\cdot\delta\vec{u} + \frac{1}{T_0}\left(\frac{mv^2}{2k_BT_0} - \frac{3}{2}\right)\delta T - \delta f\right]$$

Transformada de Fourier: $f_q(\vec{v};t) = \int d\vec{r}\; e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\; \delta f(\vec{r},\vec{v};t)$

$$\langle h(\vec{v}) | g(\vec{v})\rangle = \frac{1}{n_0}\int d\vec{v}\; f^{eq^{-1}}(v)\; h^*(\vec{v})\; g(\vec{v})$$

Ecuación BGK linealizada en el espacio de Fourier

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iqv_x\right) f_q = \zeta_0\left\{\left[\sum_{\alpha=1}^{5}\langle\Phi^0_\alpha | f_q\rangle\,\Phi^0_\alpha\right] - f_q\right\}$$

Funciones propias del operador de colisión de Boltzmann linealizado y de valor propio cero:

$$\Phi_1^0(\vec{v}) = \frac{1}{n_0} f^{eq}(v) ,$$

$$\Phi_i^0(\vec{v}) = \frac{v_i}{\sqrt{k_B T_0/m}} \Phi_1^0(\vec{v}) ,$$

$$\Phi_5^0(\vec{v}) = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{m v^2}{2 k_B T_0} - \frac{3}{2} \right) \Phi_1^0(\vec{v})$$

Son ortonormales. Teoría macroscópica de los MODOS HIDRODINÁMICOS:

Coeficientes de transporte son los valores propios del desarrollo perturbativo a segundo orden (q^2)

$$\eta = m n_0 \zeta_0^{-1} \langle \phi_3^1 | v_x^2 | \phi_3^1 \rangle ; \qquad \phi_3^1 = \phi_3^0$$

$$\lambda = m n_0 \zeta_0^{-1} \langle \phi_5^1 | v_x^2 | \phi_5^1 \rangle ; \quad \phi_5^1 = \sqrt{\frac{2}{5}} \left[\Phi_1^0 - \sqrt{\frac{3}{2}} \phi_5^0 \right]$$

Integrando en el espacio de velocidades

$$\eta = \frac{n_0 k_B T_0}{\zeta_0}$$

$$\lambda = \frac{5}{2} \frac{n_0 k_B^2 T_0}{m \zeta_0}$$

(η, λ) son constantes

Métodos de resolución de la ecuación BGK

Solución del modelo BGK : Formulación de ecuaciones de transporte que pueden cerrarse al conocer los flujos hidrodinámicos. Estas ecuaciones definen los coeficientes de transporte

Métodos aproximados : DESARROLLOS PERTURBATIVOS

Se generan de forma sistemática las ecuaciones de transporte de la Hidrodinámica Clásica : EULER (∇^0), NAVIER-STOKES (∇), BURNETT ($\nabla\nabla$), SUPER-BURNETT ($\nabla\nabla\nabla$), ...

Métodos usuales : CHAPMAN-ENSKOG y HILBERT

Idea básica : ADMITIR que $f(\vec{r}, \vec{v}; t)$ es desarrollable en potencias de un parámetro (δ) que puede ser pequeño en algunas situaciones.

$$\delta \sim \frac{l}{L}$$

l : RECORRIDO LIBRE MEDIO

L : LONGITUD HIDRODINÁMICA

$$f = \sum_{k=0}^{\infty} f^{(k)} \delta^k \quad , \quad f^{(k)} \sim \mathcal{O}(\nabla^k)$$

Objetivo de los métodos: Obtener $f^{(k)}$. Naturaleza y validez del desarrollo: SOLUCIÓN NORMAL

$$f(\vec{r},\vec{v};t) \equiv f[\vec{v};\, n(\vec{r};t),\, \vec{u}(\vec{r};t),\, T(\vec{r};t)]$$

Describen la etapa hidrodinámica: etapa final en la relajación hacia el equilibrio. En esta etapa, descripción del sistema a través de las 5 variables conservadas.

Para $t \gg$: detalles del estado INICIAL NO son relevantes.

Solución NORMAL no es válida en todas las regiones del sistema.

Si $\quad f \simeq \sum_{l=0}^{k} f^{(k)} \delta^{k} \Rightarrow \text{Error} \sim \delta^{k+1}$

Derivadas espaciales de orden $k+1$. Solución correcta si los perfiles hidrodinámicos son SUAVES. Si

$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \{n, \vec{u}, T\}$ varían rápidamente: Descripción NORMAL no es válida: Regiones próximas a paredes (BOUNDARY LAYER), etapa inicial de evolución.

Método de Hilbert

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\cdot\nabla\right) f = \delta^{-1} Q(f)$$

$$f = f^{(0)} + f^{(1)}\delta + f^{(2)}\delta^2 + \dots$$

En la etapa hidrodinámica: $\partial_t f$ y $\vec{v}\cdot\nabla f$ son del orden de velocidad característica / longitud característica. $Q(f)$ es del orden del recorrido libre medio. Orden relativo de $Q(f)$ respecto de $\partial_t f$ y $\vec{v}\cdot\nabla f$ es δ^{-1}

$$n = n^{(0)} + n^{(1)}\delta + n^{(2)}\delta^2 + \dots,$$

$$\vec{u} = \vec{u}^{(0)} + \vec{u}^{(1)}\delta + \vec{u}^{(2)}\delta^2 + \dots,$$

$$T = T^{(0)} + T^{(1)}\delta + T^{(2)}\delta^2 + \dots$$

Cada $(n^{(k)}, \vec{u}^{(k)}, T^{(k)})$ puede obtenerse a partir de $f^{(k)}$ igualando términos de igual potencia en δ en las expresiones de los momentos:

$$n = \int d\vec{v}\, f$$

$$n\vec{u} = \int d\vec{v}\, \vec{v}\, f$$

$$\frac{3}{2} n k_B T = \int d\vec{v}\, \frac{m}{2} |\vec{v}-\vec{u}|^2 f$$

$$Q(f) = -\mathcal{J}(f - f_{EL})$$

$$= -\left(\mathcal{J}^{(0)} + \mathcal{J}^{(1)}\delta + \mathcal{J}^{(2)}\delta^2 + \dots\right)\left[\left(f^{(0)} + f^{(1)}\delta + f^{(2)}\delta^2 + \dots\right) - \left(f_{EL}^{(0)} + f_{EL}^{(1)}\delta + f_{EL}^{(2)}\delta^2 + \dots\right)\right]$$

Igualando idénticas potencias en δ:

$$f^{(0)} = f_{EL}^{(0)} \quad ,$$

$$f^{(1)} = f_{EL}^{(1)} - \frac{1}{\mathcal{J}^{(0)}}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\cdot\nabla\right) f^{(0)} \quad ,$$

$$f^{(2)} = f_{EL}^{(2)} - \frac{1}{\mathcal{J}^{(0)}}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\cdot\nabla\right) f^{(1)} - \frac{\mathcal{J}^{(1)}}{\mathcal{J}^{(0)}}\left(f^{(1)} - f_{EL}^{(1)}\right) ,$$

$$\vdots$$

$$f^{(k)} = f_{EL}^{(k)} - \frac{1}{\mathcal{J}^{(0)}}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\cdot\nabla\right) f^{(k-1)} - \frac{1}{\mathcal{J}^{(0)}}\sum_{\ell=1}^{k-1} \mathcal{J}^{(\ell)}\left(f^{(k-\ell)} - f_{EL}^{(k-\ell)}\right)$$

Ecuaciones hidrodinámicas de $\Xi^{(k)} \equiv \{n^{(k)}, \vec{u}^{(k)}, T^{(k)}\}$ las obtenemos de las condiciones de SOLUBILIDAD

$$\int d\vec{v} \;\; A^{\alpha}(\vec{v}) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\cdot\nabla\right) f^{(k)} = 0 \qquad (\alpha = 1, \dots, 5)$$

$$A^{\alpha}(\vec{v}) \equiv \left\{ 1,\; m\vec{v},\; \frac{m}{2}v^2 \right\}$$

Primera aproximación:

$$f^{(0)} = f^{(0)}_{EL} = n^{(0)} \left(\frac{m}{2\pi k_B T^{(0)}}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m}{2k_B T^{(0)}} |\vec{v} - \vec{u}^{(0)}|^2\right]$$

$$P^{(0)}_{\alpha\beta} = n^{(0)} k_B T^{(0)} \delta_{\alpha\beta}$$

$$q^{(0)}_{\alpha} = 0$$

Ecuaciones no disipativas de EULER

$$\frac{d}{dt} n^{(0)} = -n^{(0)} \nabla \cdot \vec{u}^{(0)}$$

$$m\, n^{(0)} \frac{d}{dt} \vec{u}^{(0)} = -\nabla (n^{(0)} k_B T^{(0)})$$

$$\frac{3}{2} n^{(0)} k_B \frac{d}{dt} T^{(0)} = -n^{(0)} k_B T^{(0)} \nabla_k u^{(0)}_k$$

Segunda aproximación: Ecuaciones lineales para $n^{(1)}, \vec{u}^{(1)}, T^{(1)}$.
Se resuelven a partir de la solución de las de Euler. Ecs de Navier-Stokes

Sucesivamente obtenemos soluciones en términos de derivadas espacio-temporales de $\xi^{(k)}$. Descripción macroscópica del gas en términos de n, $\vec{u}$ y T.

Hemos supuesto que $\{n, \vec{u}, T\}$ son ANALÍTICAS entorno a $\delta = 0$

METODO DE CHAPMAN-ENSKOG

Método de aproximaciones sucesivas. En lugar de desarrollar los campos hidrodinámicos (Método de Hilbert), desarrollamos sus ecuaciones de transporte.

Ecuaciones de balance general:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_\beta = D_\beta(\rho_\alpha)$$

ρ_α : variables conservadas

D_α : operador no lineal que actúa sobre la dependencia espacial de ρ_α.

Suponemos que: $D_\beta = \sum_{k=0}^{\infty} D_\beta^{(k)} \delta^k$

Evolución temporal de ρ_α viene dada a partir de procesos de diferentes órdenes de magnitud en δ.

Sistema admite descripción hidrodinámica:

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} \delta + f^{(2)} \delta^2 + \ldots$$

Condiciones de ligadura para las aproximaciones

$$n = \int d\vec{v}\; f^{(0)}$$

$$n\vec{u} = \int d\vec{v}\; \vec{v}\, f^{(0)}$$

$$\frac{3}{2} n k_B T = \int d\vec{v}\; \frac{m}{2}\, |\vec{v}-\vec{u}|^2\, f^{(0)}$$

lo que implica que $\int d\vec{v}\, \{1, \vec{v}, v^2\}\, f^{(k)} = 0 \quad (k \geq 1)$

Estas condiciones aseguran la validez de cada aproximación ya que $f = \sum_k f^{(k)}$ reproduce los momentos hidrodinámicos conservados. De igual modo los FLUJOS DE MOMENTO Y CALOR :

$$\overline{\overline{P}} = \sum_{k=0}^{\infty} \overline{\overline{P}}^{(k)}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \int d\vec{v}\; m\vec{V}\vec{V}\, f^{(k)}$$

$$\vec{q} = \sum_{k=0}^{\infty} \vec{q}^{(k)}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \int d\vec{v}\; \frac{m}{2} V^2 \vec{V}\, f^{(k)}$$

donde $\vec{V} = \vec{v} - \vec{u}$. El estado de referencia ($f^{(0)}$) define las variables conservadas. Idea central del desarrollo de C-E :

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial_0}{\partial t} + \frac{\partial_1}{\partial t}\delta + \frac{\partial_2}{\partial t}\delta^2 + \dots$$

donde $\frac{\partial_k}{\partial t}$ es un operador que determinaremos a continuación.

Por ser solución normal:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial n}\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{u}}\cdot\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial t}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty}\left[\frac{\partial f^{(k)}}{\partial n}\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial f^{(k)}}{\partial \vec{u}}\cdot\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \frac{\partial f^{(k)}}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial t}\right]\delta^k$$

Las derivadas temporales se obtienen a partir de las ecs de transporte. Definimos $\frac{\partial_k}{\partial t}$:

$$\frac{\partial_0}{\partial t} n = -\nabla\cdot(n\vec{u})$$

$$\frac{\partial_k}{\partial t} n = 0 \qquad (k\geq 1)$$

$$\frac{\partial_0}{\partial t}\vec{u} = -(\vec{u}\cdot\nabla)\vec{u} - \frac{1}{mn}\nabla\cdot\bar{\bar{P}}^{(0)}$$

$$\frac{\partial_k}{\partial t}\vec{u} = -\frac{1}{mn}\nabla\cdot\bar{\bar{P}}^{(k)} \qquad (k\geq 1)$$

$$\frac{\partial_0}{\partial t}T = -\vec{u}\cdot\nabla T - \frac{2}{3k_B n}\left[\bar{\bar{P}}^{(0)}:\nabla\vec{u} + \nabla\cdot\vec{q}^{(0)}\right]$$

$$\frac{\partial_k}{\partial t}T = -\frac{2}{3k_B n}\left[\bar{\bar{P}}^{(k)}:\nabla\vec{u} + \nabla\cdot\vec{q}^{(k)}\right] \qquad (k\geq 1)$$

$\frac{\partial_k}{\partial t}$ vienen dados a partir de derivadas espaciales de $\vec{n}$, $\vec{u}$ y T que a su vez se definen a partir de $f^{(0)}$.

Solución de Chapman-Enskog dada en función de los gradientes de los parámetros definidos en $f^{(0)}$.

Sustituyendo en la ecuación BGK los desarrollos en δ, obtenemos la jerarquía de ecuaciones algebraicas:

$$f^{(0)} = f_{EL}$$

$$f^{(1)} = -\frac{1}{\zeta}\left[\frac{\partial_0}{\partial t} + \vec{v}\cdot\nabla\right] f_{EL},$$

$$f^{(2)} = -\frac{1}{\zeta}\left[\left(\frac{\partial_0}{\partial t} + \vec{v}\cdot\nabla\right) f^{(1)} + \frac{\partial_1}{\partial t} f_{EL}\right],$$

$$\vdots$$

$$f^{(k)} = -\frac{1}{\zeta}\left[\left(\frac{\partial_0}{\partial t} + \vec{v}\cdot\nabla\right) f^{(k-1)} + \frac{\partial_1}{\partial t} f^{(k-2)} + \dots + \frac{\partial_{k-1}}{\partial t} f_{EL}\right]$$

Comprobemos la consistencia del método

$$\int d\vec{v}\ \left\{1,\ m\vec{v},\ \frac{m}{2}V^2\right\} f^{(k)} = 0 \qquad (k \geq 1)$$

De acuerdo a la aproximación k-ésima

$$\int d\vec{v}\ A^{\alpha}(\vec{v})\left[\frac{\partial_0}{\partial t} f^{(k-1)} + \frac{\partial_1}{\partial t} f^{(k-2)} + \dots + \frac{\partial_{k-1}}{\partial t} f_{EL} + \vec{v}\cdot\nabla f^{(k-1)}\right] = 0,$$

o bien si para el orden k-1 se cumple

$$\int d\vec{v}\ A^{\alpha}(\vec{v})\left[\frac{\partial_{k-1}}{\partial t} f_{EL} + \vec{v}\cdot\nabla f^{(k-1)}\right] = 0$$

Si $A^{\alpha}(\vec{v}) = 1$:

$$\int d\vec{v} \left[\frac{\partial_{k-1}}{\partial t} f_{EL} + \vec{v}\cdot\nabla f^{(k-1)} \right] = \frac{\partial_{k-1}}{\partial t} \int d\vec{v}\, f_{EL} + \nabla\cdot \int d\vec{v}\, \vec{v}\, f^{(k-1)}$$

$$= \frac{\partial_{k-1}}{\partial t} n = 0,$$

Si $A^{\alpha}(\vec{v}) = m\vec{v}$:

$$\int d\vec{v}\; m\vec{v} \left[\frac{\partial_{k-1}}{\partial t} f_{EL} + \vec{v}\cdot\nabla f^{(k-1)} \right]$$

$$= \frac{\partial_{k-1}}{\partial t} \int d\vec{v}\; m\vec{v}\; f_{EL} + \nabla\cdot\int d\vec{v}\; m\, \vec{V}\,\vec{V} f^{(k-1)} + 2m\nabla\cdot\vec{u}\cancel{\int d\vec{v}\, \vec{V} f^{(k-1)}}$$

$$+ m\,\nabla\cdot\vec{u}\,\vec{u}\cancel{\int d\vec{v}\; f^{(k-1)}}$$

$$= \frac{\partial_{k-1}}{\partial t} mn\vec{u} + \nabla\cdot\overline{\overline{P}}^{(k-1)} = -\nabla\cdot\overline{\overline{P}}^{(k-1)} + \nabla\cdot\overline{\overline{P}}^{(k-1)} = 0,$$

Si $A^{\alpha}(\vec{v}) = \frac{m}{2} V^2$:

$$\int d\vec{v}\; \frac{m}{2} |\vec{v}-\vec{u}|^2 \left[\frac{\partial_{k-1}}{\partial t} f_{EL} + \vec{v}\cdot\nabla f^{(k-1)} \right]$$

$$\int d\vec{v}\; \frac{m}{2} V^2 \frac{\partial_{k-1}}{\partial t} f_{EL} = \frac{3}{2} n k_B \frac{\partial_{k-1} T}{\partial t}$$

$$= -\overline{\overline{P}}^{(k-1)} : \nabla\vec{u} - \nabla\cdot\vec{q}^{\,(k-1)}$$

$$\int d\vec{v}\; \frac{m}{2} V^2\, \vec{v}\cdot\nabla f^{(k-1)} = \nabla\cdot\int d\vec{v}\; \frac{m}{2} V^2 \vec{V} f^{(k-1)} + \nabla\cdot\vec{u}\cancel{\int d\vec{v}\; \frac{m}{2} V^2 f^{(k-1)}}$$

$$+ \nabla\vec{u} : \int d\vec{v}\; m\, \vec{V}\,\vec{V} f^{(k-1)} = \nabla\cdot\vec{q}^{\,(k-1)} + \nabla\vec{u} : \overline{\overline{P}}^{(k-1)}$$

Orden de Euler: $P^{(0)}_{\alpha\beta} = n k_B T \delta_{\alpha\beta}$

$$= P\,\delta_{\alpha\beta} \quad ,$$

$$\vec{q}^{\,(0)} = \vec{0}$$

Orden de Navier-Stokes:

$$f^{(1)} = -\frac{1}{\zeta}\left\{ \frac{m}{k_B T} V_\alpha V_\beta \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} + \left(\frac{mV^2}{2k_BT} - \frac{5}{2}\right) V_\alpha \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \ln T \right\} f^{EL}$$

Flujo de Momento

$$P^{(1)}_{\alpha\beta} = \int d\vec{v}\; m V_\alpha V_\beta\, f^{(1)}$$

$$= -\eta\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\beta} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\, \nabla\cdot\vec{u}\right)$$

$$\eta = \frac{n k_B T}{\zeta}$$ COEFICIENTE DE VISCOSIDAD

Flujo de calor

$$q^{(1)}_\alpha = \int d\vec{v}\; \frac{m}{2} V^2 V_\alpha\, f^{(1)}$$

$$= -\lambda \frac{\partial T}{\partial r_\alpha} \quad , \qquad \lambda = \frac{5}{2}\frac{n k_B^2 T}{m\zeta}$$ COEFICIENTE DE CONDUCTIVIDAD TÉRMICA

Resultados FORMALMENTE ANALOGOS a los del método de Hilbert.

G.Y. Cha & B.J. Mc Coy, J. Chem. Phys. 54, 4369 (1971): Ecs de super-Burnett para modelo de esferas duras $\zeta = \zeta_0\, n T^\alpha$, $\alpha = \frac{1}{2}$.

ECUACIÓN DE BOLTZMANN: Coeficientes de transporte

A partir del desarrollo de Chapman-Enskog

$$\eta^{EB} = \frac{5}{8} \frac{n k_B T}{\nu}$$

$$\lambda^{EB} = \frac{15}{4} \frac{k_B}{m} \eta^{EB}$$

ν: Frecuencia de colisión de Boltzmann. AUTOVALOR del operador $J[f,f]$. En el caso particular de potenciales repulsivos $V(r) = \frac{K}{r^\mu}$

$$\nu(\vec{r},t) = \left(\frac{\pi k_B}{m}\right)^{1/2} \left(\frac{\mu K}{2 k_B}\right)^{2/\mu} A_2 \, \Gamma\left(4-\frac{2}{\mu}\right) n T^\alpha$$

$$\equiv \nu_0 \, n(\vec{r},t) \, T^\alpha(\vec{r},t)$$

donde $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{2}{\mu}$. Resultado válido en primera aproximación, excepto para moléculas de Maxwell ($\mu = 4$)

$$A_2(\mu+1) \underset{\text{MAXWELL}}{=} 0.436$$

Comparacion con resultados BGK:

Si escojo $\zeta^{BGK} = (8/5)\nu \Rightarrow \eta^{BGK} = \eta^{EB}$

Sin embargo $\lambda^{BGK} \neq \lambda^{EB}$

Si escojo $\zeta^{BGK} = (16/15)\nu \Rightarrow \lambda^{BGK} = \lambda^{EB}$

Sin embargo $\eta^{BGK} \neq \eta^{EB}$

No se obtienen resultados equivalentes en el orden de Navier-Stokes.

Número de PRANDTL : $P \equiv \dfrac{\lambda}{\eta c_v}$

Gases monoatómicos : $P^{EB} = 5/2$ (Buen acuerdo experimental)

$P^{BGK} = 5/3$

MODELO DE LIU (G. Liu, Phys. Fluids A 2, 277 (1990))

Objetivo : Soluciones de Navier-Stokes sean IDENTICAS a las dadas por ecuación de Boltzmann

$$J[f,f] \cong -\zeta(f - f^{EL})$$
$$+ f^{EL} A \frac{m}{k_B T}\left(V_i V_j - \frac{1}{3}V^2 \delta_{ij}\right) \nabla_j u_i$$
$$+ f^{EL} B \left(\frac{mV^2}{2k_B T} - \frac{5}{2}\right) V_i \nabla_i \ln T$$

$\mathcal{J} \equiv$ Frecuencia de colisión efectiva independiente de $\vec{v}$

Cantidad similar a la introducida por el modelo BGk.

$$A \equiv 1 - \frac{\mathcal{J}\,\eta^{EB}}{n k_B T}$$

$$B \equiv 1 - \frac{2}{5}\,\mathcal{J}\,\lambda^{EB}\,\frac{m}{n k_B^2 T}$$

Modelo de LiU $\equiv$ Modelo BGk

+ Aproximación de Navier-Stokes de Chapman-Enskog

$\equiv J^{BGk} + I^{CE}$

ⓐ Leyes de conservación: $\int d\vec{v}\, A^{\alpha}(\vec{v})\, I^{CE} = 0$

ⓑ Teorema $\mathcal{H}$: $\frac{\partial}{\partial t}\int f \ln f\, d\vec{v} \leq 0$

Cumple los mismos requisitos que las ecuaciones de Boltzmann y BGk.

Si $(\eta^{EB}, \lambda^{EB})$ se sustituyen por $(\eta^{BGk}, \lambda^{BGk})$, el modelo de Liu se reduce al modelo BGk. Características esenciales están en el término I^{CE}. Depende de la razón $\mathcal{J}/\nu$. Podemos escoger dicho cociente según convenga.

Si $\zeta/\nu \equiv 8/5 \Rightarrow A=0$ y $\eta^{CE} \equiv \eta^{BGK}$.

Si $\zeta/\nu \equiv \frac{16}{15} \Rightarrow B=0$ y $\lambda^{CE} \equiv \lambda^{BGK}$.

Coeficientes de transporte son IDENTICOS a los de Boltzmann independientemente de la elección de ζ/ν. El modelo proporciona el valor experimental correcto del número de Prandtl.

¿Qué ocurre con las ecuaciones hidrodinámicas NO LINEALES?

V. Garzó [Phys. Fluids A 3, 1980, (1991)]

Coeficientes de transporte de Burnett obtenidos a partir del método de Hilbert.

Si $\zeta = \frac{8}{5}\nu$: Tensor de presiones idéntico a Boltzmann

Discrepancia con flujo de calor $\sim 33\%$

Si $\zeta = \frac{16}{15}\nu$: Conclusiones análogas para el flujo de calor

Conclusión: Propiedades de transporte obtenidas a partir de LIV más próximas a BOLTZMANN que las derivadas a partir de BGK.