

CONDICIONES DE FRONTERA PARA UN GAS ENRARECIDO

Tesis que presenta:

M. en Fís. Jorge López Lemus

para la obtención del grado de
Doctor en Ciencias

Asesor:

Dra. Rosa María Velasco Belmont

Departamento de Física

México D.F., Enero del 2000

**UNIVERSIDAD AUTONOMA
METROPOLITANA-IZTAPALAPA
DIVISION CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA**

A Elizabeth

Desco expresar mi más sincero agradecimiento a mi asesor Dra. Rosa María Velasco Belmont, por su paciencia, dedicación y apoyo constante para dirigir tan acertadamente este trabajo de tesis.

Agradezco a los profesores Dr. Eliezer Braun Guitler, Dr. Eduardo Ramos Mora, Dr. Francisco Uribe Sánchez y Dr. Miguel Mayorga Rojas, por la revisión de este trabajo y sus valiosas observaciones para mejorar el mismo.

Agradezco toda la ayuda y el apoyo de parte de los profesores, compañeros y amigos del departamento de Mecánica Estadística.

Al departamento de Física de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería, la hospitalidad y las facilidades que me brindó durante mi estancia en la UAM-I.

Al CONACyT por el apoyo económico para realizar los estudios de posgrado.

Indice

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Introducción | 1 |
| 2 | Ecuaciones de evolución | 9 |
| 2.1 | Modelo cinético | 10 |
| 2.2 | Ecuaciones de balance | 13 |
| 2.3 | La solución de la ecuación de Boltzmann | 21 |
| 2.3.1 | Método de Chapman-Enskog | 21 |
| 2.3.2 | Método de Grad | 24 |
| 2.4 | Ecuaciones de relajamiento para un gas simple | 28 |
| 3 | Condiciones de frontera | 43 |
| 3.1 | Las condiciones de deslizamiento | 44 |
| 3.2 | Kernel de dispersión | 46 |
| 3.3 | El modelo de Maxwell | 50 |
| 3.4 | Coefficiente de acomodación | 57 |
| 3.5 | El modelo de las fronteras | 59 |
| 3.5.1 | La constante de normalización | 64 |
| 3.6 | Los valores de frontera de \mathbf{q} y \mathbf{P}° | 68 |
| 3.7 | Adimensionalización | 76 |
| 4 | Flujo Couette | 79 |
| 4.1 | Aproximación de Navier-Stokes | 81 |
| 4.2 | Aproximación de Grad, λ , η y p funciones de la posición | 84 |
| 4.2.1 | Perfil de temperatura | 91 |
| 4.2.2 | Velocidad de deslizamiento | 95 |

| | | |
|-------------------------------|---|------------|
| 4.2.3 | Coeficientes de deslizamiento | 98 |
| 4.3 | λ y η constantes, p función de la posición | 101 |
| 4.3.1 | Perfil de temperatura | 105 |
| 4.3.2 | Coeficientes de deslizamiento | 106 |
| 4.4 | λ y η funciones de la posición y p constante | 107 |
| 4.4.1 | Coeficientes de deslizamiento | 111 |
| 4.5 | η , λ constantes y p constante | 112 |
| 4.5.1 | Coeficientes de deslizamiento | 113 |
| 4.6 | Discusión | 114 |
| 5 | Flujo Couette Generalizado | 117 |
| 5.1 | Aproximación de Navier-Stokes | 118 |
| 5.2 | η y λ constantes, $p = \rho_{eq}RT_{eq}$ constante | 121 |
| 5.3 | λ , η y p funciones de la posición | 125 |
| 6 | Conclusiones y Perspectivas | 130 |
| Apéndice A | | 134 |
| A.1 | La ecuación para la masa | 134 |
| A.2 | La ecuación del momento | 134 |
| A.3 | La ecuación de la energía | 135 |
| A.4 | La ecuación para el tensor viscoso simétrico sin traza | 135 |
| A.5 | La ecuación del flujo de calor | 136 |
| Apéndice B | | 138 |
| B.1 | Ecuación de Boltzmann reticular | 138 |
| B.2 | Automata de gas reticular | 143 |
| Apéndice C | | 144 |
| Bibliografía | | 148 |

Capítulo 1

Introducción

El comportamiento dinámico de los fluidos tiene gran relevancia, no sólo porque su conocimiento tiene aplicaciones numerosas, sino también debido a que permite entender aspectos como la interacción entre partículas, partículas-paredes, etc. El estudio de los fluidos puede realizarse a través de enfoques diferentes, dependiendo de las características que queramos explorar, y en ocasiones resulta útil utilizar aspectos diferentes en forma complementaria. En este trabajo estamos interesados en el comportamiento de los gases enrarecidos y en la forma en que interactúan con paredes sólidas.

Ahora bien, para un gas diluido sabemos que la trayectoria libre media es inversamente proporcional a la densidad. Si se presenta el caso en que la densidad del fluido disminuye, entonces podemos esperar que el recorrido libre medio de las partículas del gas se incremente, de tal forma que si esta última cantidad es del orden de la dimensión lineal de las fronteras que lo contienen, se dice que el fluido es un gas enrarecido. Cuando el gas que se estudia se encuentra en este régimen de densidad, es importante considerar tanto las colisiones partícula-partícula como las partícula-pared [1, 2]. La contribución de las colisiones del gas en las paredes no son despreciables y conducen a efectos interesantes.

Al estudiar la dinámica de los gases enrarecidos, encontramos diversos problemas de interés tales como: la transferencia de energía en colisiones moleculares, dinámica de aerosoles, flujos inducidos por evaporación y condensación, el cálculo de los perfiles de densidad y de velocidad entre otros [1, 3-7].

En la dinámica de gases enrarecidos se han reconocido varios regímenes de interés. El criterio para clasificar su estudio involucra la introducción de un parámetro sencillo que

caracteriza al gas y a las dimensiones de la frontera, el número de Knudsen, $K_n = \frac{l}{L}$, donde l es la trayectoria libre media y L es la dimensión lineal de las fronteras.

Cuando se trabaja en la región de números de Knudsen mucho menores que la unidad $K_n \ll 1$, encontramos que el análisis del sistema se puede llevar a cabo mediante el esquema de la hidrodinámica clásica, empleando para ello la ecuación de Navier-Stokes. Cuando se trabaja en esta región, que se conoce como régimen del continuo, usualmente se emplean las condiciones de frontera de pegado, éstas consisten en suponer que la pared y la capa de gas adyacente tienen la misma temperatura y velocidad. Esta hipótesis de no deslizamiento en la pared, es válida para una gran variedad de fluidos, excepto para aquellos que no mojan la frontera [8-11].

Por otro lado, a los flujos que corresponden a números de Knudsen no tan pequeños se les conoce como flujos de deslizamiento. Estos flujos que no difieren mucho de aquellos que se analizan en el régimen del continuo, están caracterizados por la presencia de la llamada capa de Knudsen [4, 5, 11-13], ésta es una capa delgada de gas que se forma en las inmediaciones de la superficie frontera, que tiene propiedades diferentes a las del gas en el bulto y tampoco coinciden con los de la pared, debido a la relevancia que adquieren las colisiones entre las partículas y la pared. Usualmente cuando se trabaja en esta región, se plantean las ecuaciones de balance de las cantidades conservadas y se establecen condiciones de frontera para la temperatura y la velocidad del fluido en las fronteras, ello en términos del salto de temperatura y la velocidad de deslizamiento [12]. El límite que separa estos dos regímenes en el flujo, es difícil de establecer, sin embargo a menudo se toma como referencia $\sqrt{Re}K_n \sim \sqrt{Re} \frac{M}{Re} \cong 0.01$, donde M es el número de Mach y Re es el número de Reynolds [1, 3], éstos se definen como $M = \frac{u_r}{u_s}$ y $Re = \frac{u_r L}{\eta}$, donde η es el coeficiente de viscosidad cortante, u_r es una velocidad de referencia y u_s es la velocidad del sonido.

Al régimen en donde se consideran números de Knudsen cercanos a la unidad se le conoce como la región de transición. Cuando se aborda el estudio de la dinámica de un gas enrarecido en este régimen, por lo general se plantea la ecuación de Boltzmann en su forma original o en alguna de sus aproximaciones (lineal, BGK,...), y se obtiene la solución a la ecuación cinética ya sea por medio de algún método: Chapman-Enskog, Grad, soluciones

numéricas o un principio variacional, introduciendo el modelo de frontera a través de la función de distribución [4, 5, 12, 14-19]. En particular, una de las ecuaciones más usadas en la literatura es el modelo BGK [20], un ejemplo de ello, es la solución de la ecuación BGK planteada para una onda de choque [21].

Finalmente, en la región de números de Knudsen mucho mayores que la unidad $K_n \gg 1$, tenemos lo que se conoce como el régimen de flujo libre o molecular libre, este caso límite corresponde a un enrarecimiento muy alto en el gas, donde la frecuencia de las colisiones entre partículas es tan baja que ya no tiene efecto sobre la función de distribución, tal es el caso del flujo alrededor de un satélite artificial de la tierra moviéndose en su órbita [12].

En este límite, las únicas colisiones importantes son aquellas que se dan entre el gas y un obstáculo. Aquí el flujo puede ser determinado aún para geometrías complicadas usando técnicas computacionales, que están limitadas sólo por la información que se tenga de las características de la interacción gas-pared.

En el cuadro de abajo podemos ver esquemáticamente las regiones del flujo de un gas enrarecido y el tipo de descripción que normalmente se realiza.

| | | | | |
|----------|-----------------------|----------------------|--|---------------------------------|
| Discreto | Ecuación de Boltzmann | | | Ec. de Boltzmann sin colisiones |
| Continuo | Ec. de Euler | Ec. de Navier-Stokes | Ecs. de conservación que no forman un conjunto cerrado | |

Número de Knudsen

Para estudiar la dinámica de un gas enrarecido a través de técnicas computacionales, en la literatura hallamos métodos tales como la Dinámica Molecular [22], el método de Simulación Directa de Monte Carlo (DSMC, siglas en inglés) [23, 24] y las aproximaciones Automata de gas reticular (Lattice Gas Automata, LGA) [25] y Ecuación de Boltzmann

reticular (Lattice Boltzmann Equation, LBE) [26]. La primera de estas técnicas consiste en el seguimiento de las trayectorias de un gran número de partículas de forma simultánea, dentro de una región del espacio simulado, donde encontramos que las colisiones ocurren en cualquier tiempo del espacio entre cualquier par de partículas del sistema. En esencia, se requiere de los procedimientos probabilísticos para elegir el estado inicial del sistema, pero el procedimiento subsecuente es determinista.

La segunda técnica, es similar a la dinámica molecular en cuanto a que un gran número de partículas simuladas, se siguen de manera simultánea. La diferencia esencial está en que las colisiones intermoleculares son tratadas con una base probabilística más que determinista. Este método fue aplicado por primera vez por Bird, para el problema de relajación translacional en un gas homogéneo [27].

En principio, se puede realizar el estudio de la dinámica del gas enrarecido mediante técnicas de simulación en todo el rango de números de Knudsen, incluyendo el régimen del continuo; donde como hemos visto, el análisis se realiza mediante las ecuaciones de Navier-Stokes. Finalmente diremos que los métodos de simulación han sido usados principalmente en el régimen de transición.

Acercas de LBE, diremos que es una aproximación que se usa en problemas de dinámica de fluidos y que consiste en modelar de manera discreta un fluido. En ésta, la dinámica es usualmente descrita por una ecuación diferencial cinética, referida como la Lattice-Boltzmann Equation y que se plantea de forma discreta o discretizada. Por otro lado, la aparición de LGA fue motivada por la idea de realizar modelos completamente discretos de sistemas biológicos, relacionando la idea de espacios celulares. La idea es hallar una estructura lógica minimal y desarrollar una dinámica computacional lo suficientemente poderosa para simular sistema complejos. Este espacio simulado que se llama espacio celular, consiste de mallas que pueden ser triangulares, cuadradas, etc., con las que se *pinta* la evolución de células. En particular se proponen las reglas de colisión para los distintos tipos de mallas.

Por último mencionaremos que estos métodos han sido de utilidad al abordar problemas de dinámica de fluidos [26, 28, 29].

En la literatura podemos observar que los primeros trabajos acerca de la dinámica de gases enrarecidos fueron realizados a través de la teoría cinética [6], en donde la

ecuación de Boltzmann ha sido muy importante. En particular, cuando se abordan problemas de frontera y/o condiciones iniciales, a menudo se parte de la ecuación cinética de Boltzmann completa, lineal o de la aproximación BGK, modelando las fronteras por medio de una función de distribución de una partícula. Estas ecuaciones se resuelven de maneras diversas ya sea por algún método de momentos, soluciones numéricas, etc. [4, 7, 12, 14, 15, 17, 30, 31]. Un ejemplo de ello es el trabajo de Sharipov [32], donde calculó relaciones de reciprocidad de Onsager para un gas simple con enrarecimiento arbitrario y fuera de equilibrio, planteando la ecuación cinética de Boltzmann linealizada como la ecuación de evolución de las partículas. La solución de la ecuación cinética la obtuvo mediante un método variacional, donde se desarrolla una función de distribución alrededor de la función Maxwelliana en equilibrio total, suponiendo que las fronteras están en equilibrio local, y se modelan las paredes a través de una función de distribución, que toma en cuenta los procesos de intercambio de momento, energía y partículas con los alrededores, por medio de algunos coeficientes de acomodación.

Por otra parte, Lohöfer [33] propuso un modelo matemático de las fronteras donde tienen lugar las colisiones difusivas, especulares y el hecho de que las fronteras absorban partículas dejando esta información relevante en el kernel de colisión. En su trabajo Lohöfer aborda el problema para una mezcla multicomponente con reacciones químicas, en la región de flujo de deslizamiento. En su modelo involucra los coeficientes de acomodación de energía, momento, de conversión (de una especie en otra) y del coeficiente con el que se denota el que algunas partículas atraviesan la pared. Sin embargo, no muestra cómo debe normalizarse el kernel de colisión que usa, tampoco cómo está definida la fracción de partículas que logran atravesar la pared. Esto último no permite ver la fracción de partículas que emerge, ya sea en forma especular o difusiva. Al respecto, Cercignani [4] manifiesta que el kernel de colisión sólo se puede normalizar a la unidad si las paredes reflejan a todas las partículas sin haber reacciones químicas, así que en general el kernel de colisión debe estar normalizado con el parámetro que denote la probabilidad de que cierta fracción de partículas regrese al fluido después de chocar con la pared. De ahí que sea importante el presentar la normalización del kernel de colisión.

En este trabajo estamos interesados en realizar un estudio del gas enrarecido en la región de deslizamiento, donde los diferentes procesos que tienen lugar en las fronteras, como lo son el intercambio de momento y energía que ocurre entre el fluido y la pared son importantes. Sabemos por Maxwell [8] que en el caso general, la temperatura y velocidad del gas que se encuentra en la pared, no son iguales que aquellas que caracterizan a la frontera misma. Cuando se toma en cuenta la naturaleza de las colisiones entre las partículas de un gas enrarecido y la superficie frontera, vemos que se forma una capa delgada de gas adyacente a la pared, en el interior de esta capa de gas encontramos partículas que han sido reemitidas hacia el bulto con la temperatura y velocidad de la pared, así como también partículas que vienen del interior del gas o que han regresado de la pared sin intercambio de información más que el cambio de la dirección de la velocidad. Como un resultado de lo anterior, macroscópicamente se obtiene un salto de temperatura y una velocidad relativa cerca de la pared, ambas conteniendo las propiedades de la frontera [4, 34]. Es importante mencionar que las interacciones entre las partículas del gas y la pared, llegan a ser importantes sólo en el caso en que el gas sea lo suficientemente enrarecido y entonces el tratamiento hidrodinámico clásico no es adecuado.

Para nosotros, resulta de gran interés estudiar los efectos de la pared en el flujo laminar de un gas enrarecido, tomando como punto de partida la teoría cinética. En particular, se desea modelar el kernel de colisión que contenga la información acerca de la manera en que interactúan las partículas y la superficie frontera. La idea es proponer un modelo simple del kernel de colisión en términos de algunos de los coeficientes de acomodación considerando una frontera en movimiento donde es permitido el intercambio de momento, energía y moléculas con los alrededores. De esta manera estaremos en posición de calcular los valores frontera de las variables relevantes, tomando en cuenta la naturaleza de las interacciones que tienen lugar entre las partículas y la superficie frontera. Posteriormente a partir de estos valores, se calcula una expresión para la velocidad de deslizamiento, esta cantidad es de suma importancia debido a que depende fuertemente de la naturaleza de la pared.

Una vez que tenemos el modelo de las paredes, abordamos el problema llamado flujo Couette. Este problema que es el más simple de los flujos laminares, nos permite estudiar

el comportamiento de un fluido en presencia de una superficie frontera.

Básicamente el flujo Couette, se obtiene al poner un gas enrarecido entre dos planos paralelos infinitos que están en movimiento relativo con una velocidad constante \mathbf{u}_w , induciendo un flujo en el fluido a lo largo de la dirección de la velocidad de las paredes. Ambas superficies son planas y están separadas por una distancia constante, y en general la temperatura de cada placa puede ser diferente.

En relación al flujo Couette, varios son los trabajos en donde se ha estudiado el flujo laminar para números de Knudsen cercanos a la unidad. En algunos de estos trabajos el análisis se realiza partiendo de una ecuación cinética, que se resuelve a través de diversos métodos tales como método de soluciones elementales [35], método variacional [4, 32] o mediante algún método numérico [36-38]. En otros trabajos el estudio se lleva a cabo a través del método de Montecarlo [24, 39] o por medio de la dinámica molecular [40].

El estudio que realizaremos, será llevado a cabo mediante un esquema donde las variables relevantes corresponden a la aproximación de Grad en trece momentos [2, 41-43]. Ésto significa que tanto el flujo de calor, como el tensor viscoso juegan un papel importante en la descripción. Ahora bien, esto significa que será necesario contar con ecuaciones que describen su evolución y con condiciones de frontera adecuadas, en este trabajo los valores de estas variables físicas en la frontera se calcularán a través del modelo de las paredes. Hacemos notar que este tipo de aproximación es híbrida ya que va a contener tanto una parte hidrodinámica como una cinética, de hecho se piensa usar algún tipo de ecuaciones del continuo junto con condiciones de frontera calculadas a partir de una forma cinética. Es necesario mencionar que, H. Grad [41] en 1949 calculó los valores en la frontera para la componente oblicua del tensor viscoso simétrico sin traza P_{xz} y la componente normal a la superficie del flujo de calor q_z en la aproximación de trece momentos, mediante el modelo de Maxwell para el kernel de colisión. Él encontró que P_{xz} tiene una fuerte dependencia en la velocidad de deslizamiento y también que q_z depende de forma directa del salto de temperatura, sin embargo, Grad en su trabajo original, no tomó en cuenta el movimiento de la superficie frontera, además de que no consideró paredes porosas. Estas dos últimas características planeamos tomarlas en cuenta en nuestra aproximación.

La distribución de este trabajo es la siguiente: en el capítulo 1 está contenida la introducción. En el capítulo 2 mostramos cuales son las ecuaciones de evolución para las variables importantes en la descripción de nuestro sistema en particular. En el capítulo 3, se modela la forma en que interactúan las partículas del gas con una superficie sólida, después de esto se procede a calcular los valores frontera de las cantidades físicas, flujo de calor y tensor viscoso simétrico sin traza.

Para observar cuáles son los alcances del modelo de fronteras que empleamos, abordamos el problema llamado flujo Couette, la descripción de éste y el cálculo matemático queda contenido en el capítulo 4. En el capítulo 5, abordamos el problema flujo Couette generalizado, el cual básicamente consiste en un flujo laminar que fluye entre dos placas paralelas, expuesto a un gradiente de presiones externo. En el capítulo 6, realizamos una discusión general de los resultados que obtuvimos, además mencionamos algunas perspectivas que observamos para este trabajo de tesis. Finalmente, se incluyen tres apéndices en donde mostramos cálculos concernientes a la obtención del perfil de velocidad, alguna información acerca de las aproximaciones LBE y LGA, y la nomenclatura empleada en este trabajo.

Capítulo 2

Ecuaciones de evolución

Se realiza un estudio del gas enrarecido simple, partiendo de la teoría cinética donde se plantea la ecuación de Boltzmann, como la ecuación de evolución de las partículas que constituyen al fluido. A través de esta ecuación se derivan las ecuaciones de balance de las variables conservadas. Además, se discute la solución de la ecuación cinética en la aproximación de trece momentos de Grad. Mediante esta solución y la ecuación de Boltzmann, se calculan las ecuaciones de evolución para las cantidades que relajan, flujo de calor y tensor viscoso simétrico sin traza, junto con lo anterior, en este capítulo mostramos las definiciones cinéticas de las variables dinámicas que son relevantes en este nivel de aproximación.

2.1 Modelo cinético

El estudio del comportamiento de un gas monoatómico enrarecido se realizará a partir de la ecuación de Boltzmann, donde el conocimiento de la función de distribución de una partícula, permite evaluar las características del sistema.

Sea $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t)d\mathbf{r}d\mathbf{c}$ el número de puntos representativos de las partículas en el espacio hexadimensional (\mathbf{r}, \mathbf{c}) , con posición en el intervalo $(\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r})$ y velocidad molecular en el intervalo $(\mathbf{c}, \mathbf{c} + d\mathbf{c})$ al tiempo t ; la ecuación que describe la evolución de las partículas es la ecuación de Boltzmann, que escribimos como

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) + \mathbf{c} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) = J(f, f), \quad (2.1)$$

donde, el lado izquierdo de la ecuación se conoce como el término de arrastre y contiene la variación explícita en el tiempo de la función de distribución, la razón de cambio de $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t)$ como resultado del movimiento molecular y la contribución de una fuerza externa \mathbf{F} .

Por otra parte, en el lado derecho de la ecuación (2.1), $J(f, f)$ cuantifica el cambio en el número de partículas en un volumen fase $d\mathbf{c}d\mathbf{r}$ debido a las colisiones entre las partículas. Para escribir de forma sencilla y explícita este término, se hacen algunas hipótesis, que de hecho limitan la validez de la ecuación de Boltzmann al régimen de baja densidad; a saber: las colisiones entre partículas ocurren por pares y las velocidades de dos partículas son estadísticamente independientes. Es decir, si dos partículas están en un mismo volumen del espacio de configuración $d\mathbf{r}$, una de ellas se mueve con velocidad \mathbf{c} y la otra con velocidad \mathbf{c}' , entonces la función de distribución de dos partículas se factoriza como

$$f_2(\mathbf{r}, \mathbf{c}, \mathbf{c}'; t)d\mathbf{c}d\mathbf{c}' = f_1(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t)f_1(\mathbf{r}, \mathbf{c}'; t)d\mathbf{c}d\mathbf{c}'. \quad (2.2)$$

En la literatura, la ecuación (2.2) representa la expresión formal de la llamada hipótesis de *caos molecular*, misma que en los tratamientos típicos de la teoría cinética correspondería a la hipótesis de cerradura de la jerarquía BBGKY (Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood e Yvon) [2, 44].

De acuerdo con las hipótesis anteriores podemos escribir el operador de colisiones en la siguiente forma [2]

$$J(f, f) = \int \int [f(\mathbf{c}'_1)f(\mathbf{c}') - f(\mathbf{c}_1)f(\mathbf{c})]gW(\mathbf{k}|\mathbf{k}'; g)d\mathbf{k}'d\mathbf{c}_1, \quad (2.3)$$

donde \mathbf{c} , \mathbf{c}_1 son las velocidades antes de la colisión de las partículas que chocan y \mathbf{c}' , \mathbf{c}'_1 son las correspondientes a la etapa posterior a la colisión. Le hemos pintado el subíndice 1, a una de las velocidades de las partículas colisionantes para identificar una de la otra. Además, $g = |\mathbf{c} - \mathbf{c}_1|$ es el valor absoluto de la velocidad relativa correspondiente,

$$\mathbf{c} - \mathbf{c}_1 = g\hat{\mathbf{k}}, \quad \mathbf{c}' - \mathbf{c}'_1 = g'\hat{\mathbf{k}}'. \quad (2.4)$$

$\hat{\mathbf{k}}$ y $\hat{\mathbf{k}}'$ son los vectores unitarios en la dirección de las velocidades relativas antes y después de la colisión respectivamente, por último la cantidad $W(\hat{\mathbf{k}}|\hat{\mathbf{k}}'; g)$ es la sección transversal para cambiar la dirección de la velocidad relativa de $\hat{\mathbf{k}}$ a $\hat{\mathbf{k}}'$. El valor absoluto de la velocidad relativa de dos partículas sin estructura que chocan debe ser la misma antes y después de la colisión debido a que el choque por pares es elástico conservándose el ímpetu lineal y la energía cinética. Es importante recordar que la ecuación de Boltzmann escrita en la ecuación (2.1), sólo es válida para partículas monoatómicas (no hay grados de libertad internos), de manera que en una colisión sólo hay intercambio de ímpetu lineal y energía cinética. Debemos enfatizar que el kernel de colisión contiene la sección transversal y por tanto, dependerá del potencial intermolecular que actúa entre las partículas del gas. En el caso en que las partículas interactúen a través de un potencial esféricamente simétrico, la sección transversal sólo depende del ángulo de dispersión entre $\hat{\mathbf{k}}$ y $\hat{\mathbf{k}}'$ y de la magnitud de la velocidad relativa.

Hacemos notar que la ecuación de Boltzmann es una ecuación integrodiferencial que no es invariante ante inversiones temporales, es decir, que la ecuación cinética describe procesos irreversibles en el tiempo. Precisamente, la formulación cuantitativa de este hecho, está contenida en el llamado teorema H , el cual establece que

$$\frac{dH}{dt} \leq 0, \quad (2.5)$$

para la funcional H , que se define como

$$H(t) \equiv \int \int f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) [\ln f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) - 1] d\mathbf{r} d\mathbf{c}, \quad (2.6)$$

la condición (2.5) nos asegura que el gas alcanza el estado de equilibrio.

Por último, mencionamos que es posible deducir la ecuación de Boltzmann a partir de la ecuación de Liouville. En este trabajo sólo se anotan estas características con el objeto de dar un panorama somero de las propiedades de la ecuación de Boltzmann, pero en vista de que no se usarán explícitamente [2, 45], tampoco se discutirán las condiciones bajo las cuales dichas demostraciones se han hecho.

2.2 Ecuaciones de balance

Sabemos que la ecuación de Boltzmann es consistente con las ecuaciones de balance de las cantidades conservadas, masa, momento y energía total. Además, la densidad de masa, momento y energía, se pueden escribir en términos de promedios sobre la función de distribución, que satisface la ecuación cinética.

Aquí mostraremos a grandes rasgos, el camino que se sigue para mostrar la consistencia de las ecuaciones de conservación con la ecuación de Boltzmann [2, 45]. En primer lugar, se construye una ecuación de transporte generalizada para una función de la posición, las velocidades moleculares y el tiempo representada por $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$. La ecuación se obtiene multiplicando a la ecuación de Boltzmann por la función ψ e integrando respecto de las velocidades moleculares, de manera que

$$\int \psi \frac{\partial}{\partial t} f d\mathbf{c} + \int \psi \mathbf{c} \cdot \nabla f d\mathbf{c} + \int \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \psi \nabla_c f d\mathbf{c} = \int \psi(\mathbf{c}) J(f, f) d\mathbf{c}, \quad (2.7)$$

la ecuación (2.7) se puede escribir como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi f d\mathbf{c} - \int f \frac{\partial}{\partial t} \psi d\mathbf{c} + \nabla \cdot \int \psi \mathbf{c} f d\mathbf{c} - \int f \nabla \psi d\mathbf{c} + \int \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \psi \nabla_c f d\mathbf{c} = \int \psi(\mathbf{c}) J(f, f) d\mathbf{c}. \quad (2.8)$$

Si la fuerza externa es independiente de la velocidad, el último término del lado izquierdo de (2.8) puede simplificarse en la forma

$$\begin{aligned} \int \psi \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_c f d\mathbf{c} &= \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \int m \psi \nabla_c f d\mathbf{c}, \\ &= \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \left[\psi(\mathbf{c}) f \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int f \nabla_c \psi \right], \\ &= -\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot n \overline{\nabla_c \psi}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

donde el primer término se anula al suponer que la función de distribución f tiende a cero más rápido que ψ , cuando la velocidad es muy grande. Además hemos definido:

$$n \overline{\psi} = \int \psi(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) d\mathbf{c}, \quad (2.10)$$

que representa el promedio de ψ sobre la función de distribución y

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) d\mathbf{c}, \quad (2.11)$$

es la densidad numérica.

Lo que nos permite escribir la ecuación de transporte generalizada para la función $\psi(\mathbf{c})$ como

$$\frac{\partial n\bar{\psi}}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{c}\bar{\psi}) - n\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} - n\mathbf{c} \cdot \nabla \bar{\psi} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot n\nabla_{\mathbf{c}}\bar{\psi} = \int \psi(\mathbf{c})J(f, f)d\mathbf{c}. \quad (2.12)$$

el lado izquierdo de esta ecuación, se identifica como el promedio de la razón de cambio de la propiedad molecular del gas (ψ), debido al arrastre producido por el movimiento molecular y el lado derecho representa el cambio debido a las colisiones entre las partículas.

Si la función ψ corresponde a alguna cantidad que haga que el lado derecho de la ecuación (2.12) se anule, entonces a la función se le llama invariante colisional. En este caso, obtenemos como resultado una ecuación de conservación para el promedio de ψ .

Para entender mejor lo que sucede con el término de colisiones, si ψ es un invariante, escribimos este término de una manera más simple y conveniente. Básicamente, lo que hacemos es usar el hecho de que el impetu lineal y la energía cinética se conserven, que nos lleva a escribir $g = g'$. Lo anterior nos permite intercambiar las variables primadas con aquellas que no fueron marcadas, con esto en mente escribimos

$$\int \psi(\mathbf{c})J(f, f)d\mathbf{c} = \frac{1}{n} \int \int \int \psi(f'_1 f' - f_1 f)gW d\mathbf{k}' d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \quad (2.13)$$

y la expresión equivalente

$$\int \psi(\mathbf{c})J(f, f)d\mathbf{c} = \frac{1}{n} \int \int \int \psi'(f_1 f - f'_1 f')gW d\mathbf{k}' d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \quad (2.14)$$

Posteriormente, se suman las ecuaciones (2.13) y (2.14), y se hace uso de la relación que satisface el kernel de colisión W

$$W(\hat{\mathbf{k}}|\hat{\mathbf{k}}'; g) = W(\hat{\mathbf{k}}'|\hat{\mathbf{k}}; g), \quad (2.15)$$

que expresa la propiedad de la reversibilidad microscópica, y que se conoce como el balance detallado [2, 44], de lo anterior hallamos

$$\int \psi(\mathbf{c}) J(f, f) d\mathbf{c} = \frac{1}{2n} \int \int \int (\psi - \psi')(f'_1 f' - f_1 f) g W d\mathbf{k}' d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \quad (2.16)$$

Se procede de manera semejante para las partículas con el subíndice 1

$$\int \psi(\mathbf{c}) J(f, f) d\mathbf{c} = \frac{1}{2n} \int \int \int (\psi_1 - \psi'_1)(f' f'_1 - f f_1) g W d\mathbf{k}' d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}, \quad (2.17)$$

finalmente sumamos las ecuaciones (2.16) y (2.17) y obtenemos

$$\int \psi(\mathbf{c}) J(f, f) d\mathbf{c} = \frac{1}{4n} \int \int \int (\psi + \psi_1 - \psi' - \psi'_1)(f' f' - f_1 f) g W d\mathbf{k}' d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}. \quad (2.18)$$

Ahora bien, cuando la función ψ es un invariante colisional, se cumple que

$$\psi(\mathbf{c}) + \psi(\mathbf{c}_1) = \psi(\mathbf{c}') + \psi(\mathbf{c}'_1), \quad (2.19)$$

y en este caso el integrando de la ecuación (2.18) se anula.

En el caso particular en que $\psi = m$, hallamos que el lado derecho de la ecuación (2.12) se anula debido a que la masa permanece sin cambios aún después de una colisión entre las partículas, mientras que el lado izquierdo se reduce a la siguiente ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} nm + \nabla \cdot (\mathbf{u}_0 nm) = 0, \quad (2.20)$$

que es la ecuación de continuidad, donde

$$\mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int \mathbf{c} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) d\mathbf{c}, \quad (2.21)$$

es la velocidad promedio.

Por otra parte si $\psi = m\mathbf{C}$, donde $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u}_0$ es la velocidad peculiar, vemos que el término de colisiones en la ecuación (2.12) se anula nuevamente, lo cual es una consecuencia de la conservación del ímpetu lineal. Al sustituir $\psi = m\mathbf{C}$ en la ecuación de balance generalizada, escribimos

$$\frac{\partial nm\overline{\mathbf{C}}}{\partial t} - n\frac{\partial \overline{m\mathbf{C}}}{\partial t} + \nabla \cdot (n\overline{m\mathbf{C}}) - n\overline{\mathbf{c} \cdot \nabla m\mathbf{C}} - \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot n\overline{\nabla_c m\mathbf{C}} = 0, \quad (2.22)$$

simplicamos esta ecuación, desarrollando cada uno de los términos, y comenzamos por desarrollar los dos primeros términos de la ecuación

$$\begin{aligned} \int m\mathbf{C} \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{c} &= \frac{\partial nm\overline{\mathbf{C}}}{\partial t} - n\frac{\partial \overline{m\mathbf{C}}}{\partial t}, \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int nm\mathbf{C}f d\mathbf{c} - \int f \frac{\partial}{\partial t} (m\mathbf{C}) d\mathbf{c}, \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int nmf[\mathbf{c} - \mathbf{u}_0] d\mathbf{c} - \int mf \frac{\partial}{\partial t} [\mathbf{c} - \mathbf{u}_0] d\mathbf{c}, \\ &= nm \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial t}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

ya que

$$\int m\mathbf{C}f d\mathbf{c} = 0. \quad (2.24)$$

y

$$\int mf \frac{\partial}{\partial t} [\mathbf{c} - \mathbf{u}_0] d\mathbf{c} = -nm \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial t}.$$

Los dos términos siguientes se escriben,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \int nm\mathbf{C}f d\mathbf{c} &= \nabla \cdot (n\overline{m\mathbf{C}}) - n\overline{\mathbf{c} \cdot \nabla m\mathbf{C}}, \\ &= \nabla \cdot \int m[\mathbf{C} + \mathbf{u}_0]\mathbf{C}f d\mathbf{c} - \int [\mathbf{C} + \mathbf{u}_0] \cdot \nabla m\mathbf{C} d\mathbf{c}, \\ &= \nabla \cdot \int m\mathbf{C}\mathbf{C}f d\mathbf{c} + \nabla \cdot m\mathbf{u}_0 \int \mathbf{C}f d\mathbf{c} - \int m[\mathbf{C} + \mathbf{u}_0] \cdot f\nabla[\mathbf{c} + \mathbf{u}_0] d\mathbf{c}, \\ &= \nabla \cdot \mathbf{P} + nm\mathbf{u}_0 \cdot \nabla \mathbf{u}_0, \end{aligned} \quad (2.25)$$

donde

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \int m\mathbf{C}\mathbf{C}f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) d\mathbf{c}, \quad (2.26)$$

define al tensor de presiones.

El último término de (2.22) queda en la forma

$$\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot n \int m\mathbf{C}\nabla_c f d\mathbf{c} = -\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot n\overline{\nabla_c m\mathbf{C}},$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \int \nabla_c m[\mathbf{c} - \mathbf{u}_0] d\mathbf{c}, \\
&= -\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot nm\mathbf{I},
\end{aligned} \tag{2.27}$$

donde \mathbf{I} es un tensor unitario.

Posteriormente se sustituyen las ecuaciones (2.23) y (2.25) en la ecuación (2.22), y hallamos

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_0 \cdot \nabla \mathbf{u}_0 \right) = -\nabla p - \nabla \cdot \mathbf{P}^\circ + \frac{\rho}{m} \mathbf{F}, \tag{2.28}$$

que corresponde a la ecuación de balance del momento, donde $\rho = nm$ es la densidad de masa y

$$\mathbf{P}^\circ(\mathbf{r}, t) = \int m(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) d\mathbf{c}, \tag{2.29}$$

es el tensor viscoso sin traza que esta relacionado con el tensor de presiones \mathbf{P} . Recordemos que este último se puede separar en una parte diagonal y una parte sin traza, donde la primera es proporcional al tensor unitario \mathbf{I} , y se identifica con la presión hidrostática p y la segunda representa al tensor viscoso simétrico sin traza \mathbf{P}°

$$\mathbf{P} = p\mathbf{I} + \mathbf{P}^\circ. \tag{2.30}$$

La cantidad \mathbf{P}° tiene su origen en el movimiento del fluido, esto es, cuando las partículas se mueven con velocidades diferentes originan un movimiento relativo entre las distintas partes del fluido, dando lugar a la fricción interna [46].

Por último, si $\psi = \frac{1}{2}mC^2$, se obtiene que

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} \overline{(m/2)C^2} - n \frac{\partial}{\partial t} \overline{(m/2)C^2} + \nabla \cdot \overline{(\mathbf{c}n(m/2)C^2)} - n\mathbf{c} \cdot \nabla \overline{(m/2)C^2} \\
&\quad - \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot n \overline{\nabla_c (m/2)C^2} = 0,
\end{aligned} \tag{2.31}$$

el lado derecho de la ecuación (2.31) se anula debido a que la energía traslacional se conserva durante las colisiones binarias, mientras que el lado izquierdo, se reduce a una

ecuación de conservación.

Desarrollando los dos primeros términos

$$\begin{aligned}
\int (m/2)C^2 \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{c} &= \frac{\partial}{\partial t} \overline{(m/2)C^2} - n \overline{\frac{\partial}{\partial t} (m/2)C^2}, \\
&= \frac{\partial}{\partial t} \frac{3}{2} K_B n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t) - \int f m \mathbf{C} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} d\mathbf{c}, \\
&= \frac{\partial}{\partial t} \frac{3}{2} K_B n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t), \tag{2.32}
\end{aligned}$$

donde

$$\frac{3}{2} K_B n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) E(\mathbf{r}, t) = \int \frac{1}{2} m C^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) d\mathbf{c}, \tag{2.33}$$

es la definición de la temperatura local para un gas diluido, y K_B es la constante de Boltzmann. Es importante notar que debido a la naturaleza del sistema, es decir, ausencia de grados de libertad internos, la energía total sólo contiene la contribución de la energía cinética. Así, la temperatura viene a ser el promedio de esa energía.

Los dos términos siguientes, se escriben en términos de sus componentes

$$\begin{aligned}
\int (m/2) C_k C_k c_l \nabla_l f d\mathbf{c} &= \nabla_l \overline{(m/2) C_k C_k c_l} - n c_l \nabla_l \overline{(m/2) C_k C_k}, \\
&= \nabla_l \int [C_l + u_{0l}] \frac{m C_k C_k}{2} d\mathbf{c} - \int [C_l + u_{0l}] \nabla_l \frac{C_k C_k}{2} d\mathbf{c}, \\
&= \nabla_l \int [C_l + u_{0l}] \frac{m C_k C_k}{2} f d\mathbf{c} - \int f m C_k [C_l + u_{0l}] \nabla_l C_k d\mathbf{c}, \\
&= \nabla_l q_l + \nabla_l E n u_{0l} - \int m f [C_l + u_{0l}] C_k \nabla_l [c_k - u_{0k}] d\mathbf{c}, \\
&= \nabla_l q_l + \nabla_l E n u_{0l} + \int m f [C_l C_k \nabla_l u_{0k} + u_{0l} C_k \nabla_l u_{0k}] d\mathbf{c}, \tag{2.34}
\end{aligned}$$

donde

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = \int \left(\frac{m C^2}{2} - \frac{5 K_B T}{2} \right) \mathbf{C} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) d\mathbf{c}, \tag{2.35}$$

es la definición cinética del flujo de calor, que contiene sólo el transporte de la energía cinética en el gas.

Haciendo uso de las definiciones del tensor de presiones (2.26) y del flujo de calor (2.35), escribimos la expresión final de esta integral como

$$\int (m/2) \mathbf{C} \mathbf{C} \mathbf{c} \cdot \nabla f d\mathbf{c} = \nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot E n \mathbf{u}_0 + \mathbf{P} : (\nabla \mathbf{u}_0). \quad (2.36)$$

Finalmente, se revisa el último término de la ecuación (2.31)

$$\begin{aligned} -\frac{F_l}{m} n \overline{\nabla_{lc} f (m/2) C^2} &= -\frac{F_l}{m} \int f \nabla_{lc} \frac{m C^2}{2} d\mathbf{c}, \\ &= -F_l \int f C_k \nabla_{lc} C_k d\mathbf{c}, \\ &= -F_l \int f C_k \nabla_{lc} [c_k - u_{0k}] d\mathbf{c}, \\ &= -F_l \int f C_k \nabla_{lc} c_k d\mathbf{c}, \\ &= -F_l \int f C_k \delta_{lk} d\mathbf{c}, \\ &= 0, \end{aligned} \quad (2.37)$$

después de sustituir los desarrollos de cada uno de los términos en (2.31) y de reordenarlos, obtenemos la ecuación de balance de la energía

$$\frac{\partial}{\partial t} n E + \mathbf{u}_0 \cdot \nabla n E + n E \nabla \cdot \mathbf{u}_0 + (\nabla \cdot \mathbf{q}) + p(\nabla \cdot \mathbf{u}_0) - \mathbf{P}^\circ : (\nabla \mathbf{u}_0) = 0. \quad (2.38)$$

De esta manera, hemos visto como a partir de la ecuación cinética de Boltzmann y al utilizar las definiciones del tensor de presiones y flujo de calor se puede mostrar la consistencia entre la ecuación de Boltzmann y las ecuaciones de balance de las cantidades que se conservan.

Podemos observar que las ecuaciones (2.28) y (2.38), están escritas en términos de \mathbf{q} y \mathbf{P}° , cantidades cuya expresión cinética conocemos, pero que no están expresadas en términos de las variables promediadas (n , \mathbf{u}_0 , T).

Para poder estar en condición de realizar el estudio en el régimen hidrodinámico, sólo es necesario establecer ecuaciones constitutivas como la ley de Fourier y de Navier-Newton junto con las relaciones de simetría de Onsager [44, 46]. Situación que permitiría cerrar el sistema de ecuaciones para resolverlo si se tiene condiciones de frontera e iniciales.

En el caso en que se desee ir más allá de la región de la hidrodinámica clásica, debemos hallar expresiones más generales para el flujo de calor y el tensor de esfuerzos, un camino que podemos seguir es el hacer uso del método de Grad en la aproximación de trece momentos y encontrar las ecuaciones que gobiernan a las cantidades no conservadas.

2.3 La solución de la ecuación de Boltzmann

En la literatura se han desarrollado varios métodos para resolver en forma aproximada la ecuación de Boltzmann. El método de Chapman-Enskog y el método de Grad, tienen como fundamento el que un sistema que está fuera del equilibrio termodinámico evoluciona hacia él, de manera consistente con las restricciones impuestas macroscópicamente. Desde el punto de vista cinético, esta tendencia al estado de equilibrio (o equilibrio local) se manifiesta a través de la existencia del teorema H . Como se mencionó antes, éste garantiza la existencia del estado de equilibrio y la evolución del sistema hacia él.

Por otra parte, es importante señalar que la ecuación de Boltzmann por ser no-lineal, presenta dificultades importantes para encontrar una solución que además satisfaga adecuadamente condiciones de frontera e iniciales. Esto es importante para justificar el empleo de métodos aproximados que si bien no resuelven el problema completo si nos permiten avanzar en el estudio del comportamiento del sistema. Dicho esto, es natural que los métodos más usados para resolver la ecuación de Boltzmann tengan como punto de partida a la función de distribución Maxwelliana total (o local). Así tendremos que el sistema se describirá en estados cercanos al equilibrio total (o local) y las desviaciones a partir de éste, nos indicarán las características importantes del problema.

En este trabajo se describirá someramente el método de Chapman-Enskog y dedicaremos un espacio mayor al método de Grad debido a que los resultados de este trabajo se basan en él.

2.3.1 Método de Chapman-Enskog

Hemos señalado cual es la ecuación de Boltzmann y su relación con las ecuaciones de balance de las variables que se conservan. Para darle solución a esta ecuación cinética encontramos en la literatura diferentes métodos, uno de ellos es el llamado método de Chapman-Enskog [2, 43-45].

Dicho método (que fue abordado casi simultáneamente en 1916 - 17, por Hilbert,

Chapman y Enskog) consiste básicamente en tomar aproximaciones sucesivas a la función de distribución $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t)$.

Escribimos la ecuación de Boltzmann en la forma

$$Df = \frac{1}{\epsilon} J(f, f), \quad (2.39)$$

donde D es el operador de arrastre en la ecuación

$$Df = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f, \quad (2.40)$$

y $J(f, f)$ es el término de colisión, además, ϵ es el parámetro de uniformidad y se supone que es menor que la unidad ($\epsilon < 1$); este parámetro indica el orden de aproximación en que se está trabajando. El hecho de que dicho parámetro aparezca en el denominador significa para este caso, que las colisiones entre las partículas son dominantes en el comportamiento del sistema. Además, suponemos que la función de distribución admite un desarrollo en dicho parámetro, de manera que

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots \quad (2.41a)$$

$$= f^{(0)} \left(1 + \epsilon \phi^{(1)} + \epsilon^2 \phi^{(2)} + \dots \right). \quad (2.41b)$$

donde $f^{(0)}$ es la función de distribución Maxwelliana local

$$f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = n(\mathbf{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi K_B T(\mathbf{r}, t)} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{mC^2}{2K_B T(\mathbf{r}, t)} \right\}, \quad (2.42)$$

y las funciones $\phi^{(i)}$ miden la desviación del sistema con respecto al estado de equilibrio local, de hecho estas funciones deben de cumplir con

$$\int \phi^{(i)} f^{(0)} \psi d\mathbf{c} = 0, \quad (2.43)$$

que se conoce como la *condición subsidiaria*, donde ψ representa cada uno de los cinco invariantes de la colisión. Lo anterior se debe cumplir para todos los niveles de aproximación en el que se trabaje.

En este método se supone que la función de distribución depende del tiempo únicamente a través de las variables conservadas (n , \mathbf{u}_0 y E) y sus gradientes, esto es

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{c} | n(\mathbf{r}, t), \mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t), E(\mathbf{r}, t); \nabla n, \nabla \mathbf{u}_0, \nabla E, \dots), \quad (2.44)$$

esta hipótesis funcional se justifica si consideramos que la descripción es válida para tiempos mayores que el tiempo libre medio ($t \gg \tau$); de manera que sólo las variables conservadas sean relevantes. Obviamente esto limita la solución al régimen hidrodinámico y gradientes pequeños en las variables dinámicas. La sustitución de la función de distribución (2.41) junto con las hipótesis, en la ecuación de Boltzmann y su separación para cada orden en el parámetro de uniformidad, permitirán encontrar las soluciones aproximadas que se deseen.

En general, el operador de arrastre puede escribirse como

$$Df = (Df)^{(0)} + \epsilon(Df)^{(1)} + \epsilon^2(Df)^{(2)} + \dots, \quad (2.45)$$

y el término de colisiones como

$$\begin{aligned} J(f, f) = & J(f^{(0)}, f^{(0)}) + \epsilon \left\{ J(f^{(0)}, f^{(1)}) + J(f^{(1)}, f^{(0)}) \right\} + \\ & \epsilon^2 \left\{ J(f^{(0)}, f^{(2)}) + J(f^{(1)}, f^{(1)}) + J(f^{(2)}, f^{(0)}) \right\} + \dots \end{aligned} \quad (2.46)$$

hacemos notar que las ecuaciones que resultan de acuerdo con la aproximación en que se este trabajando, junto con la condición (2.43), especifican la unicidad de las funciones $\phi^{(i)}$.

Por otra parte, las expresiones del flujo de calor y del tensor de presiones, según la aproximación con la que se este trabajando son

$$\mathbf{q}^{(i)}(\mathbf{r}, t) = \int \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) \mathbf{C} f^{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (2.47)$$

$$\mathbf{P}^{(i)}(\mathbf{r}, t) = \int m \mathbf{C} \mathbf{C} f^{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (2.48)$$

En particular, cuando se considera el orden cero en el parámetro ϵ , es decir, hasta $f^{(0)}$ vemos que

$$J(f^{(0)}, f^{(0)}) = 0, \quad (2.49)$$

de lo que se obtienen las ecuaciones de Euler. Las expresiones para el flujo de calor y del tensor de presiones son

$$\mathbf{q}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.50)$$

$$\mathbf{P}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = p\mathbf{I}, \quad (2.51)$$

donde la presión hidrostática, cumple la ecuación local para gas ideal

$$p(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t)K_B T(\mathbf{r}, t), \quad (2.52)$$

debido a que el tensor viscoso se anula observamos que a orden cero, efectivamente tenemos un fluido de Euler.

Por otra parte, si tomamos la aproximación hasta $f^{(1)}$ se obtienen las ecuaciones de Navier-Stokes, la solución al siguiente orden en ϵ es decir hasta un nivel en la aproximación de $f^{(2)}$, conduce de manera directa a las ecuaciones constitutivas de Burnett [2, 44].

De lo anterior podemos decir, que el método de Enskog solo permite calcular desviaciones de la función de distribución Maxwelliana que están relacionadas con la no uniformidad del sistema, y que ésta, no es la solución más general de la ecuación de Boltzmann para sistemas en un estado arbitrario fuera del equilibrio. Por otra parte, mencionamos que en este método las funciones que denotan las perturbaciones de la distribución de Maxwell tienen un tiempo de relajación del orden del tiempo medio entre colisiones ($10^{-8} seg$). Lo que justifica la validez del método, ya que después de tales tiempos, macroscópicamente irrelevantes, la solución de la ecuación de Boltzmann puede aproximarse por la solución de Enskog [44, 45].

2.3.2 Método de Grad

Este método de solución se basa en la hipótesis de que el sistema se puede describir en términos de una función de distribución que es una desviación de la función de distribución Maxwelliana local. Dicha desviación se puede escribir como un desarrollo en términos de un conjunto completo y ortonormal de funciones. Éstas se construyen usando como función de distribución de peso a la Maxwelliana y dado el carácter tensorial de la variable independiente (velocidad), resultan ser los polinomios tensoriales de Hermite. En la literatura se discute con todo detalle como se generan y cuales son sus propiedades [41]. En el caso en que el desarrollo se realice alrededor de una función de distribución maxwelliana local, este método nos lleva de forma natural fuera de la región de la hidrodinámica usual, a diferencia del método de Chapman-Enskog que sólo es válido dentro de dicha región.

De acuerdo con lo discutido, se escribe la función de distribución como

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) = f^{(0)} \sum_s \frac{1}{s!} a_i^{(s)}(\mathbf{r}, t) H_i^{(s)}(\mathbf{c}), \quad (2.53)$$

donde $f^{(0)}$ es la función local de Maxwell, que se toma como función de peso para los polinomios de Hermite $H^{(s)}(\mathbf{c})$, en términos de los cuales se realizará el desarrollo. Estos polinomios forman un conjunto completo y son funciones de la velocidad peculiar sin dimensiones $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{C}}{\sqrt{\frac{k_B T}{m}}}$. Debido a que la velocidad es un vector tenemos que los polinomios resultantes son tensores del mismo orden que el polinomio correspondiente [41], los primeros términos de este conjunto tienen las expresiones siguientes:

$$\begin{aligned} H^{(0)} &= 1, \\ H_i^{(1)} &= v_i, \\ H_{ij}^{(2)} &= v_i v_j - \delta_{ij}, \\ H_{ijk}^{(3)} &= v_i v_j v_k - (v_i \delta_{jk} + v_j \delta_{ik} + v_k \delta_{ij}), \\ H_{ijkl}^{(4)} &= v_i v_j v_k v_l - (v_i v_j \delta_{kl} + v_i v_k \delta_{jl} + v_j v_k \delta_{il} + v_j v_l \delta_{ik} + v_k v_l \delta_{ij}) \\ &\quad + (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \end{aligned} \quad (2.54)$$

aquí, el superíndice indica el orden tensorial del polinomio correspondiente y δ_{ij} es la delta de Kronecker usual.

Por otra parte, las funciones $a^{(s)}(\mathbf{r}, t)$ de la ecuación (2.53) son los coeficientes del desarrollo y se les conoce como los momentos de Grad y en general son combinaciones de las variables físicas, de hecho

$$a^{(s)}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) H^{(s)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (2.55)$$

Los primeros términos del desarrollo de la función de distribución son

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) = f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) \left[\frac{1}{0!} a^{(0)} H^{(0)}(\mathbf{c}) + \frac{1}{1!} a_i^{(1)} H_i^{(1)}(\mathbf{c}) + \frac{1}{2!} a_{ij}^{(2)} H_{ij}^{(2)}(\mathbf{c}) + \frac{1}{3!} a_{ijk}^{(3)} H_{ijk}^{(3)}(\mathbf{c}) + \dots \right]. \quad (2.56)$$

Para cortar la serie encontramos que no hay un criterio bien establecido, lo que comúnmente se hace es parar hasta el número de momentos que se consideran relevantes y con ello obtener una cierta descripción fenomenológica.

En particular estamos interesados en ampliar el espacio de variables relevantes, elevando a ese rango al flujo de calor y tensor viscoso simétrico sin traza, por lo que es adecuado emplear la aproximación en trece momentos. Esta aproximación, que es la usual, consiste en cortar la serie hasta el término que involucra la traza de $a_{ijk}^{(3)}$ y despreciar los momentos de orden superior $a^{(n)} = 0$ para $n \geq 4$.

Las expresiones explícitas de los momentos se obtienen de manera inmediata al introducir la ecuación (2.54) en la ecuación (2.55), y de hacer uso de la ortonormalidad de los polinomios de Hermite [41], así

$$a^{(0)}(\mathbf{r}, t) = 1, \quad (2.57)$$

este valor de $a^{(0)}$ implica que el desarrollo de la función de distribución empieza con la maxwelliana local, además

$$a^{(1)}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.58)$$

nos indica que no hay velocidad de difusión, esto es de esperarse pues estamos considerando gas de una sola especie, en el caso en se trabaje con una mezcla de gases este mismo término será diferente de cero y es proporcional a la velocidad de difusión. El siguiente momento es

$$a_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}, t) = \frac{P_{ij}^s(\mathbf{r}, t)}{p}, \quad (2.59)$$

para $a_{ij}^{(2)}$ se ha hecho uso de la ecuación de estado del gas ideal $p = \rho RT$, misma que es válida debido a que los gases no tienen estructura y que estamos trabajando en el régimen de baja densidad.

El momento de tercer orden es

$$a_{ijk}^{(3)}(\mathbf{r}, t) = a_{ijk}^{\circ (3)} - \frac{2}{5}(q_i \delta_{jk} + q_j \delta_{ik} + q_k \delta_{ij}), \quad (2.60)$$

y en la aproximación de 13 momentos se toma el tensor simetrizado de tercer orden sin traza $a_{ijk}^{\circ (3)} = 0$.

Así, en la aproximación de trece momentos la función de distribución, puede escribirse en la forma,

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) \left[1 + \frac{m}{2pK_B T} \mathbf{P}^\circ(\mathbf{r}, t) : (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ + \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{C} \right], \quad (2.61)$$

observamos que la desviación de la función de distribución Maxwelliana, depende de \mathbf{P}° y \mathbf{q} que son los momentos relevantes para la descripción del sistema. Esta función de distribución es importante para nosotros ya que nos ofrece la ventaja de obtener información fuera de la región de la hidrodinámica usual y que pudiera ser relevante. Un ejemplo de ello, son las ecuaciones de relajación de las variables físicas: tensor de presiones \mathbf{P}° y flujo de calor \mathbf{q} , a partir de las cuales es posible encontrar ecuaciones constitutivas generalizadas que engloban las ecuaciones de Navier-Newton y de Fourier.

Es importante señalar que la función de distribución escrita en (2.61) será solución de la ecuación de Boltzmann cuando las variables relevantes que aparecen en ella satisfagan las ecuaciones de transporte que les corresponde. Más adelante tendremos oportunidad de insistir en este punto.

2.4 Ecuaciones de relajamiento para un gas simple

Cuando se realiza la descripción de un gas monoatómico a través de la aproximación de trece momentos de Grad, las variables que se consideran relevantes son: la densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$, las tres componentes de la velocidad hidrodinámica $\mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t)$, la temperatura $T(\mathbf{r}, t)$ (ó bien la energía $E(\mathbf{r}, t)$), las tres componentes del flujo de calor $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ y las cinco componentes independientes del tensor viscoso simétrico sin traza $\mathbf{P}^\circ(\mathbf{r}, t)$.

Las primeras cinco variables (ρ , \mathbf{u}_0 y T) corresponden a cantidades que se conservan en una colisión binaria entre las partículas que forman al sistema, en cambio, las otras ocho variables (\mathbf{q} , \mathbf{P}°) son cantidades que no se conservan y son llamadas variables de relajamiento. Se observa que las variables conservadas intervienen en la función de distribución Maxwelliana local mientras que las variables de relajamiento nos dan la contribución a la desviación de la función de distribución con respecto al equilibrio local.

Por un lado, la densidad de partículas, momento y temperatura satisfacen las ecuaciones de conservación que ya hemos visto en la sección (2.2), mientras que para las variables físicas \mathbf{q} y \mathbf{P}° , es necesario calcular las ecuaciones de evolución.

Un camino para hallar estas ecuaciones consiste en usar la ecuación (2.12) que en el fondo es la ecuación de Boltzmann, donde se toma $\psi = m(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ$ para hallar la ecuación del tensor de presiones simétrico sin traza [2, 43]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} nm \overline{(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ} - nm \frac{\partial \overline{(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ}}{\partial t} + \nabla \cdot nm \mathbf{c} \overline{(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ} - nm \mathbf{c} \cdot \nabla \overline{(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ} - \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot nm \overline{\nabla_c (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ} \\ = \int m (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ J(f, f) d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (2.62)$$

y $\psi = m \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C}$ para el flujo de calor [2, 43]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} m \overline{\left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C}} - n \frac{\partial}{\partial t} m \overline{\left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C}} - n \mathbf{c} \cdot \nabla m \overline{\left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C}} + \\ \nabla \cdot nm \mathbf{c} \overline{\left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot n \overline{\nabla_c m \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C}} \\ = \int m \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C} J(f, f) d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

El lado izquierdo de las ecuaciones (2.62) y (2.63) se evalúan de manera directa desarrollando cada uno de los términos que aparecen en ellas, empleando para ello la forma

explícita de la función de distribución de Grad de trece momentos [41]. Recordando que para este nivel de la aproximación $a_{ijk}^{(3)} = 0$.

Para obtener la ecuación de relajación para el tensor de presiones simétrico sin traza, se desarrollan por separado cada uno de los términos del lado izquierdo de la ecuación (2.62), y comenzamos con los dos primeros

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} nm \overline{(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ} - nm \frac{\partial \overline{(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ}}{\partial t} &= \int m (C_i C_j)^\circ \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{c}, \\
&= \frac{\partial}{\partial t} \int m (C_i C_j)^\circ d\mathbf{c} - \int f \left(\frac{\partial}{\partial t} m (C_i C_j)^\circ \right) d\mathbf{c}, \\
&= \frac{\partial P_{ij}^\circ}{\partial t} - \int f m \frac{\partial}{\partial t} \left(C_i C_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} C^2 \right) d\mathbf{c}, \\
&= \frac{\partial P_{ij}^\circ}{\partial t} - \int f m \left(-\frac{\partial u_{0i}}{\partial t} C_j - C_i \frac{\partial u_{0j}}{\partial t} + \frac{1}{3} \delta_{ij} C_k \frac{\partial u_{0k}}{\partial t} \right) d\mathbf{c}, \\
&= \frac{\partial P_{ij}^\circ}{\partial t}. \tag{2.64}
\end{aligned}$$

donde se emplearon las ecuaciones (2.24) y (2.26).

Para los siguientes dos términos, en componentes

$$\begin{aligned}
\nabla_l m c_l \overline{(C_i C_j)^\circ} - nm c_l \overline{\nabla_l (C_i C_j)^\circ} &= \\
&= \nabla_l \int m (C_i C_j)^\circ c_l f d\mathbf{c} - \int m f c_l \nabla_l (C_i C_j)^\circ d\mathbf{c}, \\
&= \nabla_l \int m (C_i C_j)^\circ (C_l + u_{0l}) f d\mathbf{c} - \int m f c_l \left[(\nabla_l C_i) C_j + C_i (\nabla_l C_j) - \frac{2}{3} \delta_{ij} C_k \nabla_l C_k \right] d\mathbf{c}, \tag{2.65}
\end{aligned}$$

las integrales de la ecuación (2.65) se resuelven por separado, la primera de ellas se simplifica de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
\nabla_l \int m (C_i C_j)^\circ (C_l + u_{0l}) f d\mathbf{c} &= \nabla_l \int m f \left(C_i C_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} C^2 \right) (C_l + u_{0l}) d\mathbf{c}, \\
&= \nabla_l S_{ijl} + \nabla_l P_{ij}^\circ u_{0l} + \nabla_l \int \left[-\frac{1}{3} \delta_{ij} C^2 \right] C_l d\mathbf{c}, \tag{2.66}
\end{aligned}$$

donde

$$S_{ijl} = \int m f C_i C_j C_l d\mathbf{c}, \quad (2.67)$$

finalmente haciendo uso de la ecuación (2.24) y de la definición cinética para el flujo de calor, ecuación (2.35), hallamos

$$\nabla_l \int m (C_i C_j)^\circ (C_l + u_{0l}) f d\mathbf{c} = \nabla_l S_{ijl} + \nabla_l P_{ij}^\circ u_{0l} + \nabla_l \left[-\frac{1}{3} \delta_{ij} (2q_l) \right]. \quad (2.68)$$

Ahora se desarrolla la segunda integral de la ecuación (2.65)

$$\begin{aligned} & \int m f c_l \left[(\nabla_l C_i) C_j + C_i (\nabla_l C_j) - \frac{2}{3} \delta_{ij} C_k \nabla_l C_k \right] d\mathbf{c} \\ &= - \int m f c_l \left[-(\nabla_l u_{0i}) - C_i (\nabla_l u_{0j}) + \frac{2}{3} \delta_{ij} C_k (\nabla_l u_{0k}) \right] \\ &= \int m f (C_l + u_{0l}) \left[(\nabla_l u_{0i}) C_j + C_i (\nabla_l u_{0j}) - \frac{2}{3} \delta_{ij} C_k (\nabla_l u_{0k}) \right] d\mathbf{c}, \\ &= \int m f \left[(\nabla_l u_{0i}) C_l C_j + C_l C_i (\nabla_l u_{0j}) - \frac{2}{3} \delta_{ij} C_l C_k (\nabla_l u_{0k}) \right] d\mathbf{c}, \end{aligned} \quad (2.69)$$

donde hemos usado la ecuación (2.24), si empleamos la definición cinética del tensor viscoso, hallamos

$$\begin{aligned} \int m f c_l \left[(\nabla_l C_i) C_j + C_i (\nabla_l C_j) - \frac{2}{3} \delta_{ij} C_k \nabla_l C_k \right] d\mathbf{c} &= (\nabla_l u_{0i}) P_{lj} + (\nabla_l u_{0j}) P_{li} \\ &\quad - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla_l u_{0k}) P_{lk}, \end{aligned} \quad (2.70)$$

enseguida sustituimos las ecuaciones (2.68) y (2.70) en la ecuación (2.65)

$$\begin{aligned} \int m (C_i C_j)^\circ \nabla_l c_l f d\mathbf{c} &= \nabla_l S_{ijl} - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla_l q_l) + (\nabla_l u_{0l}) P_{ij} + (u_{0l} \nabla_l) P_{ij} + (\nabla_l u_{0i}) p \delta_{lj} \\ &\quad + (\nabla_l u_{0j}) p \delta_{li} - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla_l u_{0k}) p \delta_{jk} + (\nabla_l u_{0i}) P_{lj} + (\nabla_l u_{0j}) P_{li} - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla_l u_{0k}) P_{lk}, \\ &= \nabla_l S_{ijl} - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla_l q_l) + (\nabla_l u_{0l}) P_{ij} + (u_{0l} \nabla_l) P_{ij} + 2p (\nabla \mathbf{u}_0)^\circ_{ij} + 2(P^\circ \cdot \nabla \mathbf{u}_0)_{ij}^\circ. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Se simplifica el último término de la ecuación (2.62)

$$\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot nm \overline{\nabla_c (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ} = -\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \int f \nabla_c (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ d\mathbf{c}, \quad (2.72)$$

en componentes

$$-\frac{F_l}{m} \int f \nabla_{lc} (C_i C_j)^\circ d\mathbf{c}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{F_l}{m} n \int f \nabla_{lc} m \left[C_i C_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} C^2 \right] d\mathbf{c}, \\
&= -F_l \int f \left[(\nabla_{lc} C_i) C_j + C_i (\nabla_{lc} C_j) - \frac{2}{3} \delta_{ij} C_k \nabla_{lc} C_k \right] d\mathbf{c}, \\
&= -F_l \int f \left[-(\nabla_{lc} u_{0i}) C_j - C_i (\nabla_{lc} u_{0j}) + \frac{2}{3} \delta_{ij} C_k (\nabla_{lc} u_{0k}) \right] d\mathbf{c}, \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{2.73}$$

donde hemos empleado la ecuación (2.24). De esta manera se sustituyen las ecuaciones (2.64) y (2.71) en la ecuación (2.62)

$$\frac{D}{Dt} P_{ij}^\circ + \nabla_l S_{ijl} - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla \cdot \mathbf{q}) - (\nabla \cdot \mathbf{u}_0) P_{ij}^\circ + 2p (\nabla \mathbf{u}_0)_{ij}^\circ + 2(P^\circ \cdot \nabla \mathbf{u}_0)_{ij}^\circ = \int m (C_i C_j)^\circ J(f, f) d\mathbf{c}. \tag{2.74}$$

Sólo falta calcular S_{ijl} , esto se realiza de tal manera que sea consistente con la aproximación en que estamos trabajando.

Para calcular S_{ijl} , comenzamos por escribir la expresión completa para el momento $a_{ijk}^{(3)}$

$$\begin{aligned}
n a_{ijk}^{(3)} &= \int [v_i v_j v_k - (v_i \delta_{ij} + v_j \delta_{ik} + v_k \delta_{ij})] f d\mathbf{c}, \\
&= \int \left[\left(\frac{m}{K_B T} \right)^{3/2} C_i C_j C_k - \left(\frac{m}{K_B T} \right)^{3/2} (C_i \delta_{ij} + C_k \delta_{ij}) \right] f d\mathbf{c} \\
&= \left(\frac{m}{K_B T} \right)^{1/2} \frac{1}{K_B T} S_{ijk}
\end{aligned} \tag{2.75}$$

Por otra parte escribimos $a_{ijk}^\circ{}^{(3)}$ como

$$a_{ijk}^\circ{}^{(3)} = a_{ijk}^{(3)} - \frac{1}{5} (a_{ill}^{(3)} \delta_{jk} + a_{jll}^{(3)} \delta_{ik} + a_{kll}^{(3)} \delta_{ij}), \tag{2.76}$$

sustituimos la ecuación (2.75) en la ecuación (2.76) y obtenemos

$$a_{ijk}^\circ{}^{(3)} = \frac{1}{p} \left(\frac{m}{K_B T} \right)^{1/2} S_{ijk} - \frac{2}{5p} \left(\frac{m}{K_B T} \right)^{1/2} (q_i \delta_{jk} + q_j \delta_{ik} + q_k \delta_{ij}), \tag{2.77}$$

debido a que en esta aproximación tomamos $a_{ijk}^\circ{}^{(3)} = 0$, entonces la ecuación anterior se simplifica, lo que nos permite resolver para S_{ijk} de manera directa

$$S_{ijk} = \frac{2}{5} (q_i \delta_{jk} + q_j \delta_{ik} + q_k \delta_{ij}), \tag{2.78}$$

que al aplicarle el operador ∇ , obtenemos

$$\begin{aligned}\nabla_l S_{ijl} &= \frac{2}{5} \nabla_l (q_i \delta_{jl} + q_j \delta_{il} + q_l \delta_{ij}), \\ &= \frac{2}{5} [\nabla_j q_i + \nabla_i q_j + (\nabla \cdot \mathbf{q}) \delta_{ij}],\end{aligned}\quad (2.79)$$

la ecuación (2.79) se puede escribir en una forma más simple, al sumar y restar por $\frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla \cdot \mathbf{q})$

$$\begin{aligned}\nabla_l S_{ijl} &= \frac{2}{5} [\nabla_j q_i + \nabla_i q_j + (\nabla \cdot \mathbf{q}) \delta_{ij}] - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla \cdot \mathbf{q}) + \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla \cdot \mathbf{q}), \\ &= \frac{4}{5} (\nabla \mathbf{q})_{ij}^{\circ} + \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla \cdot \mathbf{q}).\end{aligned}\quad (2.80)$$

Finalmente se sustituye la ecuación (2.80) en (2.74) y obtenemos la ecuación

$$\frac{\partial \mathbf{P}^{\circ}}{\partial t} + \mathbf{u}_0 \cdot \nabla \mathbf{P}^{\circ} + \frac{4}{5} (\nabla \mathbf{q})^{\circ} + 2p (\nabla \mathbf{u}_0)^{\circ} + (\nabla \cdot \mathbf{u}_0) \mathbf{P}^{\circ} + 2 [\mathbf{P}^{\circ} \cdot (\nabla \mathbf{u}_0)]^{\circ} = \int m (\mathbf{C} \mathbf{C})^{\circ} J(f, f) d\mathbf{c},\quad (2.81)$$

que corresponde a la ecuación de relajación para el tensor simétrico sin traza, faltando por simplificar el lado derecho de la ecuación, esto último lo realizaremos más adelante con un poco de detalle.

Por otra parte, para simplificar la ecuación de relajación para el flujo calor, se desarrollan los términos del lado derecho de la ecuación (2.63), los primeros dos términos son

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t} m \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C} - n \frac{\partial}{\partial t} m \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C} \\ &= \int \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) \mathbf{C} \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{c}, \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) \mathbf{C} f d\mathbf{c} - \int f \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) \mathbf{C} d\mathbf{c}, \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{q} - \int f \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) \left(-\frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial t} \right) d\mathbf{c} - \int f \mathbf{C} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) d\mathbf{c},\end{aligned}\quad (2.82)$$

debido a que es largo el desarrollo de la ecuación (2.82), ésta se simplifica a su vez término a término, de esta manera el segundo término se escribe como

$$\begin{aligned}
\int f \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) \left(-\frac{\partial u_{0i}}{\partial t} \right) d\mathbf{c} &= - \left(\frac{3}{2} n K_B T - \frac{5}{2} n K_B T \right) \left(\frac{\partial u_{0i}}{\partial t} \right) \\
&= p \left(\frac{\partial u_{0i}}{\partial t} \right).
\end{aligned} \tag{2.83}$$

A continuación se calcula la segunda integral de la ecuación (2.82)

$$\begin{aligned}
\int f \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i d\mathbf{c} &= \int f \left(m C_i \left(-\frac{\partial u_{0l}}{\partial t} \right) - \frac{5}{2} \frac{\partial K_B T}{\partial t} \right) C_i d\mathbf{c}. \\
&= P_{li} \frac{\partial u_{0l}}{\partial t},
\end{aligned} \tag{2.84}$$

donde hemos empleado las ecuaciones (2.24) y (2.26). Después de sustituir las ecuaciones (2.83) y (2.84) en la ecuación (2.82), hallamos que

$$\begin{aligned}
\int \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{c} &= \frac{\partial q_i}{\partial t} - p \frac{\partial u_{0i}}{\partial t} + p \left(\frac{\partial u_{0l}}{\partial t} \right) + P_{li}^\circ \frac{\partial u_{0l}}{\partial t}, \\
&= \frac{\partial q_i}{\partial t} + P_{li}^\circ \left(\frac{\partial u_{0l}}{\partial t} \right).
\end{aligned} \tag{2.85}$$

Los dos términos siguientes de la ecuación (2.63)

$$\begin{aligned}
&\overline{n c_l \nabla_l m \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] C_i} + \overline{\nabla_l n m c_l \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] C_i}, \\
&= \int \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i (\nabla_l c_l f) d\mathbf{c}, \\
&= \nabla_l \int \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i c_l f d\mathbf{c} - \int f c_l \nabla_l \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i d\mathbf{c},
\end{aligned} \tag{2.86}$$

por separado se desarrolla cada una de las integrales de la ecuación (2.86), la primer integral es

$$\begin{aligned}\nabla_l \int \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i c_l f d\mathbf{c} &= \nabla_l \int \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i (C_l + u_{0l}) f d\mathbf{c}, \\ &= \nabla_l Q_{il} + \nabla_l (q_i u_{0l}).\end{aligned}\quad (2.87)$$

donde

$$Q_{il} = \int \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i C_l f d\mathbf{c}.\quad (2.88)$$

Se desarrolla la segunda integral de (2.86)

$$\begin{aligned}\int f c_l \nabla_l \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i d\mathbf{c} &= \int f (C_l + u_{0l}) \left[\left(mC_k \nabla_l C_k - \frac{5}{2} \nabla_l K_B T \right) C_i + \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) \nabla_l C_i \right] d\mathbf{c}, \\ &= \int f (C_l + u_{0l}) \left[\left(-mC_k \nabla_l u_{0k} - \frac{5}{2} \nabla_l K_B T \right) C_i - \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) \nabla_l u_{0i} \right] d\mathbf{c}, \\ &= \int f \left\{ mC_l C_k C_i (\nabla_l u_{0k}) + mC_k C_l u_{0l} (\nabla_l u_{0k}) + C_l C_i \frac{5}{2} (\nabla_l K_B T) + u_{0l} C_i \frac{5}{2} (\nabla_l K_B T) \right. \\ &\quad \left. + C_l \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) (\nabla_l u_{0i}) + u_{0l} \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) (\nabla_l u_{0i}) \right\} d\mathbf{c} \\ &= S_{lki} (\nabla_l u_{0k}) + P_{ki} u_{0l} (\nabla_l u_{0k}) + \frac{5}{2} \left(\nabla_l \frac{K_B T}{m} \right) P_{li} + q_l (\nabla_l u_{0i}) - n K_B T u_{0l} (\nabla_l u_{0i}).\end{aligned}\quad (2.89)$$

donde se usaron las ecuaciones (2.24), (2.26), (2.35) y (2.67). Enseguida se sustituyen las ecuaciones (2.87) y (2.89) en la ecuación (2.86)

$$\begin{aligned}\int f c_l \nabla_l \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i d\mathbf{c} &= \nabla_l Q_{li} + \nabla_l (q_i u_{0l}) + S_{lki} (\nabla_l u_{0k}) + P_{ki} u_{0l} (\nabla_l u_{0k}) \\ &\quad + \frac{5}{2} \left(\nabla_l \frac{K_B T}{m} \right) P_{li} + q_l (\nabla_l u_{0i}) - n K_B T u_{0l} (\nabla_l u_{0i}),\end{aligned}\quad (2.90)$$

si se escribe el tensor viscoso en términos de la presión hidrostática p y del tensor simétrico sin traza P° , la ecuación anterior se simplifica

$$\begin{aligned}
\int f c_l \nabla_l \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_i d\mathbf{c} &= \nabla_l Q_{il} + \nabla_l (q_i u_{0l}) + S_{lki} (\nabla_l u_{0k}) + P_{ki}^\circ u_{0l} (\nabla_l u_{0k}) \\
&+ \frac{5}{2} \left(\nabla_l \frac{K_B T}{m} \right) P_{li}^\circ + \frac{5}{2} p \left(\nabla_l \frac{K_B T}{m} \right) + q_l (\nabla_l u_{0i}). \tag{2.91}
\end{aligned}$$

El último término de la ecuación (2.63)

$$\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot n \nabla_c \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C} = \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \int f \nabla_c \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C} d\mathbf{c},$$

en componentes

$$\begin{aligned}
&\frac{F_l}{m} \int f \nabla_d \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] C_i d\mathbf{c} \\
&= \frac{F_l}{m} \int f m C_k (\nabla_{lc} C_k) C_i d\mathbf{c} + \frac{F_l}{m} \int f \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] (\nabla_{lc} C_i) d\mathbf{c}, \\
&= \frac{F_l}{m} \int f m C_k (\nabla_{lc} c_k) C_i d\mathbf{c} + \frac{F_l}{m} \int f \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] (\nabla_{lc} c_i) d\mathbf{c}, \\
&= \frac{F_l}{m} \int f m C_k \delta_{lk} C_i d\mathbf{c} + \frac{F_l}{m} \int f \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \delta_{li} d\mathbf{c}, \\
&= \frac{F_l}{m} \int f m C_l C_i d\mathbf{c} + \frac{F_l}{m} \int f \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \delta_{li} d\mathbf{c}, \\
&= \frac{F_l}{m} P_{li} + \frac{F_i}{m} \frac{3}{2} n K_B T - \frac{F_i}{m} \frac{5}{2} n K_B T, \\
&= \frac{F_l}{m} p + \frac{F_l}{m} P_{li}^\circ - \frac{F_i}{m} p, \\
&= \frac{F_l}{m} P_{li}^\circ. \tag{2.92}
\end{aligned}$$

Por último se sustituyen las ecuaciones (2.85), (2.91) y (2.92) en la ecuación (2.63)

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial q_i}{\partial t} + P_{il}^\circ \left(\frac{\partial u_{0l}}{\partial t} \right) + \nabla_l Q_{il} + \nabla_l (q_i u_{0l}) + S_{lki} (\nabla_l u_{0k}) + P_{ki} u_{0l} (\nabla_l u_{0k}) + \frac{5}{2} \left(\nabla_l \frac{K_B T}{m} \right) P_{li} \\
&+ q_l (\nabla_l u_{0i}) - n K_B T u_{0l} (\nabla_l u_{0i}) - \frac{F_l}{m} P_{li}^\circ = \int m \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] C_i J(f, f) d\mathbf{c}. \tag{2.93}
\end{aligned}$$

Para calcular \mathcal{Q}_{ij} , recurrimos a la expresión del momento de cuarto orden $a_{ijkl}^{(4)}$

$$a_{ijkl}^{(4)} = \mathcal{Q}_{ijkl}/pRT - \frac{1}{p}(p_{ij}\delta_{kl} + p_{ik}\delta_{jl} + p_{il}\delta_{jk} + p_{jk}\delta_{il} + p_{jl}\delta_{ik} + p_{kl}\delta_{ij}) + (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \quad (2.94)$$

de acuerdo con la aproximación con la que estamos trabajando, $a_{ijkl}^{(4)} = 0$ [41]

$$\mathcal{Q}_{ijkl}/pRT = \frac{1}{p}(p_{ij}\delta_{kl} + p_{ik}\delta_{jl} + p_{il}\delta_{jk} + p_{jk}\delta_{il} + p_{jl}\delta_{ik} + p_{kl}\delta_{ij}) - (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \quad (2.95)$$

de esta manera la expresión para la contracción de \mathcal{Q}_{ijkl} , la escribimos como

$$\mathcal{Q}_{il} = RTP_{il}^{\circ}. \quad (2.96)$$

donde R es la constante de los gases. Posteriormente sustituimos la ecuación (2.96) en la ecuación (2.93) y obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_i}{\partial t} + u_{0l}(\nabla_l q_i) + P_{il}^{\circ} \left(\frac{Du_{0l}}{Dt} \right) + \frac{K_B T}{m} (\nabla_l P_{il}^{\circ}) + \frac{7}{2} \left(\nabla_l \frac{K_B T}{m} \right) P_{li}^{\circ} + \frac{5}{2} p \left(\nabla_i \frac{K_B T}{m} \right) \\ + q_i (\nabla_l u_{0l}) + \mathcal{S}_{lki} (\nabla_l u_{0k}) + q_l (\nabla_l u_{0i}) - \frac{F_l}{m} P_{li}^{\circ} = \int m \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] C_i J(f, f) d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (2.97)$$

Por otra parte, la expresión para \mathcal{S}_{lki} que se encuentra en la ecuación (2.78) se sustituye en (2.97) y hallamos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{u}_0 \cdot \nabla \mathbf{q} + \mathbf{P}^{\circ} \cdot \frac{D\mathbf{u}_0}{Dt} + RT(\nabla \cdot \mathbf{P}^{\circ}) + \frac{7}{2}(\nabla RT) \cdot \mathbf{P}^{\circ} + \frac{5}{2}p(\nabla RT) + \frac{4}{5}\mathbf{q} \cdot (\nabla \mathbf{u}_0)^{\circ} + \frac{5}{3}\mathbf{q}(\nabla \cdot \mathbf{u}_0) \\ - \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \mathbf{P}^{\circ} = \int m \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C} J(f, f) d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (2.98)$$

que es la ecuación para el flujo de calor.

Hacemos notar que las expresiones del lado derecho de las ecuaciones (2.81) y (2.98) son importantes, ya que están relacionadas con los coeficientes de transporte, por esta razón, hemos querido mostrar aparte y a grandes rasgos la manera en que se simplifican dichos términos. Para derivar los términos a los que nos hemos referido, se hace uso de las propiedades de simetría del sistema y de las propiedades de los polinomios de Hermite que intervienen [41], además de los paréntesis de colisión que se definen como

$$[F, G] = \int FI(G) d\mathbf{c}, \quad (2.99)$$

y que cumplen con algunas propiedades importantes, en particular

$$[F, G] = [G, F], \quad (2.100a)$$

$$[F, G] \geq 0, \quad (2.100b)$$

y

$$[F, G]^2 = [F, F][G, G], \quad (2.100c)$$

donde F y G son dos funciones cualesquiera de la velocidad molecular. Además, $I(G)$ es el operador integral linealizado en G , que se define como

$$n^2 I(G) \equiv \int \int f_1^{(0)} f^{(0)} (G_1 + G - G'_1 - G') g W d\mathbf{c}. \quad (2.101)$$

Estos paréntesis de colisión son importantes ya que guardan relación directa con las integrales de colisión $\Omega^{(r,s)}$, y en términos de estas cantidades se pueden escribir los coeficientes de transporte [43].

Enseguida mostramos la forma en que se emplean estas propiedades, con el fin de simplificar el lado derecho de la ecuaciones (2.81) y (2.98) [41, 43]. Comenzamos por escribir la función de distribución de Grad en la aproximación de trece momentos como

$$f = f^{(0)}(1 + \phi), \quad (2.102)$$

donde

$$\phi = \frac{m}{2pK_B T} \mathbf{P}^\circ : (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ + \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{C}, \quad (2.103)$$

se sustituye la expresión (2.102) en el término de colisiones

$$J(f, f) = \int \left(f_1^{(0)'} (1 + \phi_1') f^{(0)'} (1 + \phi') - f_1^{(0)} (1 + \phi_1) f^{(0)} (1 + \phi) \right) g W d\mathbf{c}, \quad (2.104)$$

debido a que se linealiza en ϕ y de que $f_1^{(0)} f^{(0)} = f_1^{(0)'} f^{(0)'}$, la integral de colisión se escribe como

$$\begin{aligned} J(f, f) &= \int f_1^{(0)} f^{(0)} [\phi_1' + \phi' - \phi_1 - \phi] g W d\mathbf{c} \\ &= -n^2 I(\phi). \end{aligned} \quad (2.105)$$

Se introduce la variable $\vec{\xi} = \sqrt{\frac{m}{2K_B T}} \mathbf{C}$, de esta manera escribimos

$$\begin{aligned}\phi &= \frac{m}{2pK_B T} \mathbf{P}^\circ : (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ + \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{C} \\ &= \frac{\mathbf{P}^\circ}{p} : (\vec{\xi}\vec{\xi})^\circ + \frac{2}{5p} \sqrt{\frac{2m}{K_B T}} \left(\xi^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \vec{\xi}.\end{aligned}\quad (2.106)$$

además

$$I(\phi) = \frac{\mathbf{P}^\circ}{p} : I((\vec{\xi}\vec{\xi})^\circ) + \frac{2}{5p} \sqrt{\frac{2m}{K_B T}} \mathbf{q} \cdot I\left(\left(\xi^2 - \frac{5}{2}\right) \vec{\xi}\right).\quad (2.107)$$

Para hallar el término de colisión para el tensor viscoso simétrico sin traza se sustituye la ecuación (2.105) en el lado derecho de (2.81) y se desarrollan cada uno de los términos.

En componentes

$$\begin{aligned}& \int m(C_i C_j)^\circ I(f, f) d\mathbf{c} \\ &= -n^2 m \int \frac{2K_B T}{m} (\xi_i \xi_j)^\circ I(\phi) d\vec{\xi} \\ &= -2np \int (\xi_i \xi_j)^\circ \left\{ \frac{P_{kl}^\circ}{p} I((\xi_i \xi_j)^\circ) + \frac{2}{5p} \sqrt{\frac{2m}{K_B T}} q_k I\left(\left(\xi^2 - \frac{5}{2}\right) \xi_k\right) \right\} d\vec{\xi} \\ &= -2np \left\{ \frac{P_{kl}^\circ}{p} [(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi_k \xi_l)^\circ] + \frac{2}{5p} \sqrt{\frac{2m}{K_B T}} q_k [(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi^2 - \frac{5}{2}) \xi_k] \right\},\end{aligned}\quad (2.108)$$

donde

$$\int (\xi_i \xi_j)^\circ q_k I\left(\left(\xi^2 - \frac{5}{2}\right) \xi_k\right) d\vec{\xi} = q_k [(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi^2 - \frac{5}{2}) \xi_k],\quad (2.109)$$

$$\int (\xi_i \xi_j)^\circ P_{kl}^\circ I((\xi_i \xi_j)^\circ) d\vec{\xi} = P_{kl}^\circ [(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi_k \xi_l)^\circ].\quad (2.110)$$

Ahora bien, debido a que estamos trabajando con un gas monoatómico, éste tendrá propiedades de isotropía, de manera que los paréntesis $[(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi^2 - 5/2) \xi_k]$ $[(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi_k \xi_l)^\circ]$ deben contener dicha simetría. Esto significa que $[(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi^2 - 5/2) \xi_k]$ debe ser proporcional al tensor isótropo de tercer orden más general (ξ_{ijk}) es el único de tercer orden) [43], además este tensor, que no hemos empleado hasta ahora, debe estar

simetrizado en los índices ij y la única forma de lograr esto, es que el paréntesis se anule. Por lo tanto

$$\begin{aligned}
\int m(C_i C_j)^\circ J(f, f) d\mathbf{c} &= -2np \frac{P_{kl}^\circ}{p} [(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi_k \xi_l)^\circ], \\
&= -2np \frac{P_{kl}^\circ}{p} [(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi_i \xi_j)^\circ] \left[-\frac{2}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} \right] \frac{1}{10}, \\
&= -\frac{8}{5} n P_{ij}^\circ \Omega^{(2,2)}, \tag{2.111}
\end{aligned}$$

donde el paréntesis $[(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi_k \xi_l)^\circ]$ se ha construido proporcional al tensor de cuarto orden isótropo, simetrizado en ij, kl y sin traza, además el factor de proporcionalidad es

$$[(\xi_i \xi_j)^\circ, (\xi_i \xi_j)^\circ] = 4\Omega^{(2,2)}. \tag{2.112}$$

En la referencia [43] podemos encontrar con más detalle, todos estos desarrollos.

Por otra parte, para el flujo de calor tenemos

$$\begin{aligned}
&\int m \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_k J(f, f) d\mathbf{c} \\
&= -n^2 \sqrt{\frac{2K_B T}{m}} K_B T \int (\xi^2 - 5/2) \xi_k I(\phi) d\mathbf{c} \\
&= -np \sqrt{\frac{2K_B T}{m}} \int (\xi^2 - 5/2) \xi_k \left\{ \frac{P_{kl}^\circ}{p} I((\xi_i \xi_j)^\circ) + \frac{2}{5p} \sqrt{\frac{2m}{K_B T}} q_l I((\xi^2 - 5/2) \xi_l) \right\} d\mathbf{c} \\
&= -np \sqrt{\frac{2K_B T}{m}} \left\{ \frac{P_{kl}^\circ}{p} [(\xi^2 - 5/2) \xi_k, (\xi_i \xi_j)^\circ] + \frac{2}{5p} \sqrt{\frac{2m}{K_B T}} q_l [(\xi^2 - 5/2) \xi_k, (\xi^2 - 5/2) \xi_l] \right\}. \tag{2.113}
\end{aligned}$$

donde

$$\int (\xi^2 - 5/2) \xi_k P_{kl}^\circ I((\xi_i \xi_j)^\circ) d\vec{\xi} = P_{kl}^\circ [(\xi^2 - 5/2) \xi_k, (\xi_i \xi_j)^\circ], \tag{2.114}$$

$$\int (\xi^2 - 5/2) \xi_k q_l I((\xi^2 - 5/2) \xi_l) d\vec{\xi} = q_l [(\xi^2 - 5/2) \xi_k, (\xi^2 - 5/2) \xi_l], \tag{2.115}$$

debido a la condición de isotropía, vemos que la primera integral se anula, de esta manera escribimos

$$\begin{aligned}
& \int m \left(\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right) C_k J(f, f) d\mathbf{c} \\
&= -np \sqrt{\frac{2K_B T}{m}} \frac{2}{5p} \sqrt{\frac{2m}{K_B T}} q_l \left[(\xi^2 - 5/2)\xi_k, (\xi^2 - 5/2)\xi_l \right], \\
&= -\frac{4}{5} n q_l \left[(\xi^2 - 5/2)\xi_k, (\xi^2 - 5/2)\xi_l \right], \\
&= -\frac{16}{15} n q_k \Omega^{(2,2)}, \tag{2.116}
\end{aligned}$$

donde

$$\left[(\xi^2 - 5/2)\xi_k, (\xi^2 - 5/2)\xi_k \right] = \frac{4}{3} \Omega^{(2,2)}. \tag{2.117}$$

Finalmente, escribimos las expresiones simplificadas del lado derecho de las ecuaciones (2.81) y (2.98) como

$$\int m (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ J(f, f) d\mathbf{c} = -\frac{8}{5} n \Omega^{(2,2)} \mathbf{P}^\circ = -\frac{1}{\tau_p} \mathbf{P}^\circ. \tag{2.118}$$

y

$$\int \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5}{2} K_B T \right] \mathbf{C} J(f, f) d\mathbf{c} = -\frac{16}{15} n \Omega^{(2,2)} \mathbf{q} = -\frac{1}{\tau_q} \mathbf{q}, \tag{2.119}$$

donde se han definido los tiempos característicos de \mathbf{q} y \mathbf{P}° , en términos de las integrales de colisión $\Omega^{(2,2)}$ [2, 43]

$$\tau_q = \frac{\eta}{p}, \quad \tau_p = \frac{2m\lambda}{5K_B p}, \tag{2.120}$$

donde η y λ son la viscosidad cortante y la conductividad térmica respectivamente [43], cuyas expresiones son

$$\eta = \frac{5}{8} \frac{K_B T}{\Omega^{(2,2)}}, \quad \lambda = \frac{75}{32} \frac{K_B^2 T}{m \Omega^{(2,2)}}. \tag{2.121}$$

Las cantidades $\Omega^{(r,s)}$ se encuentran tabuladas en la literatura [2]. En algunos casos se pueden evaluar analíticamente, por ejemplo para el potencial de esfera dura y esferas de Maxwell, este último corresponde a aquellas moléculas que interactúan a través del potencial $V(r) = \epsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{-4}$, donde r es la separación molecular, σ es el diámetro de las moléculas y ϵ es una constante que tiene que ver con la energía.

Para esfera dura tenemos

$$\Omega^{(2,2)} = \left(\frac{K_B T}{2\pi m}\right)^{1/2} 2\pi\sigma^2, \quad (2.122)$$

y para moléculas de maxwell

$$\Omega^{(2,2)} = (0.308) \left(\frac{2\epsilon}{m}\right)^{1/2} \left(\frac{15}{8}\right) \pi\sigma^2. \quad (2.123)$$

Un aspecto importante de las ecuaciones (2.81) y (2.98), es que a partir de ellas es posible obtener las ecuaciones constitutivas de Navier-Newton y Fourier respectivamente [2, 43]. Esto es, en el caso en que estén involucrados tiempos que se acerquen al límite hidrodinámico (tiempos grandes), tenemos que $t \gg (\tau_p, \tau_q)$, es decir, el flujo de calor y el tensor viscoso relajan después de un tiempo τ_q, τ_p a las ecuaciones constitutivas de Navier-Newton y Fourier respectivamente. De esta manera se recuperan las ecuaciones constitutivas del límite hidrodinámico,

$$\mathbf{P}^\circ(\mathbf{r}, t) = -2\eta(\nabla \mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t))^\circ, \quad (2.124)$$

y

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = -\lambda(\nabla T(\mathbf{r}, t)). \quad (2.125)$$

En una descripción en términos de las variables conservadas (5 momentos), las ecuaciones constitutivas de Navier-Newton y Fourier, ecuaciones (2.124) y (2.125) respectivamente, se sustituyen en las ecuaciones de balance de la sección anterior quedando un conjunto cerrado de ecuaciones. Estas constituyen la base para la hidrodinámica usual y a su vez hemos visto que son válidas sólo en el caso en que los tiempos sean mayores que los tiempos de relajamiento τ_q, τ_p . En la literatura [2] ya se ha señalado que dichos tiempos son del mismo orden de magnitud ($3.89 \times 10^{-10} \text{ seg}$, empleando Argón a 303.5 K, para el potencial de esferas duras).

Cuando se tiene interés por estudiar la región fuera de la hidrodinámica clásica, un camino que podemos seguir es considerar más variables que las conservadas y por ello hemos construido las ecuaciones de evolución temporal para los trece momentos. Estas ecuaciones tienen las características de las ecuaciones de relajamiento, además de una dependencia espacial en gradientes de todas las variables relevantes, conservadas y de relajamiento y no sólo en gradientes de las variables conservadas como ocurre en el método de Chapman Enskog. En contraste, el método de Grad no limita la dependencia de la función de distribución a las variables conservadas y ello conduce a que ésta dependa de variables de relajamiento y que las ecuaciones de evolución puedan depender de los gradientes de todas ellas. Tal y como se observa en el conjunto de ecuaciones siguiente

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\mathbf{u}_0 \rho) &= 0, \\
\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_0 \cdot \nabla \mathbf{u}_0 \right) &= -\nabla p - \nabla \cdot \mathbf{P}^\circ + \frac{\rho}{m} \mathbf{F}, \\
\frac{\partial}{\partial t} n E + \mathbf{u}_0 \cdot \nabla n E + E \nabla \cdot \mathbf{u}_0 &= -(\nabla \cdot \mathbf{q}) - p(\nabla \cdot \mathbf{u}_0) + \mathbf{P}^\circ : (\nabla \mathbf{u}_0), \\
\frac{\partial \mathbf{P}^\circ}{\partial t} + \mathbf{u}_0 \cdot \nabla \mathbf{P}^\circ + \frac{4}{5} (\nabla \mathbf{q})^\circ + 2p(\nabla \mathbf{u}_0)^\circ + (\nabla \cdot \mathbf{u}_0) \mathbf{P}^\circ + 2[\mathbf{P}^\circ \cdot (\nabla \mathbf{u}_0)]^\circ &= -\frac{8}{5} n \Omega^{(2,2)} \mathbf{P}^\circ, \\
\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{u}_0 \cdot \nabla \mathbf{q} + \mathbf{P}^\circ \cdot \frac{D \mathbf{u}_0}{Dt} + RT(\nabla \cdot \mathbf{P}^\circ) + \frac{7}{2} (\nabla RT) \cdot \mathbf{P}^\circ + \frac{5}{2} p(\nabla RT) + \frac{4}{5} \mathbf{q} \cdot (\nabla \mathbf{u}_0)^\circ + \frac{5}{3} \mathbf{q} (\nabla \cdot \mathbf{u}_0) \\
-\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \mathbf{P}^\circ &= -\frac{16}{15} n \Omega^{(2,2)} \mathbf{q}. \tag{2.126}
\end{aligned}$$

Como ya se ha mencionado, el objetivo de este trabajo es realizar un estudio del gas enrarecido cuando están presentes superficies frontera, por ello necesitamos contar con las ecuaciones que gobiernan el comportamiento de las variables relevantes, además de los valores en la frontera de dichas cantidades. Para calcular los valores en la frontera necesitamos un modelo de la pared que nos permita realizar los cálculos correspondientes, por ello en el siguiente capítulo mostramos los valores de frontera del tensor de presiones y del flujo de calor.

Capítulo 3

Condiciones de frontera

Se propone un modelo de fronteras que permita estimar la interacción de las partículas de un gas enrarecido con una superficie sólida. La descripción se realiza mediante una función de distribución para una partícula en la que se utiliza el kernel de dispersión Maxwelliano, en el cual se toma en cuenta el intercambio de energía, momento y partículas con los alrededores, a través de algunos coeficientes de acomodación.

Nuestro interés radica en calcular las condiciones de frontera adecuadas, que muestren la relación entre las características macroscópicas del gas cerca de una frontera sólida y los parámetros con los que se denotan las propiedades de la superficie. A través del modelo de fronteras, se realizan los cálculos que permiten obtener los valores de frontera de las variables físicas que consideramos relevantes en la aproximación de los trece momentos de Grad. Las expresiones que hallamos involucran la llamada velocidad de deslizamiento y el salto de temperatura [3, 7].

3.1 Las condiciones de deslizamiento

En el caso en que la trayectoria libre media l es mucho menor que alguna longitud característica macroscópica L , entonces las condiciones de frontera que normalmente se emplean son aquellas que se conocen como condiciones de pegado.

Por otro lado, cuando se da la situación en que la razón $\frac{l}{L}$ ya no es tan pequeña, tenemos que las condiciones de frontera deben ser reconsideradas. Para esta situación sucede que en el interior de un gas enrarecido, a una distancia de varias veces la trayectoria libre media desde la pared, se supone que los gradientes de velocidad y temperatura son constantes, estos gradientes dejan de ser constantes sólo en la vecindad inmediata de la frontera, donde las colisiones entre las partículas del gas y la pared son relevantes. Para este tipo de flujos, el gas adyacente a la frontera no tiene la misma temperatura que la pared misma, de igual manera pasa con la velocidad del fluido, que puede poseer una velocidad distinta a la de la frontera [3, 7, 12, 47].

En la interface entre la pared sólida y el gas adyacente a ella, tiene lugar lo que se conoce como el salto de temperatura y la velocidad de deslizamiento, que se definen como la diferencia entre la temperatura o velocidad de la pared y la temperatura o velocidad que tiene el gas en la pared, y que viene de una extrapolación de la curva de estas cantidades más allá de la capa de Knudsen. Como ya habíamos mencionado, a este tipo de flujos, se les llama flujo de deslizamiento, que corresponde a un gas con un enrarecimiento moderado cuyo comportamiento no está muy alejado del de un gas en el régimen del continuo.

En la figura (3.1), podemos ver un esquema cualitativo de los perfiles de la velocidad o de temperatura de un gas enrarecido cerca de una pared, donde la línea sólida representa el comportamiento verdadero de estas magnitudes. Observamos que en una distancia menor que la trayectoria libre media (l), los gradientes de velocidad y temperatura son no constantes (son grandes), debido a las variaciones en el flujo de energía y momento que son generadas por la pared, lo que provoca que aparezca la línea curva que presenta la gráfica. Para distancias mayores que el recorrido libre medio desde la frontera, se supone que el perfil de estas cantidades es casi lineal, ligeramente inclinado debido a que la influencia de la pared va disminuyendo.

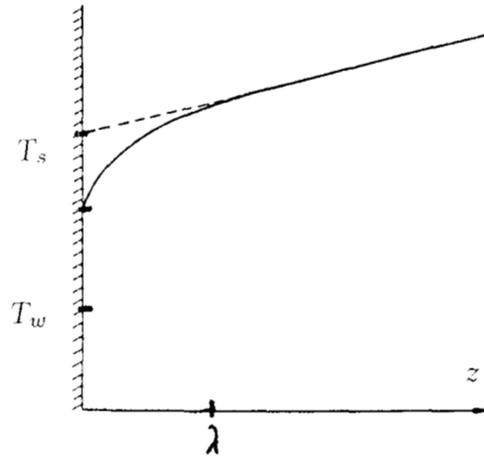


Figura 3.1: Perfil de temperatura en la capa de Knudsen, donde se observa el comportamiento de la temperatura en las cercanías de una superficie frontera y la aproximación de deslizamiento que se realiza con la línea discontinua. z es la posición normal a la pared

Por otro lado, en una distancia menor que la trayectoria libre media, se realiza la extrapolación del segmento de línea hasta la pared misma (con una línea discontinua), con el fin de establecer las condiciones de frontera de deslizamiento.

El deslizamiento de un gas sobre las paredes, fue una interpretación que realizaron Kund y Warburg [5, 47], Ellos notaron que la rapidez del flujo a través de tubos a muy baja presión, era considerablemente mayor que la que se predice por la teoría y atribuyeron esta diferencia al deslizamiento del fluido en la frontera. De manera semejante, Smoluchowski describió el salto de temperatura [47].

La velocidad de deslizamiento a la que nos hemos referido, se escribe como

$$u_0 - u_w = \zeta_v \left(\frac{dv}{dz} \right), \quad (3.1)$$

y el salto de temperatura

$$T_s - T_w = \zeta_T \left(\frac{dT}{dz} \right), \quad (3.2)$$

donde z es la variable normal a la frontera, ζ_v y ζ_T son las distancias de deslizamiento o también llamados coeficientes de deslizamiento y de salto de temperatura respectivamente. El primero de ellos, mide la tendencia del gas a resbalar sobre una pared sólida en presencia de gradientes de velocidad, y el segundo, mide la tendencia del gas a tener una temperatura diferente a la de la pared.

En la ecuación (3.1) la velocidad ficticia $u_0 - u_w$ es la velocidad de deslizamiento, donde u_w es la velocidad de la pared y u_0 es la velocidad promedio que el gas tendría en la pared, si los gradientes de velocidad en el interior del gas fueran constantes hasta la pared misma. Por otra parte, en la ecuación (3.2) T_w es la temperatura de la pared y T_s es la temperatura del gas en la pared (el mismo argumento que el de la velocidad). Finalmente a la diferencia $T_s - T_w$ se le llama salto de temperatura.

Se observa en la figura (3.1), que fuera de la capa de Knudsen la velocidad y la temperatura en la aproximación de deslizamiento coinciden con los perfiles de velocidad y temperatura reales. En algunos trabajos, la influencia de esta capa es considerada como una corrección a la función de distribución, obviamente esto a un nivel cinético [17, 30, 48]. De hecho, las diferencias de la aproximación del deslizamiento con la aproximación del continuo, son ligeras, por ello las condiciones de frontera de deslizamiento son pequeñas correcciones a las condiciones de frontera de pegado [3].

En nuestro caso, construiremos las condiciones de frontera propias al régimen de flujo de deslizamiento, a través del modelo de fronteras que se describe por medio de una función de distribución de una partícula. Para realizar lo anterior, comenzaremos por discutir la manera en que se tomarán en cuenta las características propias de una pared sólida, para ello, introduciremos la probabilidad de colisión o también llamada kernel de colisión \mathcal{R} . La idea es que a partir de un punto de vista cinético, se establezca una relación entre los parámetros que caracterizan a una frontera sólida y la función de distribución de una partícula, con la que se pretende realizar promedios.

3.2 Kernel de dispersión

Cuando se plantea el problema de describir a un nivel cinético el flujo de un gas en presencia de una superficie sólida que lo limita, se encuentran diversas dificultades. En primer lugar, tenemos que la ecuación de Boltzmann debe acompañarse por las condiciones de frontera adecuadas para la función de distribución de una partícula. Estas condiciones de frontera deberán contener la información acerca de las interacciones entre las partículas

del gas y la pared y resultan difíciles de plantear debido a la falta de caracterización de la estructura de la superficie sólida, esta falta de información nos impide saber cual es la naturaleza de las interacciones gas-pared. En principio, cuando las partículas del gas inciden sobre una superficie sólida pueden ser absorbidas y provocar enlaces químicos, ionizarse ó simplemente desplazar partículas que se encuentran en la superficie. De hecho la naturaleza de estas interacciones tiene que ver directamente con el tipo de gas con el que se trabaja y de la forma de la superficie, junto con la temperatura a la que ésta se encuentre.

Para efectuar la descripción cinética del gas es necesario construir la función de distribución de una partícula, ésta depende de la velocidad molecular, la posición y el tiempo. Cuando la pared está presente, las colisiones de las partículas del gas en ella son importantes, si una partícula del gas con velocidad \mathbf{c}' choca con la pared y luego emerge con velocidad \mathbf{c} , tendremos que encontrar una relación entre \mathbf{c}' y \mathbf{c} , misma que dependerá de la interacción que haya tenido lugar entre la partícula y la pared. El cálculo preciso de esta relación está fuera del alcance de un modelo sencillo y por ello se prefiere usar un enfoque probabilístico. Para hacerlo resulta conveniente emplear una función \mathcal{R} (que llamaremos kernel de colisión), con la que se denote la probabilidad de que una partícula al colisionar con la pared con velocidad entre \mathbf{c}' y $\mathbf{c}' + d\mathbf{c}'$ en el punto \mathbf{r} y al tiempo t , emerja o salga rebotada de la pared, prácticamente en el mismo punto \mathbf{r} con velocidad entre \mathbf{c} y $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ después de un intervalo de tiempo τ .

La idea es proponer un modelo matemático de las interacciones que tienen lugar entre las partículas del gas y la superficie sólida, a través de una función de distribución de una partícula en términos de \mathcal{R} ; la relación que existe entre la función de distribución y el kernel de colisión se describe a continuación.

Consideremos las partículas que inciden contra una superficie \mathcal{A} con una velocidad entre \mathbf{c}' y $\mathbf{c}' + d\mathbf{c}'$ en el intervalo de tiempo $t - \tau$ y $t - \tau + dt$

$$d\mathcal{M}'(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t - \tau) = f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t - \tau) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| dt d\mathcal{A} d\mathbf{c}, \quad (3.3)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector unitario normal al elemento de superficie $d\mathcal{A}$ en \mathbf{r} y dirigido de la pared hacia el gas, $|\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| dt d\mathcal{A}$ es el volumen de un elemento de volumen con base $d\mathcal{A}$

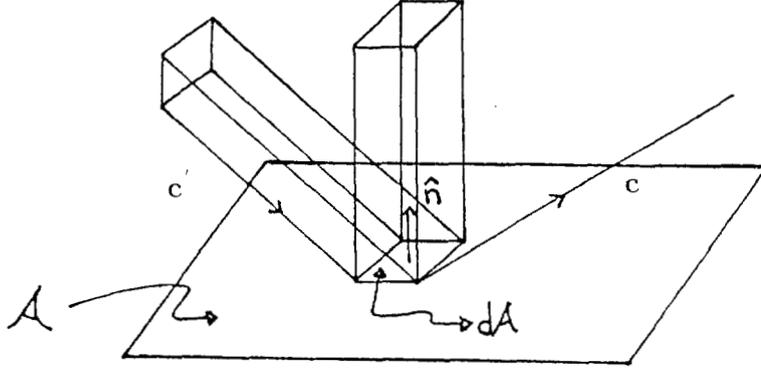


Figura 3.2: Colisiones entre las partículas y la pared

y longitud $|\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}|dt$ que es la distancia que viajan las partículas con velocidad \mathbf{c}' en el intervalo dt y que llega a dA ; por otra parte $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t - \tau)d\mathbf{c}'$ es la probabilidad de que se tengan partículas con velocidad \mathbf{c}' entre \mathbf{c}' y $\mathbf{c}' + d\mathbf{c}'$.

De manera análoga, las partículas que viajan con velocidad entre \mathbf{c} y $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ después de colisionar con un elemento de área dA en la pared alrededor del punto \mathbf{r} en el intervalo de tiempo t y $t + dt$ se escribe como

$$d\mathcal{M}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|dt dA d\mathbf{c}. \quad (3.4)$$

Por otro lado, consideramos que

$$\mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t; \tau) d\mathbf{c} d\tau, \quad (3.5)$$

es la densidad de probabilidad de que las partículas que viajan con una velocidad entre \mathbf{c}' y $\mathbf{c}' + d\mathbf{c}'$ colisionen con la pared y cambien su velocidad a una comprendida en el intervalo \mathbf{c} y $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ con un tiempo de absorción entre τ y $\tau + d\tau$.

Si se multiplica la ecuación (3.3) por la función \mathcal{R} y se integra sobre todos los posibles valores de \mathbf{c}' y τ , se obtienen las partículas que emergen de la pared $d\mathcal{M}$

$$\int \int f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t - \tau)|\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}|\mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t; \tau) d\mathbf{c} d\tau dt dA d\mathbf{c}' = f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|d\mathbf{c} dt dA, \quad (3.6)$$

lo que nos permite escribir

$$d\mathcal{M}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \int_0^\infty \int_{\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t, \tau) d\mathbf{c} d\tau d\mathcal{M}'(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t - \tau). \quad (\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0) \quad (3.7)$$

Después de igualar las ecuaciones (3.4) y (3.7) y de eliminar los factores comunes, obtenemos

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) |\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}| = \int_0^\infty \int_{\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t - \tau) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t, \tau) d\tau d\mathbf{c}', \quad (\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0) \quad (3.8)$$

que es la función de distribución de las partículas que abandonan la pared después de interactuar con ella, y que está escrita en términos de la función de distribución de las partículas que inciden sobre la superficie del sólido.

Esta ecuación se puede simplificar en el caso de que la dependencia de τ en la función \mathcal{R} puede eliminarse, para lo cual necesitamos definir una cantidad adimensional que nos cuantifique la influencia de la pared.

Supongamos que queremos el orden de magnitud de los términos que intervienen en (3.3): n es la densidad numérica del gas, \bar{c}_n la componente normal de la velocidad promedio de las partículas que llegan a la pared, $\bar{\tau}$ el promedio de los tiempos de absorción de partículas y σ_0 el radio efectivo para la interacción de una partícula en la pared. Entonces $\bar{c}_n \bar{\tau} \pi \sigma_0^2$ es un volumen típico asociado a la interacción y $n(\bar{c}_n \bar{\tau} \pi \sigma_0^2)$ es una cantidad adimensional que nos da la fracción de la superficie sólida ocupada por partículas en un gas. Para bajas densidades ($n \bar{c}_n \bar{\tau} \pi \sigma_0^2 \ll 1$), tenemos que la fracción de la superficie que será ocupada por las partículas incidentes será muy pequeña, lo que nos permite suponer que cada partícula interactúa con la superficie independientemente de las otras.

Por otra parte, si el tiempo de absorción efectivo $\bar{\tau}$ y la densidad numérica son pequeños tales que $\bar{c}_n \bar{\tau} \pi n \sigma^2 \ll 1$, la dispersión de una partícula por la pared puede considerarse instantánea y los eventos son estadísticamente independientes, de manera que el kernel de colisión $\mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t, \tau)$ no depende de la función de distribución $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$. Además, si $\bar{\tau}$ es muy pequeño comparado con cualquier tiempo característico de interés en la evolución de la función de distribución de las partículas incidentes, entonces podemos eliminar τ de f en la ecuación (3.8), de esta manera escribimos

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}| = \int_{\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| d\mathbf{c}', \quad (3.9)$$

donde

$$\mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t) = \int_0^x \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t, r) dr, \quad (3.10)$$

En suma, si los tiempos de absorción y la densidad promedio son pequeños, de tal manera que las interacciones entre las partículas del gas y la pared, sean instantáneas e independientes, entonces la relación entre la función de distribución de una partícula y el kernel de colisiones se puede escribir en una forma lineal. Aún así, la forma explícita del kernel de colisión contiene elementos de la interacción entre las partículas del gas y la pared.

3.3 El modelo de Maxwell

En la literatura, podemos hallar diversos modelos del kernel de dispersión [4, 49-51], el más conocido es el modelo que propuso Maxwell para una pared no porosa en reposo [8]. Maxwell en su trabajo supuso que la pared era una superficie sólida sin grandes accidentes, de tal manera que se podía considerar totalmente lisa, y que las colisiones con la pared ocurren de forma especular y difusiva.

Supongamos que las partículas de la pared están descritas por una función de distribución Maxwelliana de equilibrio, asociada a una temperatura T_w y con velocidad promedio nula. Si la partícula del gas quedara en equilibrio térmico con la pared cambiaría su velocidad a $\sqrt{RT_w}$ (R es la constante de los gases), sin embargo sabemos que la partícula emerge de la pared con velocidad \mathbf{c} , así $\left(\theta \frac{\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\sqrt{RT_w}}\right)$ es la fracción de rapidez transferida entre la pared y la partícula. Esto significa que θ mide la probabilidad de que la partícula adquiriera la velocidad $\sqrt{RT_w}$ y quede termalizada. La cantidad así construida multiplicada por f_w mide la densidad de probabilidad para la contribución difusiva. En el modelo de Maxwell se tiene esta contribución y la parte especular que estará medida por $(1 - \theta)$ multiplicada por la condición de reflexión especular, que se traduce a una condición sobre la velocidad. De manera que el kernel queda en la forma

$$\mathcal{R}(\mathbf{r}, t, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) = (1 - \theta)\delta(\mathbf{c}' - \mathbf{c} + 2\hat{\mathbf{n}}[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{c}]) + \theta f_w \frac{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|}{\sqrt{RT_w}}, \quad (3.11)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector normal a la superficie frontera, f_w es la función de distribución Maxwelliana

$$f_w = \frac{1}{2\pi(RT_w)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{m(\mathbf{c})^2}{2K_B T_w}\right\}$$

y δ es la delta de Dirac, cuyo argumento denota que el efecto de la colisión con la pared cambia sólo el signo de la componente normal de la velocidad molecular, mientras que las componentes tangentes permanecen sin cambios

$$\begin{aligned} \mathbf{c}' - \mathbf{c} + 2\hat{\mathbf{n}}[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{c}] &= (c'_x - c_x, c'_y - c_y, c'_z - c_z) + 2c_z \hat{\mathbf{n}} \\ &= (c'_x - c_x, c'_y - c_y, c'_z - (-c_z)). \end{aligned} \quad (3.12)$$

θ es un parámetro fenomenológico que introdujo Maxwell, para tomar en cuenta la fracción de partículas evaporadas difusivamente, a menudo se le llama el coeficiente de acomodación debido a que éste expresa la tendencia del gas a acomodarse al estado de la pared.

De acuerdo con las condiciones de frontera de Maxwell, la componente tangencial del momento y la energía cinética de las moléculas que emergen de la pared, se ven afectadas por la velocidad y la temperatura de la frontera, y en parte por el momento y la energía cinética de las partículas incidentes.

Si en la ecuación (3.11) tomamos $\theta = 0$, las partículas que emergen de la pared sienten un potencial repulsivo infinito, no penetran y todas se reflejan especularmente. Esto es, cuando las partículas del gas enrarecido interactúan sólo de forma especular con una superficie plana e infinita, la componente de la velocidad normal a la superficie cambia de signo, mientras que las componentes tangenciales permanecen igual

$$\mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) = \delta(c'_x - c_x, c'_y - c_y, c'_z - (-c_z)), \quad (3.13)$$

este modelo se escribe en términos de una función de distribución como,

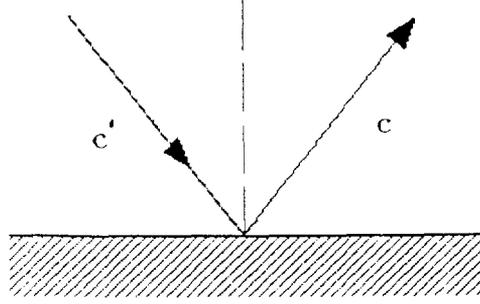


Figura 3.3: Colisión especular

$$\begin{aligned}
 f^-(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t) &= \frac{1}{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|} \int_{\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| d\mathbf{c}', \\
 &= \frac{1}{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|} \int_{\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} \delta(c'_x - c_x, c'_y - c_y, c'_z + c_z) f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| d\mathbf{c}', \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

de lo que obtenemos

$$f^+(c_x, c_y, c_z) = f^-(c_x, c_y, -c_z), \quad (\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0) \quad (3.15)$$

donde f^+ es la función de distribución de las partículas incidentes y f^- es la función de distribución de las partículas que emergen de la pared y $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector unitario normal a la superficie frontera.

Por otro lado, si $\theta = 1$ las partículas que emergen de la pared, presentan pérdida completa de memoria del haz incidente. Es decir, cuando las partículas incidentes chocan sólo de manera difusiva con la pared, se supone que la distribución de las partículas reflejadas es independiente de la distribución de las partículas incidentes, y específicamente ésta es una maxwelliana con la misma temperatura de la pared T_w . Para esta situación el kernel de dispersión se expresa como

$$\mathcal{R}(\mathbf{r}, t, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) = f_w \frac{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|}{\sqrt{RT_w}}, \quad (3.16)$$

en términos de una función de distribución para una partícula, tenemos

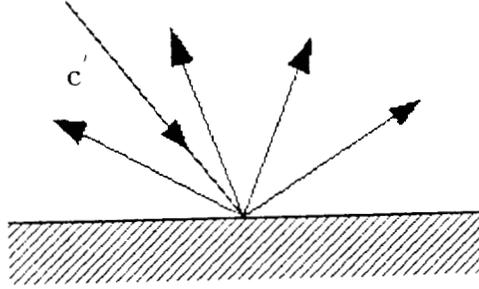


Figura 3.4: Colisión difusiva

$$\begin{aligned}
 f^-(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) &= \frac{1}{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|} \int_{\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}, \mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| d\mathbf{c}', \\
 &= \frac{1}{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|} \int_{\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} f_w \frac{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|}{\sqrt{RT_w}} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| d\mathbf{c}', \\
 &= \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} \int_{\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| d\mathbf{c}', \tag{3.17}
 \end{aligned}$$

si ahora definimos

$$M^- \equiv \int_{\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| d\mathbf{c}' \tag{3.18}$$

como el flujo de partículas normal a la superficie frontera, resulta que

$$f^+(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \frac{M^-}{2\pi(RT_w)^2} \text{Exp}\left(-\frac{mC_w^2}{2K_B T_w}\right), \quad (\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0) \tag{3.19}$$

donde T_w es la temperatura local de la frontera y $\mathbf{C}_w = \mathbf{c}$, es la velocidad peculiar de las partículas en la pared, en el caso en que esta última esté en reposo.

Debemos mencionar que el kernel de colisión escrito en (3.11), cumple con tres propiedades importantes, una de ellas es que está normalizado a la unidad

$$\int \mathcal{R}(\mathbf{r}, t, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) d\mathbf{c} = 1, \quad (\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0) \tag{3.20}$$

ya que todas las partículas regresan al bulto, además,

$$\mathcal{R}(\mathbf{r}, t, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) \geq 0, \quad (3.21)$$

y finalmente, satisface la ley de reciprocidad o también llamada balance detallado

$$|\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| f(\mathbf{c}') \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) = |\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}| f(\mathbf{c}) \mathcal{R}(-\mathbf{c} \rightarrow -\mathbf{c}'), \quad (\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0, \mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0) \quad (3.22)$$

que quiere decir, que si el gas está en equilibrio con la pared a temperatura T_w , el número de partículas con velocidad entre \mathbf{c}' y $\mathbf{c}' + d\mathbf{c}'$ dispersadas a una velocidad entre \mathbf{c} y $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$, es igual al número de partículas con velocidad entre $-\mathbf{c}$ y $-\mathbf{c} - d\mathbf{c}$ dispersadas a cualquier velocidad entre $-\mathbf{c}'$ y $-\mathbf{c}' - d\mathbf{c}'$ [4].

En la literatura podemos hallar varias propuestas interesantes para el kernel de dispersión. Un modelo que va más allá del alcance del kernel de Maxwell, es el modelo que propuso Carlo Cercignani [4]. En la propuesta de Cercignani se considera un modelo un poco más físico de una frontera, se calcula el kernel de colisión a partir de la dinámica de una partícula capturada por la pared. La idea es calcular una expresión analítica del kernel de colisión en términos de parámetros que puedan ser medidos de forma experimental u obtenidos de manera independiente. Este modelo ofrece la ventaja de obtener información acerca de las componentes tangenciales de las velocidades de las partículas, la distancia de penetración por parte de las partículas en el interior de la pared, además, en éste se introducen algunas distancias características que tienen que ver con la penetración de las partículas en el espacio de velocidades cuando interactúan con la superficie frontera. El modelo del kernel de dispersión al que nos referimos, se escribe como

$$\mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) = \frac{c_n}{2\pi (RT_w)^2} \frac{(1 - e^{-4d/l_t})}{(1 - e^{-4d/l_n})} \text{Exp} \left[-\frac{(c_t - c'_t e^{-2d/l_t})^2}{2RT_w (1 - e^{-4d/l_t})} - \frac{(c_n^2 + c_n'^2 e^{-4d/l_n})}{2RT_w (1 - e^{-4d/l_n})} \right] \\ I_0 \left[\frac{c_n c'_n}{RT_w} \frac{e^{-2d/l_n}}{(1 - e^{-4d/l_n})} \right], \quad (c'_n < 0; c_n > 0) \quad (3.23)$$

donde $I_0(x)$ es la función de Bessel modificada de primer tipo y orden cero, d es una distancia de penetración, l_n y l_t son las longitudes características relacionadas con la difusión

de Maxwell.

Hemos querido presentar este modelo para el kernel de dispersión, debido a que ofrece la oportunidad de trabajar con situaciones diversas.

Otro modelo interesante del kernel de colisión, es el propuesto por Lohöfer [33]. Con este modelo se calcula una corrección de las condiciones de frontera para la velocidad y temperatura en el régimen de Navier-Stokes, donde se modela la forma en que interactúan las partículas de una mezcla multicomponente con la superficie frontera. En este modelo se toman en cuenta las colisiones especulares y difusivas, así como también, la fracción de partículas que se convierten de una especie a otra, a través de algunos coeficientes de acomodación.

Finalmente mencionaremos que en la literatura podemos hallar diversos modelos del kernel de colisión, y que en general, cuando se propone un modelo matemático del kernel de colisión, se presenta el problema de manejar expresiones complejas que involucran diversos parámetros. Por lo general estos parámetros no tienen un significado físico, es decir no están relacionados con cantidades físicas, tales como la temperatura, la densidad numérica de los átomos que constituyen a la pared, la masa del gas, la intensidad y el alcance de la fuerza de interacción, entre otros. Por lo que es necesario plantear un modelo más físico de la superficie frontera, para obtener una mejor información acerca de los procesos de intercambio que pueden presentarse entre el gas y la pared.

3.4 Coeficiente de acomodación

Los coeficientes de acomodación a menudo están relacionados con los modelos del kernel de colisión, pues a través de estas cantidades se toma en cuenta la manera en que interactúan las partículas de un gas con una superficie. De hecho todos los modelos de flujo de gas enrarecido están estrechamente conectados con la interacción gas-pared. Si bien esta forma de modelar las interacciones no es del todo detallada, nos brinda un camino práctico para introducir información experimental en el modelo.

Si se desea tener una definición formal del coeficiente de acomodación $\theta(\psi)$, para cualquier función de velocidad molecular $\psi(\mathbf{c})$ [4], se puede recurrir a la expresión siguiente

$$\theta(\psi(\mathbf{c})) = \frac{\Phi^- - \Phi^+}{\Phi^- - \Phi_w^+}, \quad (3.24a)$$

donde el numerador de la ecuación (3.24a) es la diferencia entre el flujo incidente de la función ψ ($\Phi^- = \int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} < 0} \psi(\mathbf{c}) |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| f^-(\mathbf{c}) d\mathbf{c}$) y el flujo de la misma función que emerge ($\Phi^+ = \int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} > 0} \psi(\mathbf{c}) |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| f^+(\mathbf{c}) d\mathbf{c}$), después de interactuar con la frontera. Por otro lado, el denominador de la ecuación, es la diferencia entre el flujo incidente de la función ψ y el flujo reflejado ($\Phi_w^+ = N \int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} > 0} \psi(\mathbf{c}) |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| f_w(\mathbf{c}) d\mathbf{c}$) proveniente de una pared perfectamente difusiva Φ_w^- . La ecuación para el coeficiente de acomodación, puede escribirse también como

$$\theta(\psi(\mathbf{c})) = \frac{\int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} < 0} \psi(\mathbf{c}) |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| f^-(\mathbf{c}) d\mathbf{c} - \int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} > 0} \psi(\mathbf{c}) |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| f^+(\mathbf{c}) d\mathbf{c}}{\int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} < 0} \psi(\mathbf{c}) |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| f^-(\mathbf{c}) d\mathbf{c} - N \int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} > 0} \psi(\mathbf{c}) |\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}| f_w(\mathbf{c}) d\mathbf{c}}, \quad (3.24b)$$

donde N es un factor de normalización. Si fuera el caso en que $f = N f_w$, es decir que las moléculas estén completamente acomodadas, observamos que el numerador y el denominador de la ecuación (3.24) son iguales, dando como resultado que $\theta = 1$.

Con esta definición, se pueden calcular coeficientes de acomodación para situaciones diversas (ver ref.[3]), y es válida para el caso en que se estudie una interacción entre la superficie y el gas más general que la descrita por el modelo de Maxwell, un ejemplo de ello, es el trabajo realizado por Klinc y Kušcer [50], donde se reportan expresiones para los coeficientes de acomodación para el momento normal (θ_{11}), momento tangencial ($\theta_{22} = \theta_{33}$), energía (θ_{41}) y el coeficiente de acomodación radiométrico (θ_{14}).

Por otra parte, el coeficiente de acomodación también se puede extraer de datos experimentales. En la literatura podemos hallar varios trabajos en donde se reporta el valor numérico de θ [3, 51, 52].

Los valores del coeficiente de acomodación dependen del flujo de gas enrarecido que se emplea y de varios factores más, uno de ellos es la rugosidad de las superficies. De acuerdo con el trabajo de Collins y Knox [53], los coeficientes de acomodación son funciones de la energía de las partículas incidentes, la temperatura de la pared y del gas y por último, depende del material de la superficie y del grado de rugosidad¹ en la que ésta se encuentra. Así que uno puede obtener valores diferentes si la superficie no absorbe partículas, es microscópicamente suave y posee una estructura molecular ordenada, etc. Un resultado acerca de la medición experimental del coeficiente de acomodación y que podemos emplear en este trabajo, es el que obtuvo Arkilic [52], quien midió el flujo de gas entre canales de silicón, en la región de flujo de deslizamiento, encontrando $\theta = 0.8$ para gases como el Neón y el Argón.

| Valor de θ | Material | Condición de la superficie (Rugosidad) | Régimen | Medido por |
|-------------------|-----------------|--|---------------|--------------------|
| 0.8 | silicón | 0.8 nm | deslizamiento | Arkilic [52] |
| 0.82-0.94 | esfera metálica | 0.1 μm | molecular | Thomas y Lord [54] |
| 0.78-0.81 | vidrio | 0.05 μm | molecular | Porodnov [55] |
| 0.87-0.89 | vidrio | 1.5 μm | molecular | Porodnov [55] |

Tabla 1. Mediciones del coeficiente de acomodación para gases ligeros publicadas por diversos autores. En la literatura podemos hallar diversas mediciones del coeficiente de acomodación θ , en la referencia [3] podemos ver la recopilación de datos que realizó Hurlbut.

¹Cuando la superficie de la pared se amplifica, observamos que está formada por irregularidades o asperezas de diferentes alturas y con distribución irregular o aleatoria. Dicha característica es difícil de definir pues depende de factores como la altura media de las irregularidades de la superficie, la variación de la altura efectiva respecto de la altura media, la forma y distribución geométrica, la distancia entre dos irregularidades vecinas, etcétera.

Debido a que prácticamente es imposible tomar en cuenta todos esos factores, lo que se realiza en la práctica es suponer que la rugosidad puede expresarse por la altura media de las asperezas, como un promedio obtenido con las características del flujo, mas no propiamente por el obtenido como la media de las alturas de la pared. De lo anterior vemos que las unidades que se emplean al medir el grado de rugosidad de una superficie son de distancia.

Por último, observamos que en el modelo Maxwelliano del kernel de dispersión dado por la ecuación (3.11), todos los coeficientes de acomodación son iguales al parámetro θ . Ciertamente ésta es una limitante, sin embargo, recordemos que el modelo de Maxwell es el más simple y debido a ello es el más manejable cuando se realizan cálculos analíticos. de hecho ésta es la razón por la estamos interesados en trabajar con él.

3.5 El modelo de las fronteras

En este trabajo estamos interesados en estudiar el efecto de una superficie frontera plana en movimiento sobre un gas monoatómico enrarecido, siendo lo más importante para nosotros el mantener la información de las propiedades de la pared hacia el interior del gas. Por ello en lugar de proponer un modelo del kernel de colisión [33, 50] más elaborado de los que se han reportado hasta este momento, o definir un nuevo coeficiente de acomodación [3, 4, 49], usaremos el modelo de Maxwell, modificado por la introducción de α que nos da la fracción de las partículas que regresan al interior del gas después de colisionar con la superficie frontera. Es decir, tomamos en cuenta la probabilidad de que algunas partículas atraviesen la pared, y el cálculo de las cantidades relevantes en la frontera se realizará a través de él. Con lo anterior en mente, escribimos una función de distribución donde aparecen las características de las fronteras con las que interactúan las partículas del gas enrarecido.

Enseguida, consideramos una pared sólida plana caracterizada con un vector normal unitario $\hat{\mathbf{n}}$ dirigido hacia el fluido, con temperatura T_w y moviéndose con velocidad \mathbf{u}_w . La función de distribución de las moléculas que emergen de la pared f^+ se escribe como

$$f^+(\mathbf{r}, \mathbf{c}; t) = \Theta(c_n) [1 - \alpha] \mathcal{K} \exp\left\{-\frac{m(\mathbf{c} - \mathbf{u}_w)^2}{2K_B T_w}\right\} + \frac{\Theta(c_n)}{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|} \int_{\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) f^-(\mathbf{r}, \mathbf{c}'; t) |\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}| \Theta(-c'_n) d\mathbf{c}'. \quad (\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0) \quad (3.25)$$

donde \mathbf{c}' y \mathbf{c} son las velocidades de las partículas incidentes y reflejadas respectivamente. $\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} = c_n$ es la componente normal a la superficie, \mathbf{u}_w es la velocidad de la pared y $\Theta(c_n)$ es la función escalón de Heaviside,

$$\Theta(c_n) = \begin{cases} \Theta(c_n) = 1, & c_n > 0 \\ \Theta(c_n) = 0, & c_n < 0 \end{cases} \quad (3.26)$$

f^- es la función de distribución de las partículas incidentes y \mathcal{K} es la constante de normalización.

Para el kernel de dispersión \mathcal{R} haremos uso del modelo de Maxwell, que expresamos como sigue

$$\mathcal{R}(\mathbf{r}, t, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) = (\alpha - \theta)\delta(\mathbf{c}' - \mathbf{c} + 2\hat{\mathbf{n}}[\mathbf{n} \cdot (\mathbf{c} - \mathbf{u}_w)]) + \theta f_w \frac{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|}{\sqrt{RT_w}}, \quad (\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0, \mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0) \quad (3.27)$$

en nuestro caso particular *alpha* es la fracción de partículas que son re-emitidas hacia el bulto después de interactuar con la pared y θ nos dice que de las partículas que regresan al bulto, que fracción de ellas colisionó de manera difusiva, de esta manera $\alpha - \theta$ es la fracción de las partículas reflejadas especularmente. De manera consistente, el kernel de dispersión debe estar normalizado a α

$$\int \Theta(c_n)\mathcal{R}(\mathbf{r}, t, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c})d\mathbf{c} = \alpha \leq 1, \quad (\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0) \quad (3.28)$$

donde f_w es la función Maxwelliana que describe las propiedades de la pared suponiendo que cada elemento de la pared tiene las mismas características

$$f_w = \frac{1}{2\pi(RT_w)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{m(\mathbf{c} - \mathbf{u}_w)^2}{2K_B T_w}\right\}. \quad (3.29)$$

Para simplificar la expresión de la condición de frontera. se sustituye la ecuación (3.27) en el segundo término de (3.25), de lo que obtenemos

$$\begin{aligned} \int \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c})f^-(\mathbf{c}')|\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}|\Theta(-c'_n)d\mathbf{c}' &= \theta \int f_w \frac{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|}{\sqrt{RT_w}} f^-(\mathbf{c}')|\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}|\Theta(-c'_n)d\mathbf{c}' \\ &+ (\alpha - \theta) \int \delta(\mathbf{c}' - \mathbf{c} + 2\hat{\mathbf{n}}[\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{c} - \mathbf{u}_w)])f^-(\mathbf{c}')|\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}|\Theta(-c'_n)d\mathbf{c}', \\ &= (\alpha - \theta)|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|f^-(\mathbf{c}) + \theta f_w \frac{|\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}|}{\sqrt{RT_w}} \int \Theta(c'_n)|\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}|f^-(\mathbf{c}')d\mathbf{c}', \quad (\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0) \end{aligned} \quad (3.30)$$

después, se introduce la expresión anterior en la ecuación (3.25), y se realiza la siguiente identificación

$$M^- = \int \Theta(c'_n)|\mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}}|f^-(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t)d\mathbf{c}'. \quad (3.31)$$

donde M^- es un flujo de partículas normal a la pared, de lo anterior hallamos una expresión para la condición de frontera

$$f^+(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \Theta(c_n)[1 - \alpha]\mathcal{K} \exp\left\{-\frac{m(\mathbf{c} - \mathbf{u}_w)^2}{2K_B T_w}\right\}$$

$$+\Theta(c_n)(\alpha - \theta)f^-(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) + \Theta(c_n)\theta M^- \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}}, \quad (\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0) \quad (3.32)$$

que está escrita en términos M^- y \mathcal{K} , mismas que guardan una relación entre sí. Para determinar esta relación, se calcula el flujo de partículas que logra atravesar la superficie frontera, éste es igual al flujo de partículas incidentes menos la parte de las partículas que regresan al bulto, después de interactuar con la pared ya sea especular o difusivamente

$$|1 - \alpha| \int \Theta(c_n) \mathcal{K} c_z \exp\left\{-\frac{\mathbf{C}_w^2}{2RT_w}\right\} d\mathbf{c} = M^- - \theta \int \Theta(c_n) M^- c_z \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} d\mathbf{c} \\ - [\alpha - \theta] \int \Theta(c_n) c_z f^- d\mathbf{c}, \quad (3.33)$$

donde $\mathbf{C}_w = \mathbf{c} - \mathbf{u}_w$, por lo que es conveniente cambiar el diferencial $d\mathbf{c} = d\mathbf{C}_w$ en la ecuación (3.33), después de realizar las integrales hallamos

$$[1 - \alpha] \mathcal{K} 2\pi (RT_w)^2 = M^- - \theta M^- - [\alpha - \theta] M^- \\ = [1 - \alpha] M^-. \quad (3.34)$$

de esta manera la relación entre la constante de normalización y el flujo normal de partículas se escribe como

$$\mathcal{K} = \frac{M^-}{2\pi (RT_w)^2}, \quad (3.35)$$

lo que nos permite hallar una expresión simplificada del modelo de fronteras

$$f^-(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \Theta(c_n) [1 - \alpha] M^- \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} + \Theta(c_n) \theta M^- \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} + \Theta(c_n) [\alpha - \theta] f^-(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t), \quad (3.36)$$

donde el primer término nos da información acerca de las partículas que logran atravesar la pared, el segundo término nos indica la fracción de partículas que colisionan de forma difusiva con la frontera y finalmente el último término tiene que ver con las partículas que colisionan de manera especular con la pared. Debido a lo anterior podemos señalar que la función de distribución f^+ contiene información de las partículas que abandonan la pared después de haber interactuado con ella.

De esta manera la función de distribución de las partículas cercanas a la frontera será

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = f^+(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) + f^-(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t), \quad (3.37)$$

donde

$$\begin{cases} f^+ = 0 & \text{para } \mathbf{c}' \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0 \\ f^- = 0 & \text{para } \mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0 \end{cases}.$$

Notamos que este modelo de frontera es el más simple y en él tomamos en cuenta las propiedades de la pared por medio de los coeficientes de acomodación. Otros autores [50, 49] han introducido modelos más elaborados y generales, sin embargo como ya hemos señalado, aquí no estamos interesados en un estudio detallado de la pared, en su lugar queremos mantener sus propiedades en un tipo de tratamiento hidrodinámico, esto significa que usaremos este modelo explícito sólo a través del cálculo de las condiciones de frontera para las variables macroscópicas consideradas como relevantes.

3.5.1 La constante de normalización

Para determinar la constante de normalización \mathcal{K} , es necesario calcular primero el flujo de partículas normal a la superficie M^- y para ello identificamos a la función de distribución de las partículas incidentes f^- , como aquella que describe el comportamiento de las partículas del gas en el bulbo. En nuestro tratamiento ésta corresponde a la función de distribución que satisface la ecuación de Boltzmann en la aproximación de trece momentos de Grad. De esta manera estamos en posición de calcular la siguiente integral, en coordenadas cartesianas

$$M^- = \int_{-\infty}^0 f^{(0)} \left[1 + \frac{m}{2pK_B T} \mathbf{P}^\circ : (\mathbf{C}'\mathbf{C}')^\circ + \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC'^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{C}' \right] c'_n \Theta(-c'_n) d\mathbf{c}'. \quad (3.38)$$

recordamos que $f^{(0)}$ es la distribución Maxwelliana. Por otro lado, debido a que las partículas viajan en dirección hacia donde se encuentra la pared tenemos

$$c'_n < 0, \quad (3.39)$$

de esta manera

$$-c'_n > 0, \quad (3.40)$$

por lo que

$$\Theta(-c'_n) = 1,$$

y además

$$c'_n = -c_n, \quad (3.41)$$

de acuerdo con lo anterior podemos escribir la ecuación (3.38) como

$$M^- = \int_{-\infty}^0 f^{(0)} \left[1 + \frac{m}{2pK_B T} \mathbf{P}^\circ : (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ - \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{C} \right] [-c_z] d\mathbf{c}. \quad (3.42)$$

donde hemos colocado la pared plana perpendicular al eje z , ($\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{k}}$). Usando la expresión de la velocidad peculiar, cambiamos la variable de integración de la velocidad molecular

$$d\mathbf{c} = d\mathbf{C}. \quad (3.43)$$

Por otra parte debemos hacer notar que la integral escrita en (3.42) en realidad corresponde a tres integrales en coordenadas esféricas

$$\int_{-\infty}^0 d\mathbf{c} \rightarrow \int_{2\pi}^0 \int_{\pi/2}^0 \int_{-\infty}^0 C^2 \text{sen}\phi d\theta d\phi dC \rightarrow - \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^{-\infty} C^2 \text{sen}\phi d\theta d\phi dC, \quad (3.44)$$

los límites en la integral del módulo de la velocidad, se modifican cuando realizamos un cambio de variable, $w = \frac{C^2}{2RT}$, de esta manera observamos que los límites para C son de menos infinito ($-\infty$) a cero (0) y para la variable w son de cero (0) a infinito (∞).

Posteriormente, se procede a realizar los cálculos en el espacio de la variable w con sus correspondientes límites, además, hacemos uso de la expresión para la velocidad peculiar $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u}_0$,

$$M^- = [1] + [2] + [3], \quad (3.45)$$

donde

$$\begin{aligned} [1] &= \int c_z f^{(0)} d\mathbf{c}, \\ [2] &= \int c_z f^{(0)} \frac{m}{2pK_B T} \mathbf{P}^o : (\mathbf{C}\mathbf{C})^o d\mathbf{c}, \\ [3] &= - \int c_z f^{(0)} \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{C} d\mathbf{c}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

calculamos cada una de las integrales de arriba por separado

$$\begin{aligned} [1] &= \int (C_z + u_{0z}) \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{C^2}{2RT} \right\} d\mathbf{c}, \\ &= \frac{\rho\pi}{2} \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} (2RT)^2 \left(1 + \frac{1}{2} u_{0z} \right). \end{aligned} \quad (3.47)$$

Para la segunda integral,

$$\begin{aligned}
[2] &= \int (C_z + u_{0z}) f^{(0)} \frac{m}{2pK_B T} P_{ij}^\circ (C_i C_j)^\circ d\mathbf{c}, \\
&= \int (C_z + u_{0z}) f^{(0)} \frac{m}{2pK_B T} [P_{xx} C_x C_x + P_{xy} C_x C_y + P_{xz} C_x C_z + P_{yx} C_y C_x + P_{yy} C_y C_y \\
&\quad + P_{yz} C_y C_z + P_{zx} C_z C_x + P_{zy} C_z C_y + P_{zz} C_z C_z] d\mathbf{c} \\
&= \int (C_z + u_{0z}) f^{(0)} \frac{m}{2pK_B T} [P_{xx} C_x C_x + 2P_{xy} C_x C_y + 2P_{xz} C_x C_z \\
&\quad + P_{yy} C_y C_y + P_{yz} C_y C_z + P_{zz} C_z C_z] d\mathbf{c}, \tag{3.48}
\end{aligned}$$

depués de calcular cada una de las integrales de (3.48), recordando que la traza del tensor viscoso es cero ($P_{xx} + P_{yy} + P_{zz} = 0$), hallamos

$$\begin{aligned}
[2] &= \frac{\rho}{2pRT} \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} (2RT)^3 \left[\frac{\pi}{4} P_{xx} + \frac{\pi}{4} P_{yy} + \frac{\pi}{2} P_{zz} \right], \\
&= \frac{\rho}{p4\sqrt{\pi}} \sqrt{2RT} P_{zz}. \tag{3.49}
\end{aligned}$$

La tercer integral de (3.45) nos da como resultado

$$[3] = -\frac{2}{15} \frac{\mathbf{q}}{p} \frac{u_{0z}}{\sqrt{2\pi RT}}, \tag{3.50}$$

enseguida sustituimos las ecuaciones (3.47), (3.49) y (3.50) en la ecuación (3.45), con lo que obtenemos una expresión para M^-

$$M^- = \frac{\left[p_s + \frac{P_{zz}}{2} \right]}{(2\pi RT_s)^{1/2} m} + \frac{u_z \rho_s}{2m} \left[1 - \frac{2q_z}{5p(2\pi RT_s)^{1/2}} \right], \tag{3.51}$$

donde ρ_s , T_s y p_s son los valores de estas variables en la capa de gas más cercana a la pared sólida, estas cantidades las tomamos como constantes en una primera aproximación. Observamos que M^- depende de $(\mathcal{P}_{zz}, u_z, q_z)$, es decir de las componentes normales del tensor de presiones, la velocidad y el flujo de calor. El hecho de que M^- dependa de la velocidad u_z y del flujo de calor q_z nos indica que la pared permite el paso de algunas partículas a través de ella.

Con la expresión para M^- y sustituyendo en la ecuación (3.35), fácilmente obtenemos la constante de normalización

$$\mathcal{K} = \left(\frac{T_s}{T_w}\right)^2 \frac{\rho_s}{p_s} \frac{\left[p_s + \frac{P_{zz}}{2}\right]}{(2\pi RT_s)^{3/2}} + \frac{u_z \rho \pi}{(2\pi RT_s)^2} \left(\frac{T_s}{T_w}\right)^2 \left[1 - \frac{2q_z}{5p(2\pi RT_s)^{1/2}}\right]. \quad (3.52)$$

Una vez que tenemos el modelo de pared en forma completa procedemos a calcular las condiciones de frontera para el tensor de esfuerzos y el flujo de calor, que son las variables relevantes en esta aproximación, dicho cálculo se realiza por medio de sus definiciones cinéticas en términos de la función de distribución válida en la frontera y que es expresada en la ecuación (3.36).

3.6 Los valores de frontera de \mathbf{q} y \mathbf{P}°

En esta sección, nos proponemos calcular los valores en la frontera para las variables relevantes de acuerdo al nivel de aproximación en que estamos trabajando. Estas cantidades físicas son el flujo de calor y el tensor viscoso simétrico sin traza. Los cálculos se realizan tomando como punto de partida el modelo de fronteras que presentamos en la sección anterior, junto con la función de distribución de Grad en la aproximación de trece momentos, misma que es solución de la ecuación de Boltzmann.

Pensando en una geometría simple, consideramos un gas monoatómico enrarecido en contacto con una superficie sólida plana con temperatura constante T_w . Para obtener el valor en la frontera asociado al tensor viscoso simétrico sin traza recurrimos a su definición cinética, procediendo como sigue: se multiplica por $m(\mathbf{CC})^\circ$ la función (3.36) y se integra con respecto a la velocidad \mathbf{c}

$$\mathbf{P}^{\circ\pm} = [1 - \alpha + \theta] \int \Theta(c_n) M^- \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} m(\mathbf{CC})^\circ d\mathbf{c} + [\alpha - \theta] \mathbf{P}^{\circ-}, \quad (3.53)$$

donde

$$\mathbf{P}^{\circ\pm} = \int \Theta(c_n) m(\mathbf{CC})^\circ f^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (3.54)$$

La primer integral que involucra la función de distribución Maxwelliana local f_w , es posible calcularla de manera inmediata al hacer uso de su forma explícita

$$\int \Theta(c_n) M^- \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} m(\mathbf{CC})^\circ d\mathbf{c} = \int \frac{M^-}{2\pi(RT_w)^2} \exp\left\{-\frac{C_w}{2RT_w}\right\} m(\mathbf{CC})^\circ d\mathbf{c}, \quad (3.55)$$

debido a que $c_n > 0$, entonces $\Theta(c_n) = 1$. Además, observamos que $(\mathbf{CC})^\circ$ es una matriz,

$$(\mathbf{CC})^\circ = \begin{pmatrix} C_1C_1 - \frac{1}{3}C^2 & C_1C_2 & C_1C_3 \\ C_2C_1 & C_2C_2 - \frac{1}{3}C^2 & C_2C_3 \\ C_3C_1 & C_3C_2 & C_3C_3 - \frac{1}{3}C^2 \end{pmatrix}. \quad (3.56)$$

Por otro lado, la distribución Maxwelliana depende de \mathbf{C}_w por lo que es necesario escribir \mathbf{C} en términos de \mathbf{C}_w . Lo anterior se consigue al combinar las expresiones de cada una de las velocidades, $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u}_0$ y $\mathbf{C}_w = \mathbf{c} - \mathbf{u}_w$

$$\begin{aligned}\mathbf{C} &= \mathbf{C}_w - \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_w, \\ &= \mathbf{C}_w - \mathbf{u},\end{aligned}\tag{3.57}$$

donde $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_w$. De acuerdo con lo anterior, la ecuación (3.55) se puede escribir como

$$\int \Theta(c_n) M^- \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} m (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ d\mathbf{c} = \int \frac{M^-}{2\pi(RT_w)^2} \exp\left\{-\frac{C_w}{2RT_2}\right\} m ((\mathbf{C}_w - \mathbf{u})(\mathbf{C}_w - \mathbf{u}))^\circ d\mathbf{C}_w.\tag{3.58}$$

calculamos las integrales una por una, en general tenemos que desarrollar los elementos de la matriz (3.56) que están en la diagonal,

$$(C_{wi} - u_i)(C_{wi} - u_i) - \frac{1}{3}(\mathbf{C}_w - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{C}_w - \mathbf{u}) = C_{wi}^2 - 2C_{wi}u_i + u_i^2 - \frac{1}{3}[C_w^2 + u^2 - 2\mathbf{C}_w \cdot \mathbf{u}]\tag{3.59}$$

así como aquellos que están fuera de ella

$$(C_{wi} - u_i)(C_{wj} - u_j) = C_{wi}C_{wj} + u_iu_j - C_{wi}u_j - u_iC_{wj},\tag{3.60}$$

Después de realizar las integrales, hallamos

$$\int \Theta(c_n) M^- \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} m (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ d\mathbf{c} = \frac{mM^-}{2\pi(RT_w)^2} \mathcal{D}^\circ,\tag{3.61}$$

donde \mathcal{D}° es una matriz simétrica sin traza, cuyas componentes son

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{11} &= \left[u_x^2 - \frac{u^2}{3} \right] B + \frac{2}{3} \pi u_z C, \\ \mathcal{D}_{12} &= u_x u_y B \\ \mathcal{D}_{13} &= u_x u_z B - \pi u_x C \\ \mathcal{D}_{22} &= \left[u_y^2 - \frac{u^2}{3} \right] B + \frac{2}{3} \pi u_z C \\ \mathcal{D}_{32} &= u_y u_z B - \pi u_y C \\ \mathcal{D}_{33} &= \left[u_z^2 - \frac{u^2}{3} \right] B - \frac{4}{3} \pi u_z C.\end{aligned}\tag{3.62}$$

donde $B = 2\pi \frac{\sqrt{\pi}}{4} (2RT_w)^{3/2}$ y $C = \frac{1}{2} (2RT_w)^2$.

Por otra parte con la función de distribución obtenida en la aproximación de Grad en trece momentos (2.61), calculamos las integrales (3.54)

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{\circ\pm} &= \int m(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ f^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \\ &= \int f^{(0)} \left[1 + \frac{m}{2pK_B T} \mathbf{P}^\circ : (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ \pm \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{C} \right] m(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ d\mathbf{c}, \end{aligned} \quad (3.63)$$

se calculan por separado cada una de las integrales, que están involucradas en la ecuación anterior

$$\mathbf{P}^{\circ\pm} = [1] + [2] + [3], \quad (3.64)$$

donde

$$\begin{aligned} [1] &= \int m(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ f^{(0)} d\mathbf{c}, \\ [2] &= \int m(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ f^{(0)} \frac{m}{2pK_B T} \mathbf{P}^\circ : (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ d\mathbf{c}, \\ [3] &= \pm \int m(\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ f^{(0)} \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{C} d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

la primera integral de la ecuación es cero, luego la segunda en componentes se escribe como

$$\begin{aligned} [2] &= \int f^{(0)} m(C_i C_m)^\circ P_{ij}^\circ(C_i C_j) d\mathbf{c}, \\ &= nm \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} \frac{m}{2pK_B T} \left(\frac{4\pi}{15} P_{ij}^\circ \right) \left(\frac{2\pi K_B T}{m} \right)^{7/2} \frac{1}{\pi^3}, \\ &= \frac{1}{2} P_{ij}^\circ, \end{aligned} \quad (3.66)$$

la tercera integral de (3.64)

$$\begin{aligned}
[3] &= \pm \int f^{(0)} \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) m(C_l C_m)^2 q_i C_i d\mathbf{c}. \\
&= \pm \frac{4}{5\pi} \sqrt{\frac{m}{2\pi K_B T}} \begin{pmatrix} -\frac{\pi}{12} q_z & 0 & \frac{\pi}{4} q_x \\ 0 & -\frac{\pi}{12} q_z & \frac{\pi}{4} q_y \\ \frac{\pi}{4} q_x & \frac{\pi}{4} q_y & \frac{\pi}{6} q_z \end{pmatrix}. \tag{3.67}
\end{aligned}$$

finalmente sustituimos (3.66) y (3.67) en la ecuación (3.64) y hallamos

$$\mathbf{P}^{\circ\pm} = \frac{1}{2} \mathbf{P}^{\circ} \pm \frac{1}{5\sqrt{2\pi K_B T}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} q_z & 0 & q_x \\ 0 & -\frac{1}{3} q_z & q_y \\ q_x & q_y & \frac{2}{3} q_z \end{pmatrix}. \tag{3.68}$$

posteriormente se sustituyen las ecuaciones (3.61) y (3.68) en la ecuación (3.53), inmediatamente se reordenan los términos y se obtiene una expresión para el tensor viscoso simétrico sin traza

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}^{\circ} &= \frac{\Phi m M^{-}}{\pi (RT_w)^2} \begin{pmatrix} \left[u_x^2 - \frac{u^2}{3} \right] B + \frac{2}{3} \pi u_z C & u_x u_y B & u_x u_z B - \pi u_x C \\ u_x u_y B & \left[u_y^2 - \frac{u^2}{3} \right] B + \frac{2}{3} \pi u_z C & u_y u_z B - \pi u_y C \\ u_x u_z B - \pi u_x C & u_y u_z B - \pi u_y C & \left[u_z^2 - \frac{u^2}{3} \right] B - \frac{4}{3} \pi u_z C \end{pmatrix} \\
&\quad - \frac{2\Phi}{5\sqrt{2\pi RT_s}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} q_z & 0 & q_x \\ 0 & -\frac{1}{3} q_z & q_y \\ q_x & q_y & \frac{2}{3} q_z \end{pmatrix}. \tag{3.69}
\end{aligned}$$

donde $\Phi = \frac{1-\alpha+\theta}{1+\alpha-\theta}$ contiene los coeficientes de acomodación. Observamos que el tensor viscoso en la frontera depende de una velocidad relativa ($\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_w$), que es la diferencia entre la velocidad de la pared y la velocidad del gas que se encuentra en los alrededores de la superficie. Otra observación que podemos hacer es que hay un acoplamiento entre el tensor de presiones y el flujo de calor en la frontera.

Por otra parte, para calcular la expresión del flujo de calor en las fronteras recurrimos a su definición cinética, multiplicamos la función de distribución (3.36) por $\mathbf{C} \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right]$ y se integra en el espacio de las velocidades \mathbf{c}

$$\mathbf{q}^+ = [1 - \alpha + \theta] \int \Theta(c_n) M^{-} \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} \mathbf{C} \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right] d\mathbf{c} + [\alpha - \theta] \mathbf{q}^-, \tag{3.70}$$

donde

$$\mathbf{q}^{\pm} = \pm \int \mathbf{C} \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right] f^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (3.71)$$

La primera integral de la ecuación (3.70) se calcula haciendo uso de la ecuación (3.29)

$$\begin{aligned} & \int M \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} \mathbf{C} \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right] d\mathbf{c} \\ &= \int M^{-} \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} (\mathbf{C}_w - \mathbf{u}) \left[\frac{m}{2} (\mathbf{C}_w - \mathbf{u})^2 - \frac{5K_B T}{2} \right] d\mathbf{C}_w, \\ &= \int M^{-} \frac{f_w}{\sqrt{RT_w}} (\mathbf{C}_w - \mathbf{u}) \left[\frac{m}{2} (C_w^2 + u^2 - 2\mathbf{C}_w \cdot \mathbf{u}) - \frac{5K_B T}{2} \right] d\mathbf{C}_w, \\ &= 2\pi M^{-} \left[\frac{\hat{\mathbf{k}}}{\pi} \left(2RT_w - \frac{5RT_s}{2} + \frac{u^2}{2} \right) - \frac{5}{4\pi} \sqrt{2\pi RT_w} \left[1 - \frac{T_s}{T_w} \right] \mathbf{u} \right. \\ & \quad \left. - \frac{\mathbf{u}}{\sqrt{2\pi RT_w}} \left(\frac{u^2}{2} - \frac{u_z \sqrt{2\pi RT_w}}{\pi} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.72)$$

La integral del segundo término se calcula empleando la función de distribución obtenida en la aproximación de Grad en trece momentos (2.61)

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^{\mp} &= \pm \int \mathbf{C} \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right] f^{\mp} d\mathbf{c}, \\ &= \pm \int f^{(0)} \left[1 + \frac{m}{2pK_B T} \mathbf{P}^{\circ} : (\mathbf{C}\mathbf{C})^{\circ} \pm \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{C} \right] \mathcal{X} \\ & \quad \mathcal{X} m \mathbf{C} \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right] d\mathbf{c}, \end{aligned} \quad (3.73)$$

el cálculo de las integrales que están escritas arriba se realiza de manera separada

$$\mathbf{q}^{\pm} = [1] + [2] + [3], \quad (3.74)$$

donde

$$[1] = \pm \int \mathbf{C} \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right] \mathbf{C} f^{(0)} d\mathbf{c},$$

$$\begin{aligned}
[2] &= \pm \int \mathbf{C} \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right] f^{(0)} \frac{\mathbf{P}^\circ : (\mathbf{C}\mathbf{C})^\circ}{2pRT} d\mathbf{c}, \\
[3] &= \int \mathbf{C} \left[\frac{mC^2}{2} - \frac{5K_B T}{2} \right] f^{(0)} \frac{2m}{5pK_B T} \left(\frac{mC^2}{2K_B T} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{q} \cdot \mathbf{C} d\mathbf{c}. \quad (3.75)
\end{aligned}$$

la primera integral

$$[1] = \mp \frac{p}{2} \sqrt{\frac{RT}{2\pi}} \hat{\mathbf{k}}, \quad (3.76)$$

la segunda integral

$$[2] = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{RT}{2\pi}} \left[P_{13} \hat{\mathbf{i}} + P_{23} \hat{\mathbf{j}} + \frac{1}{2} P_{33} \hat{\mathbf{k}} \right], \quad (3.77)$$

la tercera integral

$$[3] = \frac{1}{2} \mathbf{q}, \quad (3.78)$$

sustituimos las ecuaciones (3.76-3.68) en la ecuación (3.74) y obtenemos

$$\mathbf{q}^\pm = \frac{\mathbf{q}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{RT}{2\pi}} \left[P_{xz} \hat{\mathbf{i}} + P_{yz} \hat{\mathbf{j}} + \left(\frac{P_{zz}}{2} - p \right) \hat{\mathbf{k}} \right], \quad (3.79)$$

posteriormente se sustituyen las ecuaciones (3.73) y (3.79) en la ecuación (3.70), luego de agrupar los términos y de resolver para \mathbf{q} , obtenemos la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
\mathbf{q} &= \Phi m M^{-2} 2\pi \left[\frac{\hat{\mathbf{k}}}{\pi} \left(2RT_w - \frac{5RT_s}{2} + \frac{u^2}{2} \right) - \frac{5}{4\pi} \sqrt{2\pi RT_w} \left[1 - \frac{T_s}{T_w} \right] \mathbf{u} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\mathbf{u}}{\sqrt{2\pi RT_w}} \left(\frac{u^2}{2} - \frac{u_z \sqrt{2\pi RT_w}}{\pi} \right) \right] - \Phi \sqrt{\frac{RT_s}{2\pi}} \left[P_{xz} \hat{\mathbf{i}} + P_{yz} \hat{\mathbf{j}} + \left(\frac{P_{zz}}{2} - p_s \right) \hat{\mathbf{k}} \right], \quad (3.80)
\end{aligned}$$

que corresponde al flujo de calor en las fronteras. Observamos que también depende de la velocidad relativa \mathbf{u} y de los coeficientes de acomodación contenidos en Φ .

Hemos calculado los valores de frontera para las variables relevantes propias de esta aproximación (3.69) y (3.80), dichas cantidades constituyen una parte de nuestros resultados [56].

A partir de las expresiones para los valores de frontera que hallamos, podemos obtener las ecuaciones para la componente (xz) del tensor de presiones y para la componente z del

flujo de calor, que resultan ser una generalización de las expresiones que encontró Harold Grad [41], las expresiones de estas cantidades son

$$P_{xz} = \frac{\Phi m M^{-1}}{\pi (RT_w)^2} (u_x u_z A - \pi u_x B) - \frac{2\Phi}{5\sqrt{2\pi RT_s}} q_x. \quad (3.81)$$

y

$$q_z = \Phi m M^{-1} 2\pi \left[\frac{1}{\pi} \left(2RT_w - \frac{5RT_s}{2} + \frac{u^2}{2} \right) - \frac{5}{4\pi} \sqrt{2\pi RT_w} \left(1 - \frac{T_s}{T_w} \right) u_z \right. \\ \left. - \frac{u_z}{\sqrt{2\pi RT_w}} \left(\frac{u^2}{2} - \frac{u_z}{\pi} \sqrt{2\pi RT_w} \right) \right] - \Phi \sqrt{\frac{RT_s}{2\pi}} \left(\frac{P_{zz}}{2} - p_s \right). \quad (3.82)$$

En el caso particular, en que ninguna de las partículas logre atravesar la pared, tendremos $\alpha = 1$ y $u_z = 0$. Lo que reduce las ecuaciones de arriba a las siguientes expresiones

$$P_{xz} = -\frac{\theta}{(2-\theta)} \frac{(p_s + \frac{P_{zz}}{2}) u_x}{(2\pi RT_s)^{1/2}} - \frac{\theta}{(2-\theta)} \frac{q_x}{5\sqrt{2\pi RT_s}}. \quad (3.83)$$

y

$$q_z = -\frac{\theta}{(2-\theta)} \sqrt{\frac{RT_s}{2\pi}} 4p_s \left[1 - \frac{T_w}{T_s} + \frac{P_{zz}}{2p_s} \left(\frac{3}{2} - \frac{T_w}{T_s} \right) - \left(1 + \frac{P_{zz}}{2p_s} \right) \frac{u_x^2}{4RT_s} \right]. \quad (3.84)$$

Grad en su trabajo, tomó en cuenta una superficie frontera plana en reposo, con temperatura T_w y caracterizada por el coeficiente θ , y empleó las siguientes definiciones de P_{xz} y q_z

$$P_{xz} \equiv \int C_x C_z f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (3.85)$$

y

$$q_z \equiv \int C_z C^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (3.86)$$

con lo que obtuvo precisamente la ecuación (3.83), y

$$S_z = -\frac{\theta}{(2-\theta)} \sqrt{\frac{RT_s}{2\pi}} 8p_s \left[1 - \frac{T_w}{T_s} + \frac{P_{zz}}{2p_s} \left(\frac{3}{2} - \frac{T_w}{T_s} \right) - \left(1 + \frac{P_{zz}}{2p_s} \right) \frac{u_{0x}^2}{RT_s} \right], \quad (3.87)$$

que es la expresión de la componente z del flujo de calor, ya que $\mathbf{S} = 2\mathbf{q}$.

En nuestra aproximación, estamos considerando que las partículas en el interior del gas (lejos de la frontera), se mueven de acuerdo con la función de distribución de trece momentos de Grad, con velocidad promedio \mathbf{u}_0 . La velocidad macroscópica de las partículas en el interior del gas, se extrapola hasta la pared misma, que a su vez se mueve con velocidad \mathbf{u}_w , sin embargo, debido a que las partículas chocan de manera difusiva y especular con la frontera, el gas adyacente no adquiere la velocidad de la pared, ni tampoco la velocidad de las partículas que se encuentran en el interior del mismo, lo que sucede es que el gas en esta región se encuentra a una velocidad distinta, a la que llamamos $\mathbf{u}_s = \mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_w$. De esta manera vemos que los valores de frontera de las variables físicas que hemos calculado, dependen de manera directa de la velocidad de deslizamiento y son una corrección a los valores de frontera del régimen de Navier-Stokes.

Lo que tenemos es un modelo de las variables físicas en la frontera, en donde tomamos en cuenta las características de la pared, pero no consideramos de manera explícita el efecto de la capa de Knudsen hacia el interior del gas. Es decir, no se toma en cuenta la distorsión que sufre el perfil de velocidad debido a la capa de gas que se forma en las inmediaciones de la pared (esta distorsión en la velocidad, es también llamada *defecto de la velocidad* [4]).

3.7 Adimensionalización

A fin de obtener expresiones simples para las variables físicas en las fronteras, emplearemos variables que adimensionalizamos con ρ_{ref} , T_{ref} y p_{ref} , magnitudes características de la densidad, temperatura y presión. Aquí, nos referimos a una cantidad característica asociada con un problema dado, con aquel parámetro de referencia que se encuentra en una de las ecuaciones de movimiento o condiciones de frontera del problema planteado, en particular, elegimos las cantidades de referencia como la extrapolación de las magnitudes termodinámicas del gas en la pared ρ_s , T_s y p_s . Esta elección se realiza debido a que nos permite escribir las cantidades físicas en la frontera en términos del salto en la temperatura $\frac{T_s - T_w}{T_s}$ sin involucrar demasiados parámetros, de esta manera las cantidades adimensionales que emplearemos serán: densidad $\rho^* = \frac{\rho}{\rho_s}$, temperatura $T^* = \frac{T}{T_s}$, perfil de velocidad $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{RT_s}}$, velocidad de la pared $\mathbf{v}_w = \frac{\mathbf{u}_w}{\sqrt{RT_s}}$, velocidad relativa $\mathbf{V} = \frac{\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_w}{\sqrt{RT_s}}$ y las variables reducidas flujo de calor $\mathbf{Q} = \frac{\mathbf{q}}{p_s \sqrt{RT_s}}$ y tensor viscoso $\mathcal{P}^0 = \frac{\mathbf{P}^0}{p_s}$. Así, las expresiones de las variables físicas se muestran en forma adimensional.

El valor en la frontera para el tensor de presiones es el siguiente

$$\mathcal{P}^0 = -\frac{2\Phi}{5\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{3}Q_z & 0 & Q_x \\ 0 & -\frac{1}{3}Q_z & Q_y \\ Q_x & Q_y & \frac{2}{3}Q_z \end{pmatrix} + \frac{2\Phi M^- RT_s}{\sqrt{RT_w p_s}} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(V_x^2 - \frac{V^2}{2} \right) + \frac{2}{3} \sqrt{\frac{T_w}{T_s}} V_z & \sqrt{\frac{\pi}{2}} V_x V_y & V_x \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} V_z - \frac{T_w}{T_s} \right) \\ \sqrt{\frac{\pi}{2}} V_x V_y & \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(V_y^2 - \frac{V^2}{2} \right) + \frac{2}{3} \frac{T_w}{T_s} V_z & V_y \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} V_z - \frac{T_w}{T_s} \right) \\ V_x \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} V_z - \frac{T_w}{T_s} \right) & V_y \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} V_z - \frac{T_w}{T_s} \right) & \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(V_z^2 - \frac{V^2}{2} \right) - \frac{4}{3} \frac{T_w}{T_s} V_z \end{pmatrix}. \quad (3.88)$$

en esta expresión del tensor de presiones en la frontera, se observa claramente su dependencia en el salto de temperatura entre la pared y el gas adyacente. De manera semejante adimensionalizamos el flujo de calor y nos queda

$$\mathbf{Q} = -\frac{\Phi}{\sqrt{2\pi}} \left[\left(-1 + \frac{1}{2} \mathcal{P}_{zz} \right) \hat{\mathbf{k}} + \mathcal{P}_{xz} \hat{\mathbf{i}} + \mathcal{P}_{yz} \hat{\mathbf{j}} \right] - \frac{2\Phi M^-}{p_s \sqrt{RT_s}^{-1}} \left[\left(\frac{2T_w}{T_s} - \frac{5}{2} + \frac{V^2}{2} \right) \hat{\mathbf{k}} - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{T_s}{T_w}} \left(\frac{5}{2} \left(\frac{T_w}{T_s} - 1 \right) + \frac{V^2}{2} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{T_w}{T_s}} V_z \right) \mathbf{V} \right], \quad (3.89)$$

observamos que esta acoplado con el tensor de presiones y depende del salto de la temperatura.

Con esta adimensionalización, las condiciones de frontera de \mathcal{P}_{xz} , Q_z y Q_x , pueden escribirse de una manera más simple, en términos de la velocidad de deslizamiento y el salto de temperatura

$$\mathcal{P}_{xz} = -\frac{\Phi m M^-}{\pi(RT_w)} V_x \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} V_z - \frac{T_w}{T_s} \right) - \frac{2\Phi}{5\sqrt{2\pi}} Q_x, \quad (3.90)$$

$$Q_x = -\frac{\Phi m M^-}{5p_s} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{RT_s} \sqrt{\frac{T_s}{T_w}} \left[-\left(1 - \frac{T_s}{T_w}\right) + \frac{V^2}{5} - \frac{2}{\pi} \frac{T_w}{T_s} V_z \right] - \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi}} P_{xz}, \quad (3.91)$$

y

$$Q_z = -\frac{2\Phi M^-}{p_s} \sqrt{RT_s} \left[\left(2 \frac{T_w}{T_s} - \frac{5}{2} + \frac{V^2}{2}\right) - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{T_s}{T_w}} \left[\frac{5}{2} \left(\frac{T_w}{T_s} - 1\right) + \frac{V^2}{2} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{T_w}{T_s}} V_z \right] V_z \right] - \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{P_{zz}}{2} - p_s \right) \quad (3.92)$$

al combinar las ecuaciones (3.90) y (3.91), obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{xz} = & -\frac{2\Phi M^- RT_s V_x}{p_s \sqrt{RT_w} \left(1 - \frac{\Phi^2}{5\pi}\right)} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} V_z - \frac{T_w}{T_s} \right) \\ & + \frac{\Phi^2 M^- V_x}{\left(1 - \frac{\Phi^2}{5\pi}\right) p_s} \sqrt{\frac{T_s}{T_w}} \sqrt{\frac{RT_s}{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[\frac{T_w}{T_s} - 1 + \frac{V^2}{5} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{T_w}{T_s}} V_z \right], \end{aligned} \quad (3.93)$$

en donde, observamos que esta expresión depende de los coeficientes de acomodación que caracterizan a la pared y de la velocidad de deslizamiento. De hecho la velocidad de deslizamiento se puede obtener de manera explícita, a partir de las expresiones de los valores frontera del flujo de calor y del tensor viscoso simétrico sin traza, como se verá más adelante.

Finalmente, hallamos una expresión reducida del flujo de partículas normal a la superficie

$$\frac{M^- m \sqrt{RT_s}}{p_s} = \frac{\left[1 + \frac{P_{zz}}{2}\right]}{\sqrt{2\pi}} + \frac{v_z}{2} \left[1 - \frac{2}{5} \frac{Q_z}{\sqrt{2\pi}}\right]. \quad (3.94)$$

Podemos decir, que el escribir en una forma adimensional los valores de frontera nos permite manejar expresiones más claras y cortas. Lo que deseamos ahora es emplear estos resultados en un problema en particular, el flujo Couette. La idea es estudiar el flujo de un gas enrarecido tomando en cuenta las propiedades de la pared presente. Es por ello que en el siguiente capítulo nos proponemos calcular el perfil de velocidad del flujo Couette, introduciendo las propiedades de la pared a través de los valores de frontera de las variables relevantes.

Capítulo 4

Flujo Couette

De manera cualitativa un flujo laminar se caracteriza porque el movimiento macroscópico del fluido se produce en capas, siguiendo trayectorias separadas perfectamente definidas sin existir mezcla o intercambio transversal entre ellas, esto ocurre a velocidades lo bastante bajas para que las fuerzas de viscosidad predominen sobre las fuerzas de inercia, al contrario de lo que ocurre en un flujo turbulento en donde el fluido se mueve de modo errático. Estos flujos pueden ser incompresibles o compresibles: los primeros, se caracterizan porque los cambios en la densidad de un punto a otro son despreciables, en tanto que en los segundos dichas variaciones son importantes.

Uno de los problemas más simples de flujo laminar incompresible, es el llamado flujo de Couette, este problema es muy importante en el estudio de la dinámica de un gas enrarecido, debido a que nos permite obtener información relevante acerca del gas en contacto con una superficie frontera.

El flujo Couette se obtiene cuando se pone un fluido entre dos planos paralelos que están en movimiento relativo con una velocidad constante $u_w \hat{i}$ a lo largo de la dirección x . Las superficies planas se localizan en $z = \pm L$ en el plano $x - y$, y en general se hallan a diferentes temperaturas.

Por comodidad se supone que los planos que forman los límites del flujo se extienden hasta una distancia muy grande, tanto hacia la derecha como la izquierda de la figura (4.1), así como también hacia adelante y atrás de la misma. Con ésto se pueden despreciar los efectos de borde, debido a que éstos se encuentran tan alejados que prácticamente no

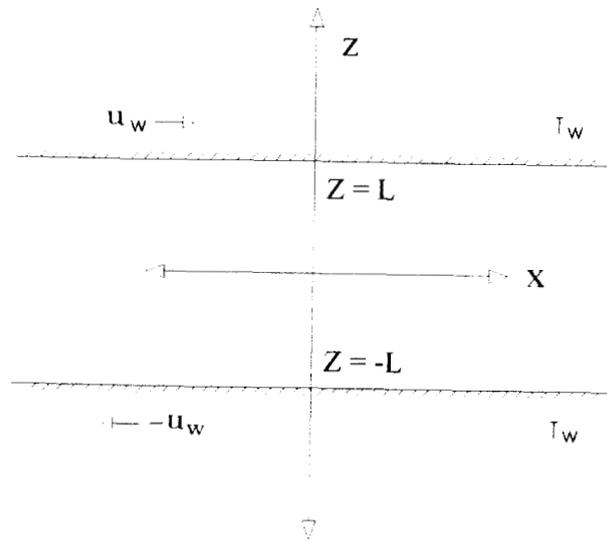


Figura 4.1: Flujo Couette

tienen influencia en el interior del fluido.

Es nuestro interés, abordar el problema del flujo Couette laminar de un gas enrarecido, tomando en cuenta los valores en la frontera de las cantidades relevantes, calculados a partir del modelo cinético propuesto para la interacción gas-pared. En particular, estamos interesados en calcular el perfil de velocidad del flujo tomando en cuenta las características propias de la pared. Nuestro estudio se realiza a partir de las ecuaciones de Grad en la aproximación de trece momentos; en esta aproximación los coeficientes de transporte viscosidad cortante η y de conductividad térmica λ son funciones de la posición, a través de su dependencia con la temperatura. Lo anterior es consistente con la teoría cinética, ya que a través de ésta podemos calcular coeficientes de transporte no constantes de forma analítica [57]. En particular, vamos a explorar las situaciones en las que consideramos a los coeficientes de transporte tanto constantes como dependientes de la posición.

Como punto de referencia, se realiza un breve repaso a la solución del problema flujo Couette en el régimen hidrodinámico, donde precisamente los coeficientes de transporte se consideran constantes y las condiciones de frontera que se emplean son las llamadas condiciones de pegado.

4.1 Aproximación de Navier-Stokes

Cuando se aborda el problema de la dinámica del flujo Couette en el régimen de Navier-Stokes, las ecuaciones de balance de las cantidades que se conservan en las colisiones, junto con las ecuaciones constitutivas de Navier-Newton y de Fourier para el tensor de esfuerzos y el flujo de calor respectivamente, constituyen la base para realizar el estudio del gas enrarecido. Por otra parte, las condiciones de frontera que usualmente se toman en cuenta son las siguientes: en una primera aproximación se supone que las partículas del gas en contacto con la pared se pegan a ella, de tal manera que éstas se mueven a una velocidad $u_w \hat{\mathbf{i}}$, con temperatura T_w . A estas condiciones de frontera se les llama condiciones de pegado.

Se plantea el problema flujo Couette estacionario para un gas enrarecido, donde las paredes planas e infinitas se hallan en el plano $(x-y)$, a una misma temperatura y en movimiento relativo con velocidad $\pm u_w \hat{\mathbf{i}}$ a lo largo de la dirección x , la presión p es constante. Este sistema se caracteriza por la densidad ρ y por los coeficientes de transporte: viscosidad de corte η y conductividad térmica λ , que son tomados como cantidades constantes.

El movimiento del fluido tiene lugar en la dirección x , lo que hace que tengamos un flujo en dos dimensiones $(x-z)$, así las ecuaciones de las variables relevantes las podemos escribir como

$$\frac{\partial u_{0z}}{\partial x} + \frac{\partial u_{0x}}{\partial z} = 0, \quad (4.1)$$

$$\rho \left(u_{0x} \frac{\partial u_{0x}}{\partial x} + u_{0z} \frac{\partial u_{0x}}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p_x}{\partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 u_{0x}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_{0x}}{\partial z^2} \right), \quad (4.2)$$

$$\rho \left(u_{0x} \frac{\partial T}{\partial x} + u_{0z} \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + 2\eta \left[\left(\frac{\partial u_{0x}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_{0z}}{\partial z} \right)^2 \right] + \eta \left(\frac{\partial u_{0z}}{\partial x} + \frac{\partial u_{0x}}{\partial z} \right)^2, \quad (4.3)$$

donde recordamos que hemos empleado las ecuaciones constitutivas de Navier-Newton y Fourier, tomando a los coeficientes de transporte constantes [10, 46].

Por otra parte, hacemos notar que los símbolos p y p_x representan diferentes cantidades físicas, por un lado p es la presión propia del sistema, es decir una propiedad termodinámica, que en este caso es una constante. Y por otro lado, el término que relaciona p_x es considerado como un gradiente de presión externo que se aplica al flujo laminar, de hecho el problema que presenta esta situación se le conoce como el flujo Couette generalizado.

En particular suponemos que no hay gradiente de presiones externo en la dirección x . Por otra parte, observamos que las cantidades importantes sólo dependen de la coordenada z , por lo que las ecuaciones (4.1 - 4.3) se simplifican aún mas

$$\mathbf{u}_0 = u_{0x}(z)\hat{\mathbf{i}}, \quad (4.4)$$

$$\eta \frac{d^2 u_{0x}}{dz^2} = 0, \quad (4.5)$$

$$\lambda \frac{d^2 T}{dz^2} + \eta \left(\frac{du_{0x}}{dz} \right)^2 = 0, \quad (4.6)$$

convirtiéndose en derivadas ordinarias, debido a que las funciones sólo dependen de la variable z .

Para hallar la velocidad del fluido se integra la ecuación (4.5), de lo que se obtiene

$$u_{0x}(z) = u_w \frac{z}{L}, \quad (4.7)$$

donde, hemos introducido la condición frontera de pegado, ya que al evaluar en $z = \pm L$, la solución se reduce a $u_{0x}(\pm L) = \pm u_w$. Como podemos observar, esta solución nos da un perfil de velocidad lineal.

Por otro lado, para calcular el perfil de temperatura en esta aproximación, debemos combinar las ecuaciones (4.6) y (4.7), que nos permite escribir

$$\lambda \frac{d^2 T}{dz^2} = -\eta \left(\frac{u_w}{L} \right)^2, \quad (4.8)$$

así, al integrar la ecuación (4.8) hallamos el perfil de temperatura, en el caso particular en que ambas superficies están a la misma temperatura T_w

$$T(z) = T_w - \frac{\eta u_w^2}{\lambda} \frac{1}{2} \left[\frac{z^2}{L^2} - 1 \right]. \quad (4.9)$$

Como podemos ver en la ecuación (4.9), el campo de temperatura describe una parábola, que es simétrica con respecto al eje x . Para el flujo de Couette, tenemos que hay una diferencia de temperaturas entre el fluido en el centro del canal y las placas paralelas, y precisamente la forma en que va variando la temperatura a lo ancho del canal describe una parábola cuando la temperatura de ambas paredes son iguales. En este caso en particular, el perfil de temperatura se debe a que la disipación de energía es menor en el centro del canal que en las cercanías de las paredes. Aquí los procesos transmisión de energía térmica por conducción son más importantes que los aquellos por convección. Ésto es una consecuencia de que en la ecuación (4.5) los términos convectivos se hayan anulado.

Recordemos que en el proceso de transferencia de energía por conducción, la transferencia de energía térmica se puede ver en una escala atómica como un intercambio de energía cinética entre moléculas, donde las partículas menos energéticas ganan energía al chocar con las partículas más energéticas, arrojando como resultado una conducción de energía.

Hemos visto que cuando se toma a los coeficientes de transporte como cantidades constantes y de considerar a las condiciones de frontera de pegado, los perfiles de velocidad y temperatura para el problema flujo Couette describen una línea recta y una parábola respectivamente. Estas condiciones para los coeficientes y las fronteras, no son las adecuadas cuando se trabaja con gases enrarecidos a través de la teoría cinética [8, 57].

Por un lado sabemos que los coeficientes de transporte se pueden calcular directamente de la ecuación de Boltzmann a través del método de momentos de Grad y que estos no son constantes [57], por lo que es adecuado dejar que estas cantidades sean funciones de la posición. Además, si deseamos tomar en cuenta las propiedades de la pared y la velocidad de deslizamiento en el perfil de velocidad, debemos abandonar las llamadas condiciones de frontera de pegado y obtener las condiciones de frontera adecuadas. Una de las opciones que podemos seguir, es precisamente el trabajar con las condiciones de deslizamiento que hemos discutido en el capítulo anterior, donde se calcularon los valores de fronteras de las cantidades que son relevantes en la aproximación de trece momentos de Grad a través del modelo Maxwelliano de la pared, y que como hemos visto, involucran el salto de temperatura y la velocidad de deslizamiento.

4.2 Aproximación de Grad, λ , η y p funciones de la posición

Con el fin de observar la influencia de la superficie frontera en el comportamiento de un gas enrarecido, abordaremos el flujo Couette a través de las ecuaciones de Grad en la aproximación de trece momentos, tomando como condiciones de frontera las expresiones para \mathbf{Q} y \mathcal{P}° , que fueron calculadas en el capítulo 3. De esta forma, estamos suponiendo que las partículas del gas enrarecido y la pared interactúan de manera especular y difusiva, de manera que tanto el salto de temperatura, así como la velocidad de deslizamiento están presentes.

Consideramos el flujo laminar en estado estacionario de un gas monoatómico, fluyendo entre dos placas planas paralelas e infinitas, que se encuentran en movimiento con velocidad relativa $\pm u_w \hat{\mathbf{i}}$. En el tratamiento más sencillo se supone que ambas superficies están a una misma temperatura T_w y están caracterizadas por los mismos coeficientes de acomodación α y θ ,

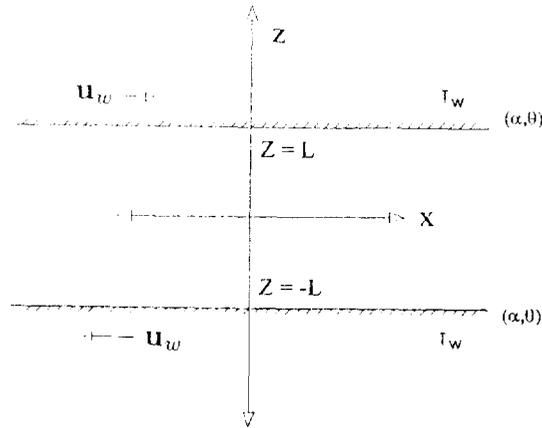


Figura 4.2: Flujo Couette en la aproximación de Grad.

además, no hay gradiente de presión externo que influya sobre el flujo.

El estado estacionario en este flujo se caracteriza por la presión $p_0(z)$ y la temperatura $T_0(z)$. Notemos, que estas dos funciones dependen de la posición, en cambio la densidad ρ_0 la tomamos como una constante.

Con lo anterior, estamos considerando que el estado estacionario del flujo está fuera del equilibrio total, donde algunos de sus parámetros macroscópicos característicos dependen explícitamente de la posición. Es decir, se trata de un estado inhomogéneo.

Como ya se ha mencionado, la descripción del sistema se realizará a través de las ecuaciones de Grad en la aproximación de trece momentos, mismas que se linealizan alrededor del estado inhomogéneo ya descrito. Supondremos que el movimiento del fluido es lo suficientemente lento tal que todos los términos no lineales puedan ser despreciados.

Para realizar la linealización, las variables relevantes las escribimos como:

$$T = T_0 + T', \quad \rho = \rho_0 + \rho', \quad p = p_0 + p', \quad (4.10)$$

donde la ecuación del gas ideal determina la temperatura y la presión en el estado estacionario

$$p_0 = \rho_0 R T_0, \quad (4.11)$$

y

$$p' = \rho_0 R T' + \rho' R T_0, \quad (4.12)$$

en este caso en particular, estamos considerando que el flujo lento se encuentra en un estado estacionario, donde las desviaciones de la temperatura T' son pequeñas en comparación con T_0 de esta manera las ecuaciones de Grad (2.126) las escribimos como

$$\rho_0 (\nabla \cdot \mathbf{u}_0) = 0, \quad (4.13)$$

$$-\nabla p_0 - \nabla \cdot \mathbf{P}^\circ + \frac{\rho_0}{m} \mathbf{F} = 0, \quad (4.14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{q} + p_0 (\nabla \cdot \mathbf{u}_0) = 0, \quad (4.15)$$

$$\frac{5}{2} (\nabla R T_0) \cdot \mathbf{P}^\circ + \frac{5}{2} p_0 (\nabla R T_0) + p_0 \left(\nabla \cdot \frac{\mathbf{P}^\circ}{\rho_0} \right) = -\frac{1}{\tau_q} \mathbf{q}, \quad (4.16)$$

$$2p_0 (\nabla \mathbf{u}_0)^\circ + \frac{4}{5} (\nabla \mathbf{q})^\circ = -\frac{1}{\tau_p} \mathbf{P}^\circ. \quad (4.17)$$

donde \mathbf{F} es una fuerza externa.

Los tiempos de relajamiento que hemos visto ya en el capítulo dos y que están escritos en términos de los coeficientes de transporte, pueden evaluarse sin problema para un potencial central. En esta ocasión empleamos las expresiones de los coeficientes de transporte para el potencial de esfera dura, que escribimos como

$$\lambda = \frac{75}{64\sigma^2} \sqrt{\frac{K_B^3 T_0}{m\pi}}, \quad \eta = \frac{5}{16\sigma^2} \sqrt{\frac{m K_B T_0}{\pi}}. \quad (4.18)$$

donde σ es el diámetro de esfera dura.

En este caso en particular λ y η son funciones de la posición a través de su dependencia con la temperatura.

Estamos considerando que en la capa de gas adyacente a la frontera (*capa de Knudsen*), hay un cambio brusco en el perfil de temperatura, estas variaciones son una consecuencia de la influencia que tiene la pared hacia el interior del gas, pues como hemos mencionado ya en el capítulo anterior, en esta región es donde las colisiones entre las partículas del gas y la frontera son relevantes.

En particular, la temperatura varía de forma abrupta en las fronteras debido a que la pared causa modificaciones al perfil de temperatura a través del calor generado por la fricción en el interior del fluido y que no se puede disipar por conducción térmica (al tomar $\lambda = cte$). Este hecho nos lleva a pensar que, debido a que la disipación de la energía es mayor cerca de la pared que lejos de ella (varias veces la trayectoria libre media), no es del todo conveniente tomar a los coeficientes de transporte como constantes, tal y como sucede en la aproximación de Navier-Stokes.

La idea de trabajar con coeficientes de transporte dependientes de la posición, que es un resultado natural de la teoría cinética, no es nueva, en la literatura [57-64] podemos hallar varios trabajos en donde se estudian los procesos de transporte en gases, tanto en el bulto como en las fronteras, donde se consideran a los coeficientes de transporte como funciones de la posición, en algunos casos éstos se expresan en el espacio de Fourier o en un espacio alterno en donde se emplean algunos cambios de variable particulares.

Por otra parte, al considerar a los coeficientes de transporte como funciones de la posición a través de su dependencia con la temperatura, estamos considerando a los tiempos de relajación de las variables físicas, como cantidades que varían con la posición, según lo haga la razón entre los coeficientes de transporte y la presión

$$\tau_q = \frac{2m\lambda}{2K_B p_0} \sim \frac{1}{\sqrt{T_0}}. \quad (4.19)$$

$$\tau_p = \frac{\eta}{p_0} \sim \frac{1}{\sqrt{T_0}}. \quad (4.20)$$

El hecho de que los tiempos de relajación no sean constantes, nos indica que los efectos de disipación no son los mismos cuando se está cerca de la pared, que cuando se está en el interior del gas a una distancia de la frontera de varias veces la trayectoria libre media.

Las condiciones de simetría impuestas por la geometría, implican que todas las cantidades deben ser independientes de la coordenada y , de esta manera, el flujo se convierte en un problema de dos dimensiones (x, z) . En este caso, las ecuaciones (4.13 - 4.17) se reducen a un conjunto de ecuaciones más simple (ver apéndice A), que se adimensionaliza con las cantidades de referencia que presentamos y discutimos en la sección (3.7) del capítulo anterior

$$\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} = 0, \quad (4.21)$$

$$\frac{dp^*}{dz^*} = F^*, \quad (4.22)$$

$$\frac{dQ_z}{dz^*} = 0, \quad (4.23)$$

$$-\frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \sqrt{T^*} \frac{d}{dz^*} \left(\frac{\mathcal{P}_{xz}}{\rho^*} \right) - \frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mathcal{P}_{xz} K_n}{\sqrt{T^*}} \frac{dT^*}{dz^*} = Q_x, \quad (4.24)$$

$$-\frac{75 K_n}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{T^*} \frac{dT^*}{dz^*} = Q_z, \quad (4.25)$$

$$-\frac{5 K_n}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{T^*} \frac{dv_x}{dz^*} - \frac{K_n}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{T^*}} \frac{dQ_x}{dz^*} = \mathcal{P}_{xz}, \quad (4.26)$$

$$\mathcal{P}_{xx} = \mathcal{P}_{zz} = \mathcal{P}_{xy} = \mathcal{P}_{yz} = 0, \quad (4.27)$$

donde $z = z^* L$, $K_n = \frac{l}{2L}$ es el número de Knudsen y $l = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 n_s}}$ es la trayectoria libre media para esfera dura con una densidad numérica de referencia n_s . Recordemos la forma en que hemos adimensionalizado las variables importantes: $\mathbf{Q} = \frac{\mathbf{q}}{p_s \sqrt{RT_s}}$, $\mathcal{P}^\circ = \frac{\mathcal{P}^\circ}{p_s}$, $T^* = \frac{T}{T_s}$, $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{u}_0}{\sqrt{RT_w}}$, $\mathbf{V} = \frac{\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_w}{\sqrt{RT_s}}$, $p = \frac{p}{p_s}$ y $\rho^* = \frac{\rho}{\rho_s}$.

En la ecuación (4.22), observamos que cuando la fuerza externa \mathbf{F}^* esta ausente, la presión p^* es una constante. Ésto nos indica que la fuerza externa es importante en el sentido

de que nos brinda la oportunidad de trabajar con dos distintas opciones acerca de la condición de la presión.

Hacemos notar que el principal problema aquí, es obtener el perfil de velocidad cuando el efecto de deslizamiento está presente. En este caso, el conjunto de ecuaciones sin dimensiones puede ser manipulado con el fin de obtener la ecuación que satisface la velocidad. En particular, se deriva la ecuación (4.24)

$$\begin{aligned} \frac{dQ_x}{dz^*} = & -\frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \sqrt{T^*} \left(\frac{d^2 \mathcal{P}_{xz}}{dz^{*2}} \right) - \frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mathcal{P}_{xz} K_n}{\sqrt{T^*}} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right) - \frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n}{\sqrt{T^*}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right) \left(\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} \right) \\ & + \frac{75}{32} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mathcal{P}_{xz} K_n}{T^{*3/2}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2. \end{aligned} \quad (4.28)$$

De la ecuación (4.21) vemos que \mathcal{P}_{xz} es una constante, esto nos permite reducir la ecuación anterior a la expresión

$$\frac{dQ_x}{dz^*} = -\frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mathcal{P}_{xz} K_n}{\sqrt{T^*}} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right) + \frac{75}{32} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mathcal{P}_{xz} K_n}{T^{*3/2}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2. \quad (4.29)$$

Posteriormente se sustituye en la ecuación (4.26), de esta forma obtenemos la ecuación para la velocidad del fluido

$$\frac{5}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \sqrt{T^*} \frac{dv_x}{dz^*} = -\mathcal{P}_{xz} \left[1 + \frac{75\pi}{64} \frac{K_n^2}{T^*} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right) - \frac{75\pi}{128} \frac{K_n^2}{T^{*2}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2 \right]. \quad (4.30)$$

Observamos que cuando la temperatura es una constante, recobramos la ecuación usual para el perfil de velocidad del flujo Couette. Es decir, se recupera el caso en que la variación de la velocidad en la posición es una constante Ec. (4.5). Además, notamos que los términos que modifican la ecuación de la velocidad, son de segundo orden en el número de Knudsen, un hecho que indica que estas correcciones son pequeñas cuando consideramos la región de números de Knudsen muy pequeños; éste no es el caso en el régimen de transición donde $K_n \sim 1$.

La ecuación de la velocidad no es complicada y puede integrarse de manera directa, sólo es necesario realizar la integración en una sola variable z^* .

La solución para la ecuación de la velocidad, puede escribirse como

$$v_x(z^*) = v_x(\pm 1) - \frac{4}{5} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\mathcal{P}_{xz}}{K_n} [I_2(z^*) - I_1(z^*) + II_2(z^*) - II_1(z^*) + III_2(z^*) - III_1(z^*)]. \quad (4.31)$$

donde

$$I_{1,2}(z^*) = \int_{-1, z^*}^{z^*, 1} \frac{1}{\sqrt{T^*}} dz^*, \quad (4.32)$$

$$II_{1,2}(z^*) = - \int_{-1, z^*}^{z^*, 1} \frac{75\pi}{64} \frac{K_n^2}{T^{*\frac{3}{2}}} \left(\frac{dT^*}{dz^{*2}} \right) dz^*, \quad (4.33)$$

$$III_{1,2}(z^*) = - \int_{-1, z^*}^{z^*, 1} \frac{75\pi}{128} \frac{K_n^2}{T^{*\frac{5}{3}}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2 dz^*. \quad (4.34)$$

La integrales que escribimos en las ecuaciones (4.32)-(4.34) y que llamamos $I_{1,2}(z^*)$, $II_{1,2}(z^*)$ y $III_{1,2}(z^*)$, representan en realidad las siguientes integrales

$$I_1(z^*) = \int_{-1}^{z^*} (...) dz^*, \quad (4.35)$$

$$I_2(z^*) = \int_{z^*}^1 (...) dz^*, \quad (4.36)$$

...

La solución dada en la ecuación (4.31) toma en cuenta las inhomogeneidades en el campo de la temperatura, así como la variación en los coeficientes de transporte. Por otra parte, las propiedades de la pared aparecen explícitamente en el valor del tensor de presiones \mathcal{P}_{xz} , esta cantidad se obtiene de la ecuación (3.88)

$$\mathcal{P}_{xz} = - \frac{2\Phi}{5\sqrt{2\pi}} Q_x + \frac{2\Phi M^- RT_s}{p_s \sqrt{RT_w}} V_x \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} V_z - \frac{T_w}{T_s} \right), \quad (4.37)$$

donde $\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_w$. Si tomamos en cuenta la simetría que presenta el problema del flujo Couette, es decir $V_z = 0$, y además introducimos la expresión de M^- que aparece en (3.94) en la ecuación (4.37), hallamos

$$\mathcal{P}_{xz} = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\Phi[v_x - v_w]}{\left(1 - \frac{\Phi^2}{5\pi}\right)} + \sqrt{\frac{T_s}{T_w}} \frac{\Phi^2[v_x - v_w]}{\sqrt{2\pi}\left(1 - \frac{\Phi^2}{5\pi}\right)} \left[\frac{T_w}{T_s} - 1 + \frac{[v_x - v_w]^2}{5} \right], \quad (4.38)$$

notamos que esta componente del tensor de presiones depende con la velocidad de deslizamiento $[v_x - v_w]$ y el salto de temperatura $\frac{T_s - T_w}{T_s}$, además de los coeficientes de acomodación que caracterizan a la pared $\Phi = \frac{1 - (\alpha - \theta)}{1 + (\alpha - \theta)}$. Esto nos permite observar los efectos de la pared sobre la velocidad del fluido, cuando se presentan distintas situaciones con los coeficientes de acomodación.

Básicamente, el problema de flujo laminar que nos hemos planteado está resuelto, ya que se ha obtenido la expresión del perfil de velocidad, en términos de cantidades que caracterizan a la superficie frontera [56]. Sin embargo, hace falta analizar el comportamiento cualitativo de la velocidad. Observamos que las integrales (4.32 - 4.34) dependen fuertemente de la temperatura, por lo que es necesario determinar esta cantidad.

4.2.1 Perfil de temperatura

En esta sección se muestra la manera en que se determina el campo de temperatura. para posteriormente, evaluar las integrales que están involucradas en la expresión de la velocidad (4.32 - 4.34).

Mediante una integración directa de la ecuación (4.25), hallamos la expresión

$$T^{*\frac{3}{2}}(z^*) = b - \frac{8}{25} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{Q_z}{K_n} z^*, \quad (4.39)$$

donde b es una constante de integración, aquí definimos una distancia característica δ^* que nos da el alcance de la influencia de la capa de Knudsen

$$\delta^* \equiv \left(\frac{25}{8}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n}{|Q_z|}, \quad (4.40)$$

la expresión para la componente normal del flujo de calor Q_z , se obtiene a partir de las condiciones de frontera. A partir del valor en la frontera para el tensor viscoso simétrico sin traza que ya hemos calculado y que reportamos en la ecuación (3.88), podemos obtener una expresión para la componente (zz) de esta cantidad

$$\mathcal{P}_{zz} = -\frac{2\Phi}{5\sqrt{2\pi}} \frac{2}{3} Q_z + \frac{2\Phi M^- RT_s}{p_s \sqrt{RT_w}} \left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(V_z^2 - \frac{1}{2} V^2 \right) - \frac{4}{3} \frac{T_w}{T_s} V_z \right]. \quad (4.41)$$

Al tomar en cuenta la simetría que presenta el flujo Couette en la velocidad, es decir, $V_z = 0$, obtenemos

$$\mathcal{P}_{zz} = -\frac{2\Phi Q_z}{15} \sqrt{\frac{2}{\pi}} - \frac{2\Phi M^- [v_x - v_w]^2}{3p_s (RT_w)^{1/2}} \sqrt{\frac{\pi}{2}}. \quad (4.42)$$

Al considerar las condiciones de simetría en las ecuaciones de Grad (ver la ecuación (a.10) del apéndice A), hallamos que \mathcal{P}_{zz} es igual a cero, con esto, la ecuación anterior se resuelve para la componente normal del flujo de calor y encontramos

$$Q_z = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{5}{2} \sqrt{\frac{T_s}{T_w}} |v_x - v_w|^2. \quad (4.43)$$

Por otro lado, hacemos uso de la condición de frontera para Q_z , misma que obtenemos de (3.89) y que escribimos como

$$Q_z = -\frac{2\Phi M^-}{\rho_s} \sqrt{RT_s} \left[\left(2\frac{T_w}{T_s} - \frac{5}{2} + \frac{V^2}{2} \right) - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{T_s}{T_w}} \left[\frac{5}{2} \left(\frac{T_w}{T_s} - 1 \right) + \frac{V^2}{2} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{T_w}{T_s}} V_z \right] V_z \right] - \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\mathcal{P}_{zz}}{2} - 1 \right), \quad (4.44)$$

debido a que $V_z = 0$, tenemos que la ecuación (4.44) se reduce a la expresión siguiente

$$Q_z = -\frac{\Phi}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{\mathcal{P}_{zz}}{2} - 1 \right] - \frac{2\Phi m M^- \sqrt{RT_s}}{\rho_s} \left[2\frac{T_w}{T_s} - \frac{5}{2} + \frac{|v_x - v_w|^2}{2} \right], \quad (4.45)$$

enseguida combinamos las ecuaciones (4.43) y (4.45), y resolvemos para Q_z

$$Q_z = -\frac{4\Phi}{\sqrt{2\pi}} \frac{\left(1 - \frac{T_w}{T_s} \right)}{\left(1 + \frac{2\Phi}{5\pi} \sqrt{\frac{T_w}{T_s}} \right)}, \quad (4.46)$$

que depende de los coeficientes de la pared a través de Φ y del salto de temperatura. De hecho, la dependencia de Q_z con el salto de temperatura también fue obtenida por Risso y Cordero [65], la diferencia esta en que la expresión que obtenemos depende de los coeficientes de acomodación que caracterizan a la frontera.

En particular, el flujo de calor normal a la superficie es disipado a través de la pared, la cual mantiene su temperatura constante T_w y como podemos ver en la ecuación (4.46), esta cantidad se anula cuando el salto de temperatura esta ausente. Tal y como sucedería si se emplearan las condiciones de frontera de pegado.

Finalmente el perfil de temperatura es escrito en términos de la distancia de penetración δ^* y de su valor en las fronteras $z^* = \pm 1$, $T(\pm 1) = \frac{T_s - T_w}{T_s}$

$$T^*(z^*) = \left[T^{*\frac{3}{2}}(\pm 1) \mp \frac{1}{\delta^*} (z^* \mp 1) \right]^{\frac{2}{3}}, \quad (0 \leq z^* \leq 1, -1 \leq z^* \leq 0) \quad (4.47)$$

las características del perfil de temperatura se muestran en la figura (4.3), donde se observa una curva casi parabólica. Cuando comparamos con el perfil de temperatura que se obtiene en el régimen de Navier-Stokes, observamos que las dos curvas son semejantes. Por un lado, la expresión de la temperatura que derivamos de las ecuaciones de Grad en la aproximación de trece momentos, depende fuertemente de los coeficientes de transporte y de las características de la pared a través de los coeficientes de acomodación. Por otro lado, en el régimen de Navier-Stokes la temperatura depende de la forma de la velocidad, y en cambio los coeficiente de transporte no son relevantes debido a que son cantidades constantes.

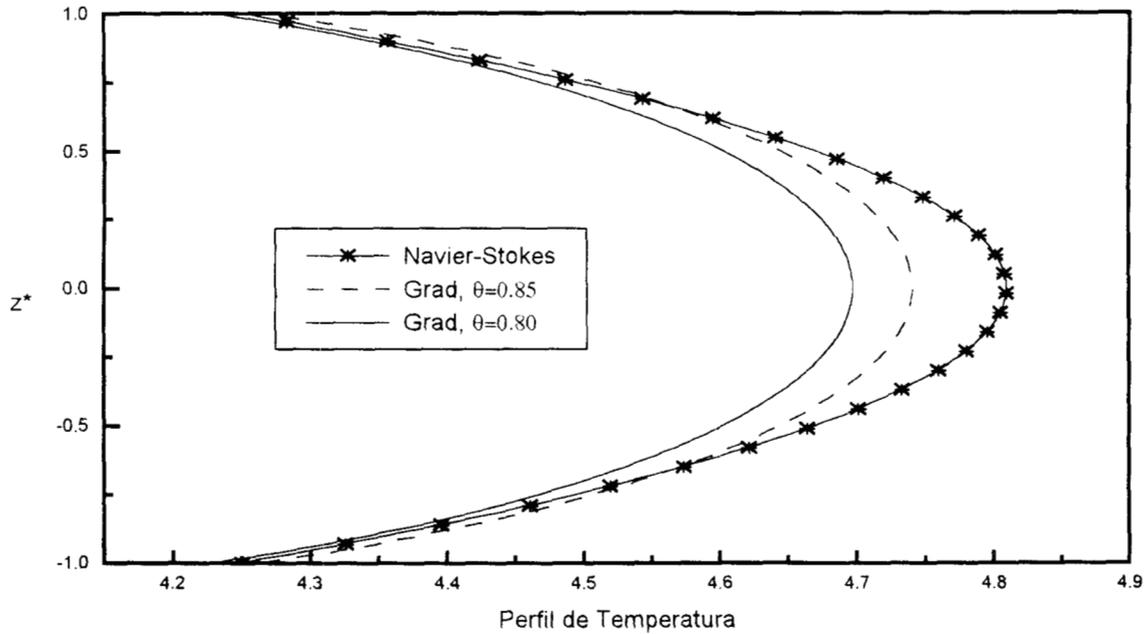


Figura 4.3: La línea con asteriscos representa el perfil de temperatura en la aproximación de Navier-Stokes, la línea continua y la línea discontinua, representan el campo de temperatura correspondiente a la aproximación de Grad en trece momentos, para $\theta = 0.8$ y $\theta = 0.85$ respectivamente.

Observamos que el perfil de temperatura en este régimen, básicamente tiene su origen en la fricción, las deformaciones de la temperatura en las cercanías de la pared se deben a que esta última no es una pared ideal, lo anterior se toma en cuenta al considerar a los coeficientes de transporte como funciones de la posición.

En la ecuación (4.25) vemos que el flujo de calor está relacionado con el coeficiente de conducción térmica y en cambio no se observan términos convectivos, por esta razón decimos que en esta aproximación los efectos de transferencia de energía térmica por conducción son más importantes que aquellos debido a la transferencia de energía por convección.

La diferencia entre estas dos formas de transferencia de energía, es que la primera está ligada al intercambio de energía cinética entre las moléculas que chocan y en la segunda, el medio que se calienta se mueve de un lugar a otro.

Ciertamente la expresión del campo de temperatura que hemos calculado no es una expresión general ni tampoco es la mejor, lo que queremos enfatizar aquí, es que esta cantidad la hemos podido determinar de manera analítica y que además, toma en cuenta las características propias de la pared.

4.2.2 Velocidad de deslizamiento

Otra de las cosas que podemos determinar de forma analítica en este problema de flujo laminar, es la velocidad de deslizamiento $V_x = v_x - v_w$, esta cantidad se determina a partir de la condición de simetría $\mathcal{P}_{zz} = 0$ y de la componente z del flujo de calor en la frontera.

Para hallar la expresión de la velocidad de deslizamiento, se combinan las ecuaciones (4.43) y (4.46), resolviendo para V_x hallamos

$$[v_x - v_w]^2 = \frac{8\Phi}{5\pi} \sqrt{\frac{T_w}{T_s}} \frac{\left(1 - \frac{T_w}{T_s}\right)}{\left(1 + \frac{2\Phi}{5\pi} \sqrt{\frac{T_w}{T_s}}\right)}, \quad (4.18)$$

donde es clara la influencia del salto de temperatura y las propiedades de la pared. Como podemos notar, la velocidad de deslizamiento llega a ser igual a la velocidad de la pared, cuando la temperatura en el gas cerca de la frontera es igual a la de la pared, esto significa que no habrá deslizamiento cuando no se tenga salto en la temperatura. Esta situación es posible debido a que las partículas en el fluido colisionan de forma inelástica con la pared y también pueden ser absorbidas, de aquí que la energía cinética promedio en la capa frontera no corresponda a la energía de la pared ni a la energía del bulto.

Aquí en esta aproximación, la principal hipótesis hecha es que el salto de temperatura juega un papel importante en la capa frontera. Esta característica es clara cuando suponemos que los coeficientes de transporte son funciones de la posición a través de la temperatura, ello en la capa delgada de gas adyacente a la frontera. Esto significa, que el proceso de colisión entre las partículas en el gas y la pared ocurre en una forma en que el transporte de energía, no es cuantificado de manera suficiente con coeficientes de transporte constantes. En otras palabras, podemos decir que el fenómeno que estamos estudiando está presente debido a que la pared no es ideal.

Por otro lado, a través de la ecuación (4.40), podemos escribir la velocidad de deslizamiento en términos del número de Knudsen y la distancia de penetración

$$V_x^2 = \frac{5}{4} \sqrt{\frac{T_w}{T_s}} \frac{K_n}{\delta^*}, \quad (4.49)$$

expresión que muestra que la velocidad de deslizamiento crece con el número de Knudsen, resultado que concuerda con lo reportado en la literatura [12].

Después de hallar la expresión para la temperatura, calculamos las integrales (4.32 - 4.34). En la figura (4.4), mostramos el perfil de velocidad para números de Knudsen no tan pequeños y un potencial de esfera dura, en el que se muestran algunas diferencias con el comportamiento del flujo Couette usual (línea recta); estas diferencias son debidas al efecto de deslizamiento causado por el salto en la temperatura.

Observamos que cuando la probabilidad de reflexión difusiva θ es cada vez más cercana a uno y el salto de temperatura está presente, entonces el efecto de deslizamiento es más evidente en la curva. Lo que significa que cuando un gran número de partículas incidentes son difusivamente reflejadas y la capa de Knudsen está presente, la influencia de la pared en el flujo será mayor. Por otra parte, vemos que el comportamiento cualitativo de la velocidad que se muestra en la figura (4.4) es el mismo que se reporta en otros trabajos [42, 58]. Con el fin de observar sin problemas la presencia del efecto de deslizamiento, vamos a usar los siguientes valores: $T_w = 79\text{K}$ y $T_s = 294\text{K}$, que corresponde a un salto de temperatura $\frac{T_s - T_w}{T_s} = 0.731$.

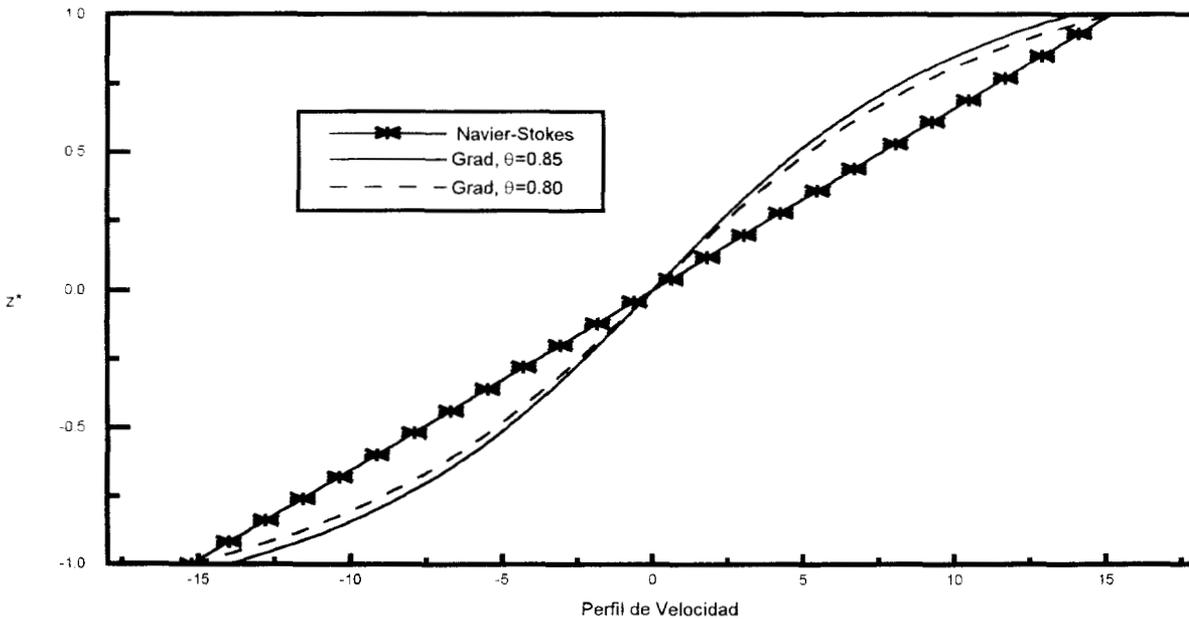


Figura 4.4: Las líneas continua ($\theta = 0.8$) y discontinua ($\theta = 0.85$) corresponden al perfil de velocidad en la aproximación de Grad en trece momentos con $\alpha = 1$, y la línea con asteriscos representa el perfil de velocidad usual con $K_n \ll 1$.

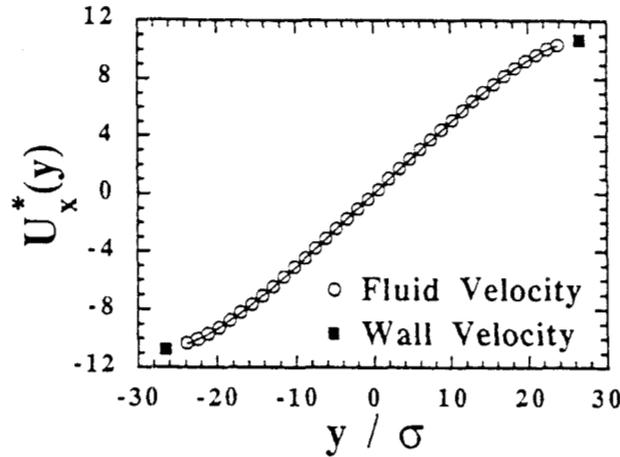


Figura 4.5: Perfil de velocidad para el flujo Couette obtenido mediante dinámica molecular, ver ref. [58]

Como ya hemos mencionado, los valores de frontera que calculamos en el capítulo 3, son una corrección a los valores de frontera de pegado. En estos valores no se toma en cuenta de forma explícita el defecto de la velocidad que es provocado en parte por la naturaleza de las colisiones entre las partículas y la pared. En este capítulo, hemos visto que el defecto de la velocidad es provocado por las variaciones bruscas de la temperatura en las cercanías de la pared, lo que nos hace suponer que el transporte de energía y su disipación, no corresponde a una descripción en donde se toman los coeficientes de transporte como constantes.

Finalmente, observamos que cualitativamente hallamos resultados semejantes a aquellos que se han obtenido usando métodos más complejos [17, 32, 36, 38, 58]. Los resultados que hallamos, muestran que la velocidad del fluido en la capa adyacente a la frontera no es igual a la velocidad misma de la pared, en su lugar hay un deslizamiento del fluido en la superficie frontera. La magnitud de este deslizamiento, depende de las propiedades del fluido y la pared, así como también de la geometría del problema.

Al querer comparar la expresión para la velocidad de deslizamiento que hemos obtenido con otros trabajos, encontramos que usualmente no se reporta esta cantidad, sino que en su lugar, se reportan las distancias de deslizamiento ζ_T y ζ_v , que precisamente están definidas en términos de la velocidad de deslizamiento y del salto de temperatura [38, 48, 66, 67].

4.2.3 Coeficientes de deslizamiento

Como sabemos, cuando un gas enrarecido fluye cerca de una superficie frontera, se presenta el llamado efecto de deslizamiento. En esta región, la velocidad del fluido no es igual a la de la pared aun cuando sólo estén presentes colisiones difusivas entre las partículas del gas y la frontera.

Debido a que el fenómeno de deslizamiento ocurre a una escala de sólo unas pocas trayectorias libre media, éste es difícil de medir de forma experimental, así como también lo es, el medir los coeficientes de deslizamiento relacionados a la velocidad ζ_v y al salto de temperatura ζ_T (el significado de estas cantidades fue dado en la sección (3.1), (ec. 3.2). Una opción que podemos seguir para realizar una estimación de estos parámetros, la constituyen las técnicas de simulación: dinámica molecular [40] y la simulación directa de Monte Carlo [66]. Otra opción, es la de calcular de manera analítica estas cantidades, partiendo de alguna ecuación cinética (Boltzmann lineal, BGK, etc.). Al respecto encontramos varios trabajos en donde estas cantidades han sido calculadas a partir de una ecuación cinética [8, 18, 19, 50], misma que es resuelta por medio de un principio variacional, el método de Chapman-Enskog, entre otros.

En este trabajo, observamos que estas mismas longitudes de deslizamiento ζ_v y ζ_T , pueden ser calculadas de manera directa a través de las ecuaciones de Grad en la aproximación de trece momentos.

Para calcular la distancia característica del fenómeno de deslizamiento relacionado a la temperatura ζ_T , sustituimos en la ecuación (4.50) las expresiones del campo de temperatura y la derivada de éste, con respecto a z^*

$$\zeta_T \equiv \frac{T^*(z^*)|_{z^*=1}}{\frac{d}{dz^*}T^*(z^*)|_{z^*=1}}, \quad (4.50)$$

al sustituir la expresión para el perfil de temperatura y su variación con z^* , hallamos

$$\zeta_T = \frac{75}{32} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n}{Q_z}, \quad (4.52)$$

tomando $T_w = 79K$, $T_s = 294K$ ($T_w/T_s = 0.268$) y $\theta = 1$, es decir, cuando tenemos el caso en que solo hay colisiones difusivas, hallamos

$$\zeta_T = \frac{5\sqrt{\pi}}{8}(1.4576942)K_n. \quad (4.52)$$

Con el fin de comparar nuestros resultados con aquellos que se han reportado en la literatura, en la ecuación anterior hemos usado la siguiente expresión del número de Knudsen

$$K_n = \frac{l_\nu}{L}, \quad (4.53)$$

donde l_ν es la trayectoria libre media propuesta por Cercignani [4] y que se escribe como

$$l_\nu = \frac{4\lambda_0}{15R\rho} \left(\frac{\pi m}{2K_B T_{eq}} \right)^{1/2}, \quad (4.54)$$

donde λ_0 es la conductividad térmica en equilibrio. l_ν esta relacionada a la trayectoria libre media para esferas duras $l = \frac{1}{\sqrt{2}\pi\sigma^2 n_s}$, a través de la relación

$$l = \frac{16}{15\sqrt{\pi}}l_\nu. \quad (4.55)$$

Por otra lado, Loyalka y Ferziger [18] calcularon este mismo parámetro, partiendo de la ecuación de Boltzmann linealizada, resolviéndola mediante un principio variacional, de lo que hallaron

$$\zeta_T = \frac{5\sqrt{\pi}}{8}(1.1136)K_n. \quad (4.56)$$

En otro trabajo, realizado por Kline y Kušcer donde de nueva cuenta se parte de la ecuación de Boltzmann linealizada, que es resuelta a través de un principio variacional [50], se encontró

$$\zeta_T = \frac{5\sqrt{\pi}}{8}(1.1056219)K_n. \quad (4.57)$$

Observamos que nuestro resultado está 23% y 24% por arriba de (4.56) y (4.57) respectivamente. El resultado que obtenemos es debido a que los coeficientes de transporte son cantidades no constantes, esto nos dice que los procesos de disipación de la energía, son debidos principalmente por fricción, y que estos no son iguales cuando se esta cerca de la frontera que lejos (varias veces la trayectoria libre media) de ella.

Aunque en los trabajos con los que comparamos son obtenidos mediante métodos variacionales donde se retienen una mayor cantidad de términos, los coeficientes de transporte se toman como cantidades constantes. En todos los trabajos se toman en cuenta los coeficientes de acomodación.

De la misma manera podemos calcular la distancia característica del fenómeno de deslizamiento relacionado a la velocidad ζ_v

$$\zeta_v \equiv \frac{v_x(z^*)|_{z^*=1}}{\frac{d}{dz^*}v_x(z^*)|_{z^*=1}}, \quad (4.58)$$

después de sustituir la expresión de la velocidad y de la variación en z^* de esta misma función, hallamos

$$\zeta_v = -\frac{5}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n}{\mathcal{P}_{xz}} v_s \left[1 + \frac{1}{75} \frac{Q_z^2}{2} \right], \quad (4.59)$$

que nos da una línea recta cuando graficamos contra el número de Knudsen, al igual que en la aproximación que hiciera Maxwell [8, 66].

En particular, si tomamos $T_w = 79K$, $T_s = 294K$ y $\theta = 1$, hallamos

$$\zeta_v = \sqrt{\pi} (0.3515227) K_n, \quad (4.60)$$

donde hemos empleado $l = \frac{16}{15\sqrt{\pi}} (1.5104539) l_v$ con el fin de poder comparar con los resultados que obtuvieron Klinc y Kušcer [50], donde

$$\zeta_v = \sqrt{\pi} (0.5505065) K_n. \quad (4.61)$$

Vemos que el resultado que obtuvimos está 36% por arriba de (4.61). Suponemos que una de las razones de tener tal distanciamiento entre los resultados, es debido a que no tomamos en cuenta las variaciones de la densidad, además por supuesto, de manejar un modelo de fronteras limitado.

En esencia, la diferencia entre nuestros resultados y los ya reportados en la literatura, es que los nuestros son obtenidos de una manera sencilla y nos muestran que tanto el coeficiente de salto de temperatura como el de deslizamiento dependen de las características de la pared y del salto de temperatura.

4.3 λ y η constantes, p función de la posición

En esta sección calculamos el perfil de velocidad del flujo Couette, esta vez tomando a los coeficientes de transporte como cantidades constantes. Lo anterior lo realizamos con el fin de revisar las diferencias que surgen en el perfil de velocidad del flujo laminar, cuando comparamos con los resultados que obtuvimos en la sección anterior.

Nuevamente se considera al flujo laminar en un estado estacionario, que es descrito por las ecuaciones de Grad, mismas que se linealizan alrededor del estado inhomogéneo caracterizado por la presión $p_0(z) = \rho_0 R T_0(z)$.

Los coeficientes de transporte son tomados como cantidades constantes, en particular para el potencial de esfera dura tenemos

$$\lambda = \frac{75}{64\sigma^2} \sqrt{\frac{K_B^3 T_s}{m\pi}}, \quad \eta = \frac{5}{16\sigma^2} \sqrt{\frac{m K_B T_s}{\pi}}. \quad (4.62)$$

donde la temperatura T_s es una cantidad constante.

Por otro lado, la presión es una función de la posición a través de la temperatura del fluido, de esta manera tenemos que los tiempos de relajación son cantidades que varían según lo haga el inverso de la presión

$$\tau_q = \frac{2m\lambda}{2K_B p_0} \sim \frac{1}{T_0}, \quad (4.63)$$

$$\tau_p = \frac{\eta}{p_0} \sim \frac{1}{T_0}. \quad (4.64)$$

Comparando con los resultados de la sección 4.2, podemos decir que los tiempos de relajamiento de las variables \mathbf{q} y \mathbf{P}° son menores, que aquellos que se obtuvieron en el caso anterior.

Al considerar los coeficientes de transporte como cantidades constantes, estamos suponiendo que los efectos de la viscosidad sobre el movimiento del fluido son mayores.

Por otra parte, el conjunto de ecuaciones (4.13-4.17) sigue siendo válido. En este caso en particular, los cambios que surgen tienen que ver con las ecuaciones adimensionalizadas, pues ahí es donde se toma en cuenta de manera explícita que los coeficientes de transporte son constantes. Lo anterior lo podemos ver en las ecuaciones para las variables físicas \mathcal{P}° y \mathbf{q}

$$\begin{aligned} \frac{5}{2}(\nabla RT_0) \cdot \mathbf{P}^\circ + \frac{5}{2}p_0(\nabla RT_0) + p_0 \left(\nabla \cdot \frac{\mathbf{P}^\circ}{\rho} \right) &= -\frac{1}{\bar{\tau}_q} \mathbf{q} = -\frac{5p_0 K_B}{2m\lambda} \mathbf{q}, \\ 2p_0(\nabla \mathbf{u})^\circ + \frac{4}{5}(\nabla \mathbf{q})^\circ &= -\frac{1}{\bar{\tau}_p} \mathbf{P}^\circ = -\frac{p_0}{\eta} \mathbf{P}^\circ. \end{aligned}$$

Una vez que las condiciones de simetría se toman en cuenta, las ecuaciones de Grad adimensionales se escriben como

$$\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} = 0, \quad (4.65)$$

$$\frac{dp^*}{dz^*} = F^*, \quad (4.66)$$

$$\frac{dQ_z}{dz^*} = 0, \quad (4.67)$$

$$-\frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} - \frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mathcal{P}_{xz} K_n}{T^*} \frac{dT^*}{dz^*} = Q_x, \quad (4.68)$$

$$-\frac{16}{75 K_n} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{dT^*}{dz^*} = Q_z, \quad (4.69)$$

$$-\frac{5 K_n}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{dv_x}{dz^*} - \frac{K_n}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{T^*} \frac{dQ_x}{dz^*} = \mathcal{P}_{xz}, \quad (4.70)$$

$$\mathcal{P}_{xx} = \mathcal{P}_{zz} = \mathcal{P}_{xy} = \mathcal{P}_{yz} = 0, \quad (4.71)$$

otra vez, $z = z^* L$, $K_n = \frac{l}{2L}$ es el número de Knudsen y $l = \frac{1}{\sqrt{2}\pi\sigma^2 n_s}$ la trayectoria libre media para esfera dura.

A partir del conjunto de ecuaciones que acabamos de mostrar, procedemos a escribir la ecuación de evolución para la velocidad del fluido. Para determinar esta ecuación, se deriva el flujo de calor Q_x con respecto a la variable z^* ,

$$\frac{dQ_x}{dz^*} = -\frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \left(\frac{d^2 \mathcal{P}_{xz}}{dz^{*2}} \right) - \frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mathcal{P}_{xz} K_n}{T^*} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right) + \frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n}{T^2} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2. \quad (4.72)$$

Debido a (4.65), la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{dQ_x}{dz^*} = -\frac{75 K_n \mathcal{P}_{xz}}{16 T^*} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right) + \frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n}{T^2} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2, \quad (4.73)$$

Antes de sustituir la expresión de arriba en la ecuación (4.70), revisamos la ecuación para el flujo de calor normal a la superficie frontera Q_z .

En la ecuación (4.69) vemos que la variación en la posición por parte de la temperatura es una constante

$$-\frac{75 K_n}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{dT^*}{dz^*} = Q_z, \quad (4.69)$$

lo que nos arroja como resultado que la segunda derivada en la posición por parte de la temperatura se iguala a cero. Lo anterior nos permite simplificar la ecuación (4.73)

$$\frac{dQ_x}{dz^*} = \frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n}{T^2} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2, \quad (4.74)$$

esta expresión se sustituye en la ecuación (4.70). De esta manera obtenemos la ecuación para el campo de velocidad del fluido, que se escribe como

$$\frac{5}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \frac{dv_x}{dz^*} = -\mathcal{P}_{xz} \left[1 + \frac{75\pi}{64} \frac{K_n^2}{T^{*3}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2 \right]. \quad (4.75)$$

De nueva cuenta observamos que cuando la temperatura es constante, el término que nos indica la desviación del régimen hidrodinámico en la ecuación de arriba se anula, con lo que obtenemos la solución usual para el perfil de velocidad. Como podemos ver, la ecuación (4.75) también involucra términos cuadráticos en el número de Knudsen, lo que nos indica que estas contribuciones se desprecian cuando se trabaja con números de Knudsen muy pequeños.

La solución de la ecuación para la velocidad es

$$v_x(z^*) = v_x(\pm 1) - \frac{4}{5} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\mathcal{P}_{xz}}{K_n} [2z^* + I_2(z^*) - I_1(z^*)], \quad (4.76)$$

donde

$$I_{1,2}(z^*) = - \int_{-1, z^*}^{z^*, 1} \frac{75\pi}{64} \frac{K_n^2}{T^{*2}} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right) dz^*. \quad (4.77)$$

Nuevamente

$$\begin{aligned}
 I_1(z^*) &= \int_{-1}^{z^*} (\dots) dz^*, \\
 I_2(z^*) &= \int_{z^*}^1 (\dots) dz^*, \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 &\vdots
 \end{aligned}$$

Por otra parte, las características propias de la pared son tomadas en cuenta a través del tensor viscoso (3.88), en particular por \mathcal{P}_{xz} . No es de extrañarse que la expresión de esta cantidad no varíe, pues ésta además de ser una constante, fue calculada a través de una función de distribución en donde los coeficientes de transporte no están involucrados de manera directa

$$\mathcal{P}_{xz} = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\Phi V_x}{\left(1 - \frac{\Phi^2}{5\pi}\right)} + \frac{\Phi^2 V_x}{\sqrt{2\pi} \left(1 - \frac{\Phi^2}{5\pi}\right)} \sqrt{\frac{T_s}{T_w}} \left[\frac{T_w}{T_s} - 1 + \frac{V_x^2}{5} \right]. \quad (4.78)$$

Como hemos podido ver, la ecuación de la velocidad en este caso en particular presenta algunas diferencias en comparación con la ecuación que se obtuvo en el caso anterior. En ambos casos la solución involucra de manera directa al campo de temperatura, por lo que es preciso calcular esta cantidad. En este caso en particular, procedemos a calcular el campo de temperatura con el fin de ver el comportamiento cualitativo de la velocidad y así comparar con los resultados que se obtuvieron en la sección anterior.

4.3.1 Perfil de temperatura

Para calcular el perfil de temperatura, realizamos una integración directa de la expresión del flujo de calor, misma que está escrita en términos de la variación de la temperatura con la posición, en particular integramos la ecuación (4.69). De lo anterior hallamos una expresión para el perfil de temperatura en el fluido

$$T^*(z^*) = b - \frac{16}{75} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{Q_z}{Kn} z^*, \quad (4.79)$$

b es la constante de integración, la distancia característica δ^* tiene ahora la expresión

$$\delta^* = \left(\frac{75}{16}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{Kn}{|Q_z|}, \quad (4.80)$$

Q_z es conocida y su expresión se encuentra en la ecuación (4.41). Por otra parte, para calcular b , es necesario evaluar la ecuación (4.79) en $z^* = \pm 1$. Una vez determinada la constante de integración, se sustituye su expresión y hallamos el perfil de temperatura que escribimos de la siguiente manera

$$T^*(z^*) = T^*(\pm 1) \mp \frac{1}{\delta^*} (z^* \mp 1). \quad (4.76)$$

Vemos ahora, que esta ecuación difícilmente describe una parábola, con lo que notamos que el comportamiento del campo de temperatura es muy distinto en comparación del régimen de Navier-Stokes y del caso anterior. De hecho, ésta es una de las razones por las que propusimos trabajar con coeficientes de transporte no constantes.

En la figura (4.5), podemos observar el comportamiento cualitativo de la velocidad del fluido. Claramente se observan las diferencias entre las dos aproximaciones, nos referimos al hecho de considerar a los coeficientes de transporte como funciones de la posición y luego tener estas mismas cantidades como constantes.

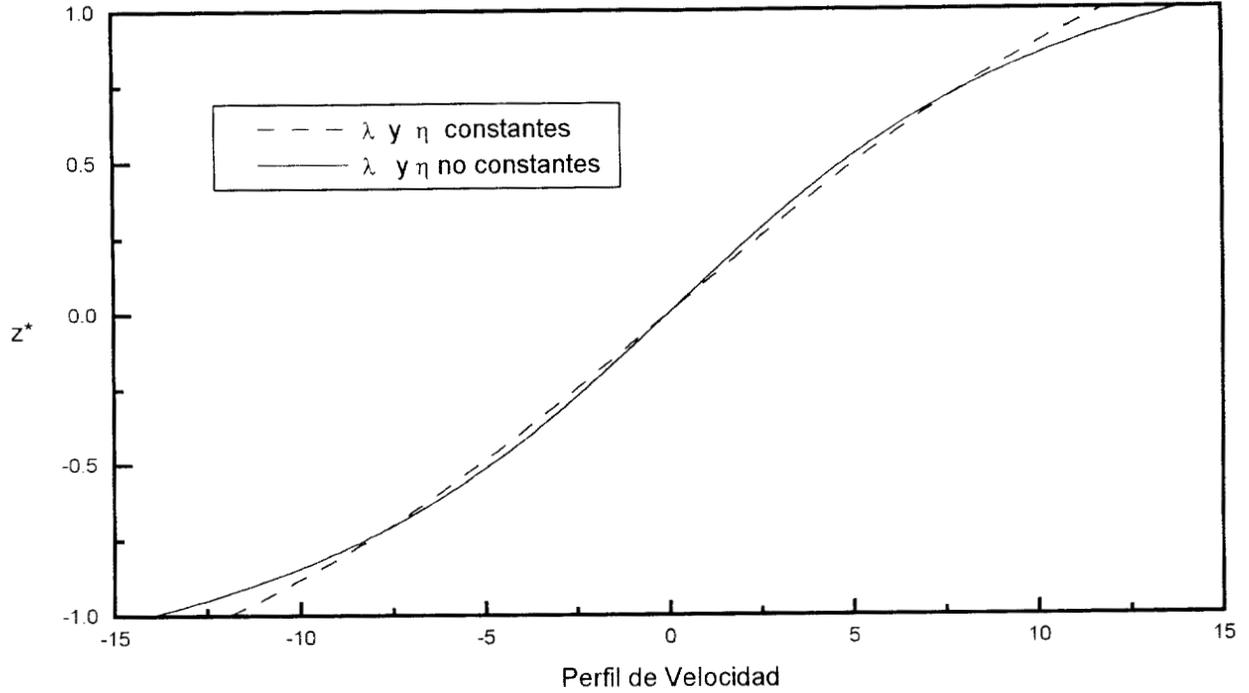


Figura 4.5: Perfil de velocidad en la aproximación de Grad en trece momentos. $K_n = 0.1$ y $\theta = 0.8$

4.3.2 Coeficientes de deslizamiento

Para este caso en particular, hallamos que el coeficiente del salto de temperatura es el mismo que en la sección anterior

$$\zeta_T = \frac{5\sqrt{\pi}}{8}(1.4576942)K_n, \tag{4.77}$$

y que el coeficiente de deslizamiento es

$$\zeta_v = \sqrt{\pi}(0.3002274)K_n, \tag{4.78}$$

donde observamos que no hay grandes variaciones.

4.4 λ y η funciones de la posición y p constante

Hasta aquí, hemos explorado la situación particular en que los coeficientes de transporte son constantes o funciones de la posición, manteniendo a la presión como una cantidad que depende también de la variable z^* a través de la temperatura. Ahora, estamos interesados en abordar el problema flujo Couette, en el caso particular en que los coeficientes de transporte dependan de la posición y la presión sea una constante. De hecho, la influencia de la presión en el perfil de velocidad es un aspecto importante que nos interesa abordar aquí.

En esta sección consideramos el caso en que el flujo laminar está a una presión constante

$$p_0 = R\rho_0(z)T_0(z), \quad (4.79)$$

donde la densidad es una función de la posición, así como la temperatura, de tal manera que al combinarse resulta una presión constante. En esta situación particular, hallamos que los tiempos de relajación no son constantes y dependen de la temperatura

$$\tau_q = \frac{2m\lambda}{2K_B p_0} \sim \sqrt{T_0}, \quad (4.80)$$

$$\tau_p = \frac{\eta}{p_0} \sim \sqrt{T_0} \quad (4.81)$$

podemos decir que los tiempos característicos de las variables físicas son mayores que aquellos que se obtuvieron en las situaciones anteriores.

En este caso en particular el conjunto de ecuaciones de Grad se escribe como

$$\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} = 0, \quad (4.82)$$

$$\frac{dp^*}{dz^*} = 0, \quad (4.83)$$

$$\frac{dQ_z}{dz^*} = 0, \quad (4.84)$$

$$-\frac{15}{8}\sqrt{\frac{\pi}{2}}K_n\sqrt{T^*}\frac{d}{dz^*}\left(\frac{\mathcal{P}_{xz}}{\rho^*}\right) - \frac{75}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathcal{P}_{xz}K_n}{\rho^*\sqrt{T^*}}\frac{dT^*}{dz^*} = Q_x, \quad (4.85)$$

$$-\frac{75K_n}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sqrt{T^*}\frac{dT^*}{dz^*} = Q_z, \quad (4.86)$$

$$-\frac{5K_n}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sqrt{T^*}\frac{dv_x}{dz^*} - \frac{K_n}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{1}{\rho^*\sqrt{T^*}}\frac{dQ_x}{dz^*} = \mathcal{P}_{xz}, \quad (4.87)$$

$$\mathcal{P}_{xx} = \mathcal{P}_{zz} = \mathcal{P}_{xy} = \mathcal{P}_{yz} = 0. \quad (4.88)$$

Con el fin de determinar la ecuación para la velocidad, se toma la variación Q_x con respecto a la variable z^*

$$\begin{aligned} \frac{dQ_x}{dz^*} = & -\frac{15}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{K_n\mathcal{P}_{xz}}{\sqrt{T^*}}\left(\frac{d}{dz^*}\frac{1}{\rho^*}\right)\left(\frac{dT^*}{dz^*}\right) - \frac{75}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathcal{P}_{xz}K_n}{p^*}\sqrt{T^*}\left(\frac{d^2T^*}{dz^{*2}}\right) \\ & - \frac{75}{32}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{K_n\mathcal{P}_{xz}}{p^*\sqrt{T^*}}\left(\frac{dT^*}{dz^*}\right)^2 - \frac{15}{8}\sqrt{\frac{\pi}{2}}K_n\sqrt{T^*}\mathcal{P}_{xz}\left(\frac{d^2}{dz^{*2}}\frac{1}{\rho^*}\right). \end{aligned} \quad (4.89)$$

Antes de calcular la ecuación de la velocidad, revisaremos la expresión de la temperatura y la densidad, con el fin de simplificar al máximo la ecuación (4.89).

De la ecuación (4.86), observamos que el perfil de temperatura es el mismo que se obtuvo en la sección (4.2)

$$T^*(z^*) = \left[T^{*\frac{3}{2}}(\pm 1) \mp \frac{1}{\delta^*}(z^* \mp 1) \right]^{\frac{2}{3}}. \quad (0 \leq z^* \leq 1, -1 \leq z^* \leq 0)$$

Ahora, para hallar la expresión de la densidad, hacemos uso de la ecuación de estado adimensional

$$p^* = \rho^*T^*, \quad (4.90)$$

estamos suponiendo que la presión es una constante por lo que podemos establecer $p_0 = p_s$, de esta manera $p^* = \frac{p_0}{p_s} = 1$, de lo anterior, escribimos

$$\rho^* = \frac{1}{T^*}, \quad (4.91)$$

hallamos que la densidad es inversamente proporcional a la temperatura, si usamos lo anterior en la ecuación (4.89), hallamos la expresión

$$\begin{aligned} \frac{dQ_x}{dz^*} = & -\frac{15}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n \mathcal{P}_{xz}}{\sqrt{T^*}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2 - \frac{75}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mathcal{P}_{xz} K_n}{p^*} \sqrt{T^*} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right) \\ & - \frac{75}{32} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n \mathcal{P}_{xz}}{p^* \sqrt{T^*}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2 - \frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \sqrt{T^*} \mathcal{P}_{xz} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right). \end{aligned} \quad (4.92)$$

Se ordenan los términos para simplificar la ecuación anterior

$$\frac{dQ_x}{dz^*} = -\frac{15}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K_n \mathcal{P}_{xz}}{\sqrt{T^*}} \left(1 + \frac{5}{2p^*} \right) \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2 - \frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \sqrt{T^*} \mathcal{P}_{xz} \left(1 + \frac{5}{2p^*} \right) \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right). \quad (4.93a)$$

$$\frac{dQ_x}{dz^*} = -\frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \mathcal{P}_{xz} \left(1 + \frac{5}{2p^*} \right) \left[\sqrt{T^*} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right) + \frac{1}{2\sqrt{T^*}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2 \right]. \quad (4.93b)$$

Si se sustituye la expresión de la temperatura en la ecuación anterior, vemos que

$$\sqrt{T^*} \left(\frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} \right) = -\frac{1}{2\sqrt{T^*}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2, \quad (4.94)$$

por lo que la ecuación (4.93) se anula,

$$\frac{dQ_x}{dz^*} = 0. \quad (4.95)$$

Como una consecuencia vemos que la componente x del flujo de calor es constante y no influye en la ecuación de la velocidad.

De acuerdo con la ecuación (4.87), la ecuación para la velocidad es

$$\frac{5}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \sqrt{T^*} \frac{dv_x}{dz^*} = -\mathcal{P}_{xz}. \quad (4.96)$$

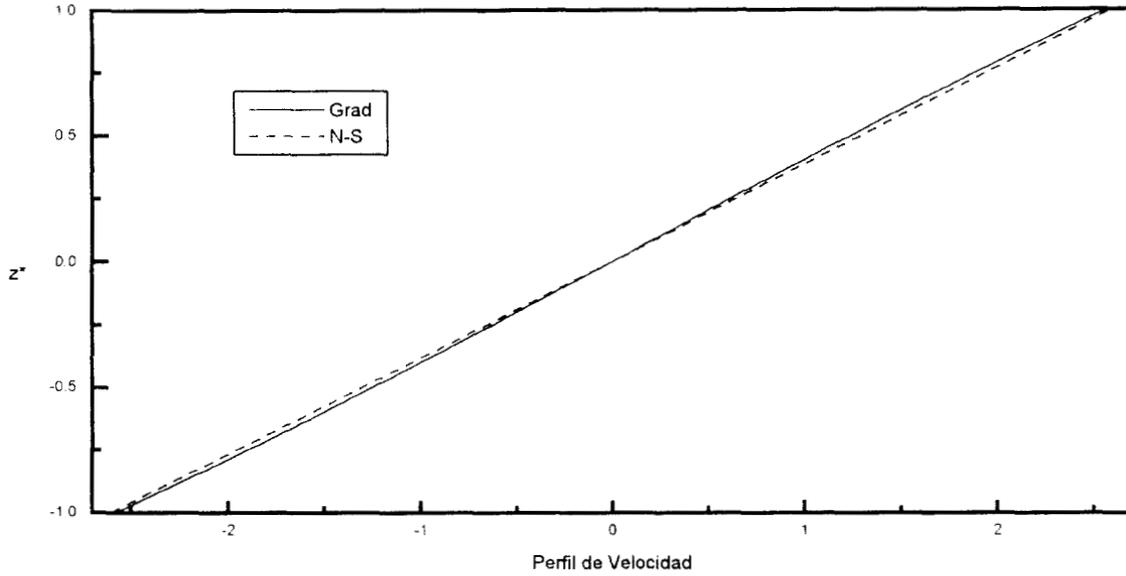


Figura 4.6: Perfil de velocidad, cuando la presión es constante, $\theta = 0.8$ y $K_n = 0.1$

Esta ecuación toma en cuenta la variación de la temperatura y de la densidad en el fluido. Al imponer que la presión se mantenga constante, observamos que la contribución de la temperatura en el efecto de deslizamiento, en parte se ve anulada por la variación de la densidad, de esta manera la variación de la velocidad resulta ser inversamente proporcional al coeficiente de conductividad térmica

$$v_x(z^*) = v_x(\pm 1) - \frac{4}{5} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\mathcal{P}_{xz}}{K_n} [I_2(z^*) - I_1(z^*)], \quad (4.97)$$

donde

$$I_{1,2}(z^*) = - \int_{-1, z^*}^{z^*, 1} \frac{1}{\sqrt{T^*}} dz^*, \quad (4.98)$$

En la figura (4.6), se muestra que el efecto de deslizamiento en este caso en particular se presenta en menor grado que cuando la presión no es constante.

Por otra parte, la expresión de \mathcal{P}_{xz} se halla en la ecuación (4.35), que sigue siendo válida para esta situación en que la presión es una constante. Lo mismo sucede con la velocidad de deslizamiento (Ec. 4.43).

4.4.1 Coeficientes de deslizamiento

En esta ocasión, el coeficiente del salto de temperatura es

$$\zeta_T = \frac{5\sqrt{\pi}}{8}(1.4576942)K_n, \quad (4.99)$$

que coincide con el que se obtuvo en los dos casos anteriores. Por otro lado, que el coeficiente de deslizamiento es

$$\zeta_v = \sqrt{\pi}(0.3103136)K_n, \quad (4.100)$$

donde podemos observar que las diferencias son mínimas.

4.5 η , λ constantes y p constante

En esta sección, queremos calcular el perfil de velocidad del flujo laminar en el caso en que los coeficientes de transporte sean constantes, así como la presión. En esta situación en particular, los tiempos de relajación de las variables físicas son constantes y a su vez menores que aquellos que empleamos en la sección anterior, pero mayores que los tiempos de la sección 4.2

$$\tau_q = \frac{2m\lambda}{2K_B p_0} \sim \frac{1}{\sqrt{T_s}}, \quad (4.101)$$

$$\tau_p = \frac{\eta}{p_0} \sim \frac{1}{\sqrt{T_s}}, \quad (4.102)$$

lo que nos indica que para tiempos relativamente grandes, los efectos de la viscosidad son importantes, pero menos prolongados. Lo que impide observar el defecto de la velocidad.

Por otra parte, las ecuaciones de Grad en la aproximación de trece momentos se reducen a un conjunto simple de ecuaciones adimensionales

$$\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} = 0, \quad (4.103)$$

$$\frac{dp^*}{dz^*} = 0, \quad (4.104)$$

$$\frac{dQ_z}{dz^*} = 0, \quad (4.105)$$

$$-\frac{15}{8}\sqrt{\frac{\pi}{2}}K_n \frac{d}{dz^*} \left(\frac{\mathcal{P}_{xz}}{\rho^*} \right) - \frac{75}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\mathcal{P}_{xz} K_n}{p^*} \frac{dT^*}{dz^*} = Q_x, \quad (4.106)$$

$$-\frac{75K_n}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{dT^*}{dz^*} = Q_z, \quad (4.107)$$

$$-\frac{5K_n}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{dv_x}{dz^*} - \frac{K_n}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{p^*} \frac{dQ_x}{dz^*} = \mathcal{P}_{xz}, \quad (4.108)$$

$$\mathcal{P}_{xx} = \mathcal{P}_{zz} = \mathcal{P}_{xy} = \mathcal{P}_{yz} = 0. \quad (4.109)$$

Para hallar la ecuación de la velocidad, primero derivamos (4.106) con respecto a la variable z^* , tomando en cuenta las expresiones (4.103) y (4.104), de lo anterior se obtiene

$$\frac{dQ_x}{dz^*} = -\frac{15}{8}\sqrt{\frac{\pi}{2}}K_n\mathcal{P}_{xz}\left(\frac{d^2}{dz^{*2}}\frac{1}{\rho}\right) - \frac{75}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathcal{P}_{xz}K_n}{p^*}\left(\frac{d^2T^*}{dz^{*2}}\right). \quad (4.110)$$

Para reducir al máximo la ecuación (4.110), nos fijamos en la ecuación (4.107), observamos que al realizar la integración de esta ecuación la temperatura tiene una dependencia lineal con la posición, de hecho es la misma que aparece en la ecuación (4.76), en donde los coeficientes de transporte también se tomaron constantes

$$T^*(z^*) = T^*(\pm 1) \mp \frac{1}{\delta^*}(z^* \mp 1).$$

Podemos ver que efectivamente la temperatura es proporcional a la posición. Este resultado junto con el hecho de que la temperatura y la densidad están relacionadas por $T^* = \frac{1}{\rho^*}$, provoca que la ecuación (4.110) sea igual a cero.

La ecuación para la velocidad se obtiene de la ecuación (4.108) y que escribimos como

$$\frac{5}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2}}K_n\frac{dv_x}{dz^*} = -\mathcal{P}_{xz}, \quad (4.111)$$

que nos da el perfil de velocidad usual (4.8).

En esta aproximación, vemos que cuando los coeficientes de transporte son constantes al igual que la presión, obtenemos el perfil de velocidad usual. Aunque en la ecuación (4.111) se toman en cuenta las características de la pared a través de \mathcal{P}_{xz} , bajo estas condiciones creemos que es mejor abordar el problema flujo Couette en el régimen de Navier-Stokes con las condiciones de frontera de pegado.

4.5.1 Coeficientes de deslizamiento

El coeficiente del salto de temperatura, para esta aproximación es el mismo que en el caso anterior. Lo mismo sucede con el coeficiente de deslizamiento, pues éste, es el mismo que aquel que se obtuvo en el caso cuando la presión era constante y los coeficientes de transporte funciones de la posición.

4.6 Discusión

Los valores de frontera que calculamos para el flujo de calor y del tensor de esfuerzos simétrico sin traza, son considerados como pequeñas correcciones a las condiciones de frontera de pegado que se emplean en la región de Navier-Stokes. A través de estos valores en la frontera, calculamos la expresión de la velocidad de deslizamiento para el problema flujo Couette. Como pudimos observar, esta cantidad depende de manera directa de las propiedades de la frontera, lo que nos parece favorable, aun y cuando el modelo de las fronteras sea el más simple. Además, la velocidad de deslizamiento depende también del salto de temperatura, lo que nos lleva a concluir que si no hay salto de temperatura tampoco habrá una velocidad de deslizamiento.

Este resultado debe ser comparado con aquellos que se hallan reportado ya en la literatura, desafortunadamente no hemos podido realizar esta tarea debido a que no hemos encontrado una expresión para la velocidad de deslizamiento contra la que se pueda comparar. De hecho, lo que normalmente se reporta son las distancias de deslizamiento ζ_T y ζ_v , en lugar de la velocidad de deslizamiento y el salto de temperatura.

Debido a que las expresiones de Q y de \mathcal{P}° , fueron calculadas independientemente de la forma de los coeficientes de transporte, vemos que los valores de frontera son cantidades constantes, lo que permite encontrar de manera directa las expresiones de la velocidad de deslizamiento y del flujo de calor normal a la superficie, entre otras cantidades. De hecho, estas cantidades son válidas para todas las variantes que se hicieron acerca de la presión y de los coeficientes de transporte.

Hemos calculado el perfil de velocidad del flujo Couette, tomando distintas situaciones de los coeficientes de transporte y la presión, para observar la respuesta del flujo al estar en presencia de una frontera. Lo anterior se realizó a través de las ecuaciones de Grad, en la aproximación de trece momentos, mismas que fueron linealizadas alrededor de un estado estacionario inhomogeneo. De acuerdo con los resultados que se obtuvieron en este capítulo, vemos que el perfil de velocidad del flujo Couette se ve modificado con respecto a su comportamiento usual, cuando se toma en cuenta la capa de Knudsen.

En primer lugar abordamos el flujo Couette, considerando a los coeficientes de transporte como funciones de la posición a través de la temperatura, al igual que la presión. Hallamos

que el perfil de velocidad se ve modificado debido a la variación de la temperatura con la posición, estos términos son de orden K_n^2 , lo que hace que no estén presentes cuando se trabaja en la región de números de Knudsen muy pequeños. Como resultado hallamos que el perfil de velocidad muestra el efecto de deslizamiento en las cercanías de la frontera. En particular, encontramos que para grandes diferencias de temperatura y flujos lentos, la velocidad depende del perfil de temperatura por lo que es necesario determinarlo explícitamente. En cambio, la temperatura no depende de la velocidad, de hecho, sólo depende de la relación que guarda con los coeficiente de transporte y del flujo de calor normal a la frontera. Al permitir que los coeficientes de transporte varíen funcionalmente con la posición a través de la temperatura, estamos considerando que la diferencia de temperaturas es importante en la capa de gas en la frontera; en otras palabras, estamos tomando en cuenta el efecto de la capa de Knudsen en el gas, a través de la funcionalidad de los coeficientes de transporte. Considerando que la fricción tome un papel importante provocando que el flujo de calor en la dirección x esté presente y juegue un rol importante en el movimiento del fluido que originalmente es provocado por las placas paralelas. Otra situación que revisamos, es el caso en que los coeficientes de transporte son constantes y la presión una función de la posición a través de la temperatura. En este caso en particular hallamos un perfil de velocidad, en donde el defecto de la velocidad se ve menos pronunciado, en comparación con el caso anterior. Por otro lado, para el perfil de temperatura, encontramos que esta cantidad toma en cuenta el efecto de la pared en menor grado que en el primer caso.

Cuando los coeficientes de transporte y la presión se suponen constantes, hallamos que el perfil de velocidad corresponde al usual.

Otro de los aspectos importantes en esta aproximación, lo constituyen los tiempos de relajación, en particular observamos que el defecto de la velocidad aumenta en la medida en que los tiempos de relajación sean mayores. De esto, podemos decir que cuando los efectos de la fricción son prolongados, se provoca que el efecto de deslizamiento en la velocidad sea mayor y se alcance a observar.

Por otro lado, resulta ser una sorpresa el hallar que el coeficiente del salto de temperatura ζ_T , sea una cantidad constante para todos y cada una de las opciones que hemos

considerado. Aunque la expresión de la temperatura cambie y sea distinta para cada una de las aproximaciones que hicimos, la razón entre la temperatura y su derivada con respecto a z^* resultó ser una constante, al parecer ni la presión ni los coeficientes de transporte fueron relevantes para determinar su valor. Suponemos que esto se debe a que la ecuación del flujo de calor normal a la pared de la que obtuvimos el perfil de temperatura está muy simplificada, es decir, hemos dejado de lado términos que podrían ser susceptibles a la variación de la velocidad y de los coeficientes de acomodación. En particular los términos dominantes en nuestra aproximación son aquellos que involucran el flujo de calor, Q_z en la temperatura y Q_x en la velocidad y que son precisamente los que contienen la información del salto de temperatura y la velocidad de deslizamiento (ecs. 3.91, 4.24 y 4.39). Por otra parte, el valor numérico del coeficiente de deslizamiento ζ_v que obtuvimos en todas y cada una de las aproximaciones fue distinto entre sí, al parecer la presión y los coeficientes de transporte influyen de manera directa y en mayor medida en el perfil de velocidad que en el de temperatura.

De acuerdo con los resultados que obtuvimos para el perfil de velocidad, vemos que nuestra aproximación explica de una forma razonablemente buena el origen de la deformación en el perfil de velocidad, arrojando también un perfil de temperatura parecido al que se obtiene en el régimen de Navier-Stokes. Lo anterior se obtiene como resultado de manejar términos en la ecuación de la temperatura, que contribuyen a la transferencia de la energía térmica por conducción, dejando de lado términos convectivos. Por otro lado, para los coeficientes de deslizamiento, encontramos que estos dependen del flujo de calor normal a la pared, por lo que es necesario calcular esta cantidad o contar con información adicional de ella. Al comparar con resultados que se reportan en la literatura, vemos que en algunos casos la variación de la densidad es tomada en cuenta, y de los valores numéricos que se reportan para estas cantidades no hay uno que sea el valor exacto o el mejor, debido a que no hay forma de comprobarlo experimentalmente hasta ahora.

Capítulo 5

Flujo Couette Generalizado

En este capítulo abordaremos el problema del flujo Couette plano donde el flujo se encuentra expuesto a un gradiente de presiones constante y dirigido en la dirección del movimiento macroscópico del fluido. Al flujo de un gas enrarecido que ocurre bajo estas condiciones le llamaremos flujo Couette generalizado. En particular, realizaremos el cálculo del perfil de velocidad y con el fin de comparar los resultados que obtenemos en este capítulo con los usuales, revisaremos este mismo problema en el régimen de Navier-Stokes, donde las condiciones de frontera usadas son las llamadas condiciones de frontera de pegado.

5.1 Aproximación de Navier-Stokes

Para conseguir un flujo Couette, hemos visto que es necesario colocar un fluido entre dos paredes planas e infinitas, que se encuentran en movimiento relativo con velocidad $\pm u_w \hat{\mathbf{i}}$. Estas placas paralelas están localizadas en $z = \pm L$ y además, se encuentran a una misma temperatura.

Si al sistema anteriormente descrito, se le somete a la acción de un gradiente de presiones externo $\frac{dp_x}{dx}$, al problema que resulta se le conoce como flujo Couette generalizado [10, 68], donde el perfil de velocidad presentará variaciones cuando se le compara con el perfil de velocidad donde el gradiente de presión es cero (mostrado en la sección (4.1) del capítulo anterior).

El sistema descrito anteriormente, se encuentra en un estado estacionario y es caracterizado por la presión p y los coeficientes de transporte que se consideran constantes, que como hemos señalado anteriormente, no es correcto cuando se trabaja con la teoría cinética.

Las ecuaciones de movimiento para las variables relevantes, en la aproximación de Navier-Stokes son [10]

$$\frac{\partial u_{0z}}{\partial x} + \frac{\partial u_{0x}}{\partial z} = 0, \quad (5.1)$$

$$\rho \left(u_{0x} \frac{\partial u_{0x}}{\partial x} + u_{0z} \frac{\partial u_{0x}}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p_x}{\partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 u_{0x}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_{0x}}{\partial z^2} \right), \quad (5.2)$$

donde $\frac{\partial p_x}{\partial x}$ es un gradiente de presiones externo, que afecta el movimiento del fluido que está contenido entre las dos placas paralelas e infinitas.

Tomando en cuenta la simetría que presenta el problema de flujo laminar, vemos que las variables sólo dependen de la coordenada z , lo que nos permite escribir el conjunto de ecuaciones anterior, como

$$\mathbf{u}_0 = u_{0x}(z) \hat{\mathbf{i}}, \quad (5.3)$$

$$-\frac{dp_x}{dx} + \eta \frac{d^2 u_{0x}}{dz^2} = 0. \quad (5.4)$$

Para hallar la velocidad del fluido se integra la ecuación (5.4), de lo que se obtiene

$$u_{0x}(z) = u_w \frac{z}{L} - \frac{L^2}{2\eta} \frac{dp_x}{dx} \left[1 - \frac{z^2}{L^2} \right], \quad (5.5)$$

donde se ha usado la condición frontera de pegado. En esta expresión se observa que cuando el gradiente de presiones no está presente, el perfil de velocidad se reduce al resultado ya conocido (Eq. 4.8). Por otra parte, si las paredes se encuentran en reposo $u_w = 0$ y la ecuación se evalúa en el centro del fluido $z = 0$, hallamos

$$u_{0x}(0) = -\frac{L^2}{2\eta} \left(\frac{dp_x}{dx} \right), \quad (5.6)$$

que es la velocidad máxima.

Si definimos una presión adimensional

$$P \equiv -\frac{L^2}{2\eta u_w} \frac{dp_x}{dx}, \quad (5.7)$$

la ecuación de la velocidad (5.5) se puede escribir de la siguiente forma

$$\frac{u_{0x}(z)}{u_w} = \frac{z}{L} + P \left[1 - \frac{z^2}{L^2} \right]. \quad (5.8)$$

De acuerdo con la ecuación de arriba, cuando $P = 0$ se recobra el flujo Couette usual, mientras que para $P \neq 0$, se presenta el caso en que el gradiente de presiones se suma o es contrario al movimiento del fluido, que a su vez es provocado principalmente por efectos de la viscosidad.

Para $P > 0$ ($dp_x/dx < 0$), es decir para una presión decreciente en la dirección del movimiento, la velocidad es positiva. En otras palabras, el gradiente de presión se suma al movimiento inducido por la viscosidad. Por otra parte, para valores negativos de la presión adimensional $P < 0$ ($dp_x/dx > 0$), la velocidad del fluido se convierte en negativa. En este caso, sucede que el gradiente de presiones se opone al movimiento del fluido que es inducido por la pared. Finalmente, mencionaremos que este tipo de flujo Couette con un gradiente de presión, tiene alguna importancia en la teoría hidrodinámica de lubricación [68]. En la figura (5.1), se muestra el perfil de velocidad del flujo Couette generalizado, en el caso en que el gradiente de presiones adimensional sea positivo ó negativo.

Ahora, queremos abordar el problema de flujo Couette generalizado, con las ecuaciones de Grad en la aproximación de trece momentos, tomando como valores de frontera, aquellos que hemos calculado en el capítulo 3 para el flujo de calor y tensor viscoso simétrico sin traza.

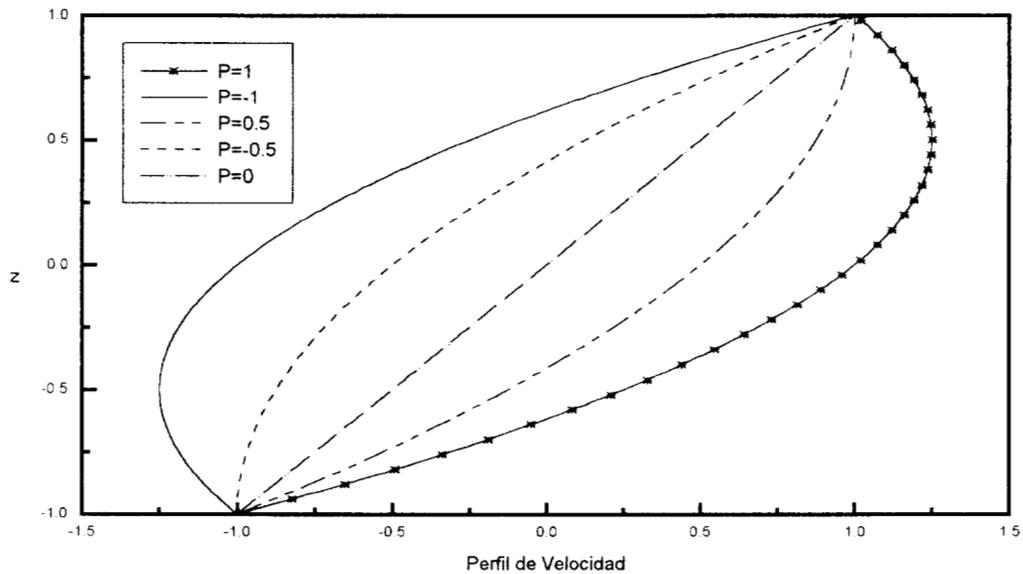


Figura 5.1: Perfil de velocidad del flujo Couette Generalizado, en la aproximación de Navier-Stokes

En particular, deseamos calcular el perfil de velocidad del fluido donde se observe el efecto del gradiente de presiones. En las secciones siguientes calcularemos el perfil de velocidad para el flujo Couette generalizado, a través de las ecuaciones de Grad en trece momentos, para las situaciones en que los coeficientes de transporte son funciones de la posición y cuando éstos son constantes.

5.2 η y λ constantes, $p = \rho_{eq}RT_{eq}$ constante

La dinámica del problema flujo Couette generalizado se analiza a través de la aproximación de Grad en trece momentos, en estas ecuaciones tomamos a los coeficientes de transporte constantes.

Las ecuaciones de movimiento para las variables relevantes y de las cuales partimos, siguen siendo las escritas en el capítulo 2 (Ecs. 2.126). Estas ecuaciones se linealizan alrededor de un estado estacionario inhomogéneo, que está caracterizado por la presión $p_0(z)$ y la temperatura $T_0(z)$. Las desviaciones de estas cantidades las escribimos como

$$T = T_0 + T_1, \quad (5.9a)$$

$$p = p_0 + p_1, \quad (5.9b)$$

donde T_0 y p_0 son los términos dominantes que describen el estado estacionario inhomogeneo del sistema.

Después de despreciar las desviaciones de las variables T_0, p_0 , se escriben las ecuaciones de Grad en trece momentos como

$$\rho_0(\nabla \cdot \mathbf{u}_0) = 0, \quad (5.10)$$

$$-\nabla p_0 - \frac{dp_x}{dx} - \nabla \cdot \mathbf{P}^\circ + \frac{\rho_0}{m} \mathbf{F} = 0, \quad (5.11)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{q} + p_0(\nabla \cdot \mathbf{u}_0) = 0, \quad (5.12)$$

$$\frac{5}{2}(\nabla RT_0) \cdot \mathbf{P}^\circ + \frac{5}{2}p_0(\nabla RT_0) + p_0 \left(\nabla \cdot \frac{\mathbf{P}^\circ}{\rho_0} \right) = -\frac{1}{\tau_q} \mathbf{q}, \quad (5.13)$$

$$2p_0(\nabla \mathbf{u})^\circ + \frac{4}{5}(\nabla \mathbf{q})^\circ = -\frac{1}{\tau_p} \mathbf{P}^\circ. \quad (5.14)$$

Las ecuaciones (5.10)-(5.14) son las misma que aparecen en la sección (4.2) del capítulo anterior (ecs. 4.13-4.17), con la diferencia de que en las ecuaciones que escribimos en este capítulo aparece un término extra, $\frac{dp_x}{dx}$, que es un gradiente de presiones externo.

Por otra parte los tiempos de relajación no se ven afectados debido a la presencia del gradiente de presión, ya que no hay relación entre ellos, como se puede ver en las ecuaciones (5.13) y (5.14).

En este caso particular, queremos calcular el perfil de velocidad con condiciones de frontera de pegado, para mostrar que la solución que se obtiene vía Navier-Stokes, también se puede hallar a través de las ecuaciones de Grad, por esta razón suponemos que la presión, la densidad y la temperatura son constantes al igual que los coeficientes de transporte.

Por otra parte, tomando en cuenta las condiciones de simetría que presenta el problema laminar, tenemos que las variables dependen sólo de la coordenada normal a la frontera z^* , así que, el flujo se convierte en un problema de dos dimensiones (x, z) . Reescribimos las ecuaciones de arriba para un potencial de esfera dura, usando las variables adimensionales que escribimos en el capítulo 3 (sección 3.7)

$$\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} = -\frac{L}{L_x} \left(\frac{dp_x^*}{dx^*} \right), \quad (5.15)$$

$$\frac{dp^*}{dz^*} = 0, \quad (5.16)$$

$$\frac{dQ_z}{dz^*} = 0, \quad (5.17)$$

$$F^* = 0, \quad (5.18)$$

$$-\frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} K_n \left(\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} \right) = Q_x, \quad (5.19)$$

$$0 = Q_z, \quad (5.20)$$

$$-\frac{5K_n}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{dv_x}{dz^*} - \frac{K_n}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{dQ_x}{dz^*} = \mathcal{P}_{xz}, \quad (5.21)$$

$$\mathcal{P}_{xx} = \mathcal{P}_{zz} = \mathcal{P}_{xy} = \mathcal{P}_{yz} = 0, \quad (5.22)$$

donde $x = L_x x^*$ siendo L_x una distancia característica en la dirección x , ésta nos da información del alcance del gradiente de presión externo que se aplica al flujo. De esta manera en la ecuación (5.15) observamos que cuando la distancia de separación entre los planos paralelos es mucho mayor que el rango de influencia del gradiente de presiones externo, entonces el efecto de este último sobre el flujo será menor que en el caso contrario. Por otra parte, recordamos que $K_n = \frac{l}{2L}$ es el número de Knudsen y l es la trayectoria libre media para esfera dura.

Para hallar la ecuación que satisface la velocidad para este sistema, debemos derivar

la ecuación (5.19) con respecto a la variable z^* y posteriormente sustituir la expresión resultante en la ecuación (5.21). Hacemos notar, que la derivada de \mathcal{P}_{xz} con respecto a z^* es una constante, por lo que Q_x también es una constante, lo anterior provoca que el segundo término de la ecuación (5.21) se anule. Tomando en cuenta lo anterior escribimos la ecuación para la velocidad como

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{5}{4} K_n \frac{dv_x}{dz^*} = -\mathcal{P}_{xz}, \quad (5.23)$$

en la ecuación (5.23), observamos que la componente (xz) del tensor de presiones simétrico sin traza es una función de la posición z^* , por lo que debemos resolver la ecuación (5.15) para \mathcal{P}_{xz} ,

$$\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} = -\frac{L}{L_x} \left(\frac{dp_x^*}{dx^*} \right),$$

Recordemos que en este caso en particular el gradiente de presiones en la dirección del movimiento del fluido es constante, así que al integrar la ecuación (5.15) tenemos

$$\mathcal{P}_{xz} = -\frac{L}{L_x} \left(\frac{dp_x^*}{dx^*} \right) z^* + a, \quad (5.24)$$

donde a es una constante. Esta expresión la sustituimos en la ecuación (5.23)

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{5}{4} K_n \frac{dv_x}{dz^*} = \frac{L}{L_x} \left(\frac{dp_x^*}{dx^*} \right) z^* - a. \quad (5.25)$$

Después de integrar en la variable z^* , hallamos

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{5}{4} K_n v_x(z^*) = \frac{L}{L_x} \left(\frac{dp_x^*}{dx^*} \right) \frac{z^{*2}}{2} - z^* a + b, \quad (5.26)$$

donde b es otra constante. Posteriormente se evalúa la ecuación (5.26) en $z^* \pm 1$, para hallar las constantes. Después de realizar lo anterior y de sustituir las expresiones de a y b , hallamos

$$v_x(z^*) = v_x(\pm 1) z^* + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2}{5} \frac{1}{K_n} \frac{L}{L_x} \left(\frac{dp_x^*}{dx^*} \right) (z^{*2} - 1). \quad (5.27)$$

donde $v_x(\pm 1)$ es la velocidad del fluido evaluada en las fronteras y de acuerdo con las condiciones de frontera de pegado es igual a v_w . Observamos que el perfil de velocidad es el mismo que se obtuvo mediante el esquema de Navier-Stokes. No es extraño obtener

este resultado ya que si el campo de temperatura es una constante, entonces no hay razón para esperar un salto de temperatura y tampoco la existencia de la capa de Knudsen.

Hemos visto que de las ecuaciones de Grad podemos obtener resultados típicos del régimen de la hidrodinámica clásica. Por otra parte, para tomar en cuenta las propiedades de las fronteras en el perfil de velocidad del fluido, podemos usar las ecuaciones de Grad, pero ahora dejando que la presión varíe con la posición al igual que los coeficientes de transporte.

5.3 λ , η y p funciones de la posición

En esta sección, queremos abordar el problema flujo Couette generalizado en el caso particular en que la presión y los coeficientes de transporte sean funciones de la posición a través de la temperatura. En particular empleamos las expresiones de los coeficientes de transporte para un potencial de esfera dura.

Suponemos que el flujo Couette generalizado se encuentra en un estado estacionario, mismo que es caracterizado por una presión $p_0(z^*)$ y temperatura $T_0(z^*)$ no homogéneas. En el problema flujo Couette generalizado, por simplicidad suponemos que las superficies frontera tienen una temperatura T_w y se encuentran en movimiento relativo con velocidad $\pm u_w \hat{i}$. Estas placas paralelas se localizan en $z^* = \pm L$ y están caracterizadas por los mismos coeficientes de acomodación α y θ

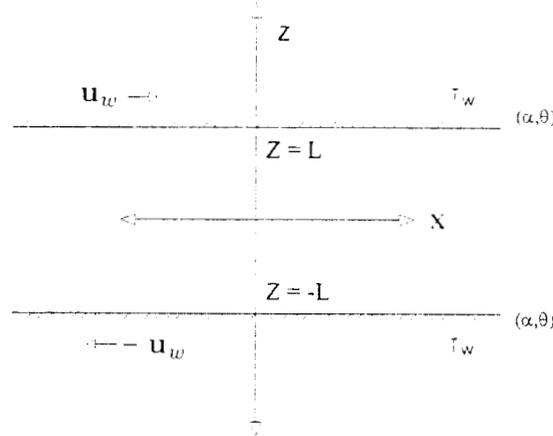


Figura 5.2: Flujo Couette generalizado en la aproximación de Grad

Escribimos las ecuaciones de Grad en trece momentos, de acuerdo con la simetría que presenta el problema, es decir las variables sólo dependen de z^* . Además, éstas se escriben de forma adimensional de acuerdo con las definiciones que usamos en el capítulo 3 (sección 3.7).

$$\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*} + \frac{L}{L_x} \frac{dp_x^*}{dx^*} = 0, \quad (5.28)$$

$$\frac{dp^*}{dz^*} = F^*, \quad (5.29)$$

$$\frac{dQ_z}{dz^*} = 0, \quad (5.30)$$

$$-\frac{15}{8}\sqrt{\frac{\pi}{2}}K_n\sqrt{T^*}\frac{d}{dz^*}\mathcal{P}_{xz} - \frac{75}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathcal{P}_{xz}K_n}{\sqrt{T^*}}\frac{dT^*}{dz^*} = Q_x, \quad (5.31)$$

$$-\frac{75K_n}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sqrt{T^*}\frac{dT^*}{dz^*} = Q_z, \quad (5.32)$$

$$-\frac{5K_n}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sqrt{T^*}\frac{dv_x}{dz^*} - \frac{K_n}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{1}{\sqrt{T^*}}\frac{dQ_x}{dz^*} = \mathcal{P}_{xz}, \quad (5.33)$$

$$\mathcal{P}_{xx} = \mathcal{P}_{zz} = \mathcal{P}_{xy} = \mathcal{P}_{yz} = 0, \quad (5.34)$$

donde $z = z^*L$, $x = x^*L_x$, $K_n = \frac{L}{2L}$ es el número de Knudsen.

Para obtener la ecuación para la velocidad del fluido, primero se deriva la ecuación (5.31)

$$\begin{aligned} \frac{dQ_x}{dz^*} = & -\frac{15}{8}\sqrt{\frac{\pi}{2}}K_n\sqrt{T^*}\left(\frac{d^2\mathcal{P}_{xz}}{dz^{*2}}\right) - \frac{75}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathcal{P}_{xz}K_n}{\sqrt{T^*}}\left(\frac{d^2T^*}{dz^{*2}}\right) - \frac{15}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{K_n}{\sqrt{T^*}}\left(\frac{dT^*}{dz^*}\right)\left(\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*}\right) \\ & - \frac{75}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{K_n}{\sqrt{T^*}}\left(\frac{d\mathcal{P}_{xz}}{dz^*}\right)\left(\frac{dT^*}{dz^*}\right) + \frac{75}{32}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathcal{P}_{xz}K_n}{T^{*3/2}}\left(\frac{dT^*}{dz^*}\right)^2. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Por otra parte, en la ecuación (5.28) estamos suponiendo que el gradiente de presiones es constante, esto nos permite reducir la ecuación anterior a la expresión

$$\frac{dQ_x}{dz^*} = -\frac{75}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathcal{P}_{xz}K_n}{\sqrt{T^*}}\left(\frac{d^2T^*}{dz^{*2}}\right) + \frac{75}{32}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathcal{P}_{xz}K_n}{T^{*3/2}}\left(\frac{dT^*}{dz^*}\right)^2 - \frac{90}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{K_n}{\sqrt{T^*}}\left(\frac{dT^*}{dz^*}\right)\frac{L}{L_x}\left(\frac{dp_x^*}{dx^*}\right). \quad (5.36)$$

Posteriormente se sustituye en la ecuación (5.33) y de esta forma obtenemos la ecuación para la velocidad del fluido

$$\begin{aligned} \frac{5}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2}}K_n\sqrt{T^*}\frac{dv_x}{dz^*} = & -\mathcal{P}_{xz}\left[1 - \frac{75\pi}{64}\frac{K_n^2}{T^*}\left(\frac{d^2T^*}{dz^{*2}}\right) + \frac{75\pi}{128}\frac{K_n^2}{T^{*2}}\left(\frac{dT^*}{dz^*}\right)^2\right] \\ & - \frac{90\pi}{64}\frac{K_n^2}{T^*}\left(\frac{dT^*}{dz^*}\right)\frac{L}{L_x}\left(\frac{dp_x^*}{dx^*}\right). \end{aligned} \quad (5.37)$$

Observamos que cuando el gradiente de presión es nulo, entonces la ecuación anterior se reduce a la ecuación (4.30).

A través de una integración directa, se obtiene la solución para la velocidad

$$\begin{aligned} v_x(z^*) = v_x(\pm 1) + \frac{4}{5} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{K_n} [I_2(z^*) - I_1(z^*) + II_2(z^*) - II_1(z^*) + III_2(z^*) - III_1(z^*) \\ + IV_2(z^*) - IV_1(z^*)], \quad (0 \leq z^* \leq 1; -1 \leq z^* \leq 0) \end{aligned} \quad (5.38)$$

donde

$$I_{1,2}(z^*) = \int_{-1, z^*}^{z^*, 1} \frac{\mathcal{P}_{xz}}{\sqrt{T^*}} dz^*, \quad (5.39)$$

$$II_{1,2}(z^*) = - \int_{-1, z^*}^{z^*, 1} \frac{75\pi}{64} \frac{K_n^2 \mathcal{P}_{xz}}{T^{*\frac{3}{2}}} \left(\frac{dT^*}{dz^{*2}} \right) dz^*, \quad (5.40)$$

$$III_{1,2}(z^*) = - \int_{-1, z^*}^{z^*, 1} \frac{75\pi}{128} \frac{K_n^2 \mathcal{P}_{xz}}{T^{*\frac{5}{3}}} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right)^2 dz^*, \quad (5.41)$$

$$IV_{1,2}(z^*) = - \int_{-1, z^*}^{z^*, 1} \frac{90\pi}{64} \frac{K_n^2}{\sqrt{T^*}} \frac{L}{L_x} \frac{dp_x^*}{dx^*} \left(\frac{dT^*}{dz^*} \right) dz^*, \quad (5.42)$$

En la ecuación (5.38) se toman en cuenta las inhomogeneidades de la temperatura y el gradiente de presión externo.

Por otra parte, el tensor de presiones \mathcal{P}_{xz} se obtiene al integrar la ecuación (5.28),

$$\mathcal{P}_{xz} = - \frac{L}{L_x} \left(\frac{dp_x^*}{dx^*} \right) (z^* \mp 1) + \mathcal{P}_{xz}^+. \quad (0 \leq z^* \leq 1; -1 \leq z^* \leq 0) \quad (5.43)$$

La expresión para el tensor de esfuerzos simétrico sin traza \mathcal{P}_{xz}^+ en la frontera es la misma de la ecuación (4.35), ésta no cambia debido a que el gradiente de presiones no influye en el modelo de fronteras

$$\mathcal{P}_{xz}^+ = - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\Phi[v_x - v_w]}{(1 - \frac{\Phi^2}{5\pi})} + \sqrt{\frac{T_s}{T_w}} \frac{\Phi^2[v_x - v_w]}{\sqrt{2\pi}(1 - \frac{\Phi^2}{5\pi})} \left[\frac{T_w}{T_s} - 1 + \frac{[v_x - v_w]^2}{5} \right]. \quad (5.44)$$

Finalmente, para observar el comportamiento cualitativo del perfil de velocidad debemos determinar el campo de temperatura. Para obtener esta cantidad se integra la ecuación (5.32)

$$T^*(z^*) = \left[T^{*\frac{3}{2}}(\pm 1) \mp \frac{1}{\delta^*} (z^* \mp 1) \right]^{\frac{2}{3}}, \quad (0 \leq z^* \leq 1; -1 \leq z^* \leq 0) \quad (5.45)$$

Vemos que esta expresión para el campo de temperatura coincide con la ecuación (4.42), cuando el gradiente de presión no está presente.

Observamos que en nuestro modelo, el gradiente de presiones no afecta al perfil de temperatura, de hecho sólo afecta a la velocidad. Después de hallar la expresión para la temperatura, calculamos las integrales (5.39-5.42).

En la figura (5.3), se observa el comportamiento cualitativo del perfil de velocidad del flujo Couette generalizado. En esta gráfica se muestra el efecto del gradiente de presión constante en el perfil de velocidad.

Hacemos notar que el perfil de velocidad que se encuentra en la figura (5.3), es parecido al de la figura (5.1). La diferencia entre estas graficas se observa cerca de las fronteras, donde tiene lugar una deformación del perfil de velocidad debido al efecto de deslizamiento, en particular este efecto es más notorio en el caso en que $P = \frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{K_n} \frac{L}{L_x} \frac{dp_x^*}{dx^*} = 0$.

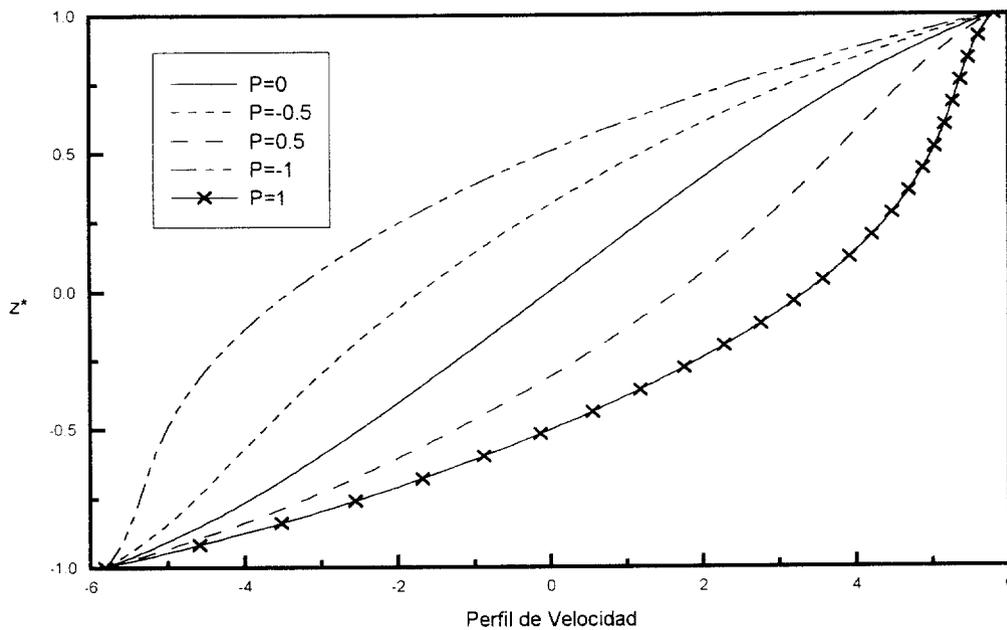


Figura 5.3: Perfil de velocidad, los coeficientes de transporte son funciones de la posición. $\theta = 0.8$ y $K_n = 0.1$

Hemos visto que la ecuación para la velocidad que hallamos, se reduce al caso usual, cuando la temperatura es una constante y el gradiente de presión externo esta ausente, lo que nos permite decir que la aproximación en la que estamos trabajando contiene los resultados que se obtienen a nivel de Navier-Stokes.

En este capítulo hemos calculado, el perfil de velocidad para el problema flujo Couette generalizado a partir de las ecuaciones de Grad en la aproximación en trece momentos. encontramos que la velocidad se escribe en términos de los parámetros que caracterizan a la frontera. Este es un ejercicio interesante ya que nos permitió observar que el perfil de velocidad del flujo, contiene información de la superficie que lo delimita, obteniendo nuestros resultados de forma analítica.

En particular, vimos que cuando la presión y los coeficientes de transporte son constantes, se recupera la expresión de la velocidad en el régimen de Navier-Stokes. Esto nos sugiere que la presión y los coeficientes de transporte juegan un papel importante en la dinámica del problema flujo Couette Generalizado. Encontramos que el gradiente de presiones externo modifica al perfil de velocidad a través del flujo de calor en la dirección x . Esta última cantidad depende de manera directa de la presión p^* , es decir, esta cantidad sufre cambios si la presión es constante o es una función de la posición.

Capítulo 6

Conclusiones y Perspectivas

Hemos visto que el estudio del flujo en un gas enrarecido, puede ser realizado a través de ecuaciones parecidas a las de la aproximación del continuo, tales como las ecuaciones de los momentos de Grad. En particular estudiamos un flujo laminar incompresible en donde se tomó en cuenta la influencia de la superficie frontera para números de Knudsen no tan pequeños, como normalmente sucede en el régimen de Navier-Stokes. Este estudio está basado en las ecuaciones de Grad en trece momentos, donde el flujo de calor y el tensor viscoso simétrico sin traza son considerados como variables relevantes. Por otra parte, calculamos los valores de frontera de las variables físicas, a través del modelo de las paredes de Maxwell, en donde son tomadas en cuenta las características de la pared, por medio de los coeficientes de acomodación. Las expresiones de los valores frontera del flujo de calor y del tensor simétrico sin traza que obtuvimos aquí, son una generalización de las reportadas por Harold Grad en 1949.

Creemos que es posible obtener los valores de frontera para las variables físicas con mayor información acerca de la pared, en la medida en que el modelo de las fronteras sea cada vez más realista, involucrando elementos tales que modelen mejor las características de la superficie frontera. Aunque, claro está, el cálculo analítico será cada vez más complicado de realizar, por lo que será necesario apoyarse en técnicas computacionales, tales como: la dinámica molecular, soluciones numéricas, método de Montecarlo (DSMC) o las apro-

ximaciones Lattice Gas Automata (LGA) y Lattice Boltzmann Equation (LBE).

Un hecho interesante es que un modelo simple de la pared con la dinámica descrita por las ecuaciones de Grad puede reproducir las características principales de un problema tradicionalmente cinético. En particular para el flujo Couette, calculamos una expresión analítica para la velocidad de deslizamiento V_x y de la componente normal del flujo de calor Q_z , en términos del salto de temperatura $\frac{T_w - T_s}{T_s}$ y de los coeficientes de acomodación $\Phi = \frac{1 - \alpha + \theta}{1 + \alpha - \theta}$. Encontramos que estas cantidades están relacionadas de manera directa [Ec. (4.42)].

De acuerdo con la expresión para la velocidad de deslizamiento, vemos que si no hay un salto de temperatura, entonces no habrá una velocidad de deslizamiento; de esta manera el fluido se movera de acuerdo con la velocidad de la pared. Por otra parte, hemos derivado el perfil de temperatura para un potencial de esfera dura; éste es parecido al que se obtiene en el régimen de Navier-Stokes. Las diferencias se observan en la región cerca de las fronteras, donde el comportamiento de la temperatura que calculamos, depende de las características de la pared a través de los coeficientes de acomodación. Además de lo anterior, calculamos el perfil de velocidad tomando en cuenta el defecto de la velocidad, para números de Knudsen cercanos a la unidad, y lo encontramos que el comportamiento cualitativo de la velocidad es el mismo que se ha reportado por otros autores [42, 58]. Todo esto se ha calculado tomando a los coeficientes de transporte como funciones de la posición z^* . Ésta es una diferencia con el perfil de velocidad calculado en el artículo de Peralta-Fabi y Zwanzig [42], donde los coeficientes de transporte son constantes y la influencia de la pared hacia el interior del gas es substituida por un campo externo, manteniendo las condiciones de frontera de pegado.

Para entender el porqué hemos tomado los coeficientes de transporte como funciones de la posición, debemos recordar que en las cercanías de una superficie frontera las colisiones entre las partículas del gas enrarecido y la pared son muy importantes; éstas colisiones provocan que se forme una capa delgada de gas adyacente a la frontera. En el interior de esta capa de gas, encontramos partículas con la temperatura y velocidad de la pared y partículas que mantienen las características del interior del gas. Como una

consecuencia de lo anterior, los gradientes de temperatura y velocidad son muy grandes y provoca que el llamado defecto de la velocidad esté presente. Debido a la presencia de la capa de Knudsen, los efectos del calor producido por la viscosidad, son diferentes en la frontera que en el interior de gas. Vemos que la viscosidad en el fluido es menor en la pared que en el bulto. Esto es una consecuencia de que la temperatura del fluido sea mayor en medio del canal, que en la frontera. Por lo anterior, vemos que no es adecuado usar los coeficientes de transporte como cantidades constantes, si es que se desea tomar en cuenta el efecto de deslizamiento y en cambio hemos visto que es suficiente con tomar a los coeficientes de transporte como funciones de la posición.

Otra de las cosas que observamos, cuando calculamos el perfil de velocidad del flujo Couette plano, es que al variar la presión en la dirección normal a la superficie, la componente en x del flujo de calor adquiere gran importancia ya que la derivada con respecto de la componente normal a la pared de esta cantidad, se superpone al movimiento provocado por la pared y origina que el perfil de velocidad sufra una modificación cerca de la frontera. Dicho comportamiento lo interpretamos como el efecto de deslizamiento que es más notorio en este caso que cuando la presión es constante.

Por otro lado, de manera directa calculamos la llamada distancia de deslizamiento. Observamos que los resultados numéricos que calculamos son parecidos a los mejores resultados que se han reportado en la literatura, por lo que creemos que nuestro modelo de fronteras aunque simple, arroja buenos resultados al comparar con aquellos trabajos en donde se han empleados métodos más elaborados [4, 50]. Por supuesto, este modelo es susceptible de mejorarse.

Por otro lado, también hemos calculado el perfil de velocidad para el problema flujo Couette Generalizado; en la solución que hallamos está contenida la solución normal. Por otro lado, hemos observado que la condición geométrica es importante cuando se aborda un problema de flujo laminar, ésta ayuda a que los cálculos de los valores frontera de \mathbf{Q} y \mathcal{P} sean menos complicados. Si la geometría que presenta el problema de flujo laminar que hemos abordado fuera otra, digamos cilíndrica, entonces habría cambios en las expresiones de los valores frontera de las cantidades físicas. Lo anterior lejos de sólo complicarnos los cálculos, nos permite realizar el estudio de la dinámica de un flujo lami-

nar ahora con una simetría cilíndrica. De hecho a este problema se le llama flujo Poiseuille.

Una de las perspectivas que consideramos es viable realizar, es el proponer un modelo más realista de las fronteras, tomando en cuenta la naturaleza de la frontera sobre todo si existen rugosidades en la misma. Por supuesto si trabajamos con superficies extremadamente rugosas es necesario contemplar un fluido turbulento dado que la naturaleza rugosa de la pared influirá en el bulto. Para ello será necesario tomar en cuenta los términos no lineales de las ecuaciones de evolución para las variables relevantes.

En particular el kernel de colisión propuesto por Carlo Cercignani [Ec. (3.23)] nos ofrece un poco más de detalle en cuanto a la naturaleza de la pared. Con este modelo del kernel, podemos calcular la distancia de penetración de las partículas que colisionan de manera especular o difusiva con la pared. La idea sería superponer dos términos de este mismo modelo, el primero de ellos que tome en cuenta las colisiones especulares y el segundo las colisiones difusivas; además podemos añadir un término que tome en cuenta la fracción de partículas que logran atravesar la pared.

Para estudiar los efectos de la energía debida a los términos de convección en las ecuaciones de Grad, debemos manejar las ecuaciones de forma completa, es decir manejar ecuaciones no lineales. Un inconveniente es que los cálculos analíticos se complican demasiado, así que una opción es contar con algún modelo para la densidad o hacer suposiciones acerca de la razón de corte, o recurrir a soluciones numéricas de las ecuaciones de evolución para las variables relevantes.

Apéndice A

En este apéndice se muestran algunos desarrollos de las ecuaciones de Grad en trece momentos, estas ecuaciones son usadas para estudiar la dinámica del gas enrarecido en el flujo Couette plano. En particular se escriben las ecuaciones de Grad tomando en cuenta las condiciones de simetría que presenta el flujo Couette plano y que además se encuentra en estado estacionario.

A.1 La ecuación para la masa

$$\frac{\partial}{\partial t}nm + \nabla \cdot (\mathbf{u}_0nm) = 0, \quad (a.1)$$

la ecuación (a.1) se desarrolla

$$\rho_0(\nabla \cdot \mathbf{u}_0) = 0, \quad (a.2)$$

$$\rho_0 \left(\frac{\partial u_{0x}}{\partial x} + \frac{\partial u_{0y}}{\partial y} + \frac{\partial u_{0z}}{\partial z} \right) = 0. \quad (a.3)$$

debido a que la velocidad del fluido sólo depende de la coordenada z , vemos que la ecuación (a.3) se satisface idénticamente.

A.2 La ecuación del momento

$$-\nabla p_0 - \nabla \cdot \mathbf{P}^\circ + \frac{\rho_0}{m}\mathbf{F} = 0, \quad (a.4)$$

para simplificar la ecuación (a.4), debemos desarrollar cada uno de los términos de la ecuación por separado

$$\left(\frac{\partial P_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial P_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial P_{zx}}{\partial z}\right)\hat{\mathbf{i}} + \left(\frac{\partial P_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial P_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial P_{zy}}{\partial z}\right)\hat{\mathbf{j}} + \left(\frac{\partial P_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial P_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial P_{zz}}{\partial z}\right)\hat{\mathbf{k}} + \frac{\partial p_0}{\partial x}\hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial p_0}{\partial y}\hat{\mathbf{j}} + \frac{\partial p_0}{\partial z}\hat{\mathbf{k}} - \frac{\rho_0}{m}(F\hat{\mathbf{i}} + F\hat{\mathbf{j}} + F\hat{\mathbf{k}}) = 0, \quad (a.5)$$

la ecuación de arriba se reduce al introducir las condiciones de simetría

$$\frac{\partial P_{xx}}{\partial z}\hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial P_{zy}}{\partial z}\hat{\mathbf{j}} + \frac{\partial P_{zz}}{\partial z}\hat{\mathbf{k}} + \frac{\partial p_0}{\partial z}\hat{\mathbf{k}} - \frac{\rho_0}{m}F\hat{\mathbf{k}} = 0. \quad (a.6)$$

A.3 La ecuación de la energía

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} + p_0(\nabla \cdot \mathbf{u}_0) = 0, \quad (a.7)$$

de acuerdo con las condiciones de simetría, los términos que aparecen en la ecuación anterior se simplifican de la siguiente manera

$$-\left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z}\right) - p_0\left(\frac{\partial u_{0x}}{\partial x} + \frac{\partial u_{0y}}{\partial y} + \frac{\partial u_{0z}}{\partial z}\right) = 0, \quad (a.8)$$

que se reduce a la expresión siguiente

$$-\frac{\partial q_z}{\partial z} = 0. \quad (a.9)$$

A.4 La ecuación para el tensor viscoso simétrico sin traza

La ecuación para el tensor viscoso simétrico sin traza se escribe

$$2p_0(\nabla \mathbf{u}_0)^\circ + \frac{4}{5}(\nabla \mathbf{q})^\circ = -\frac{1}{\tau_p}\mathbf{P}^\circ, \quad (a.10)$$

desarrollamos cada uno de los términos de la ecuación (a.10)

$$2p(\nabla \mathbf{u})^{\circ} = p \left[\left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial u_{0x}}{\partial x} & \frac{\partial u_{0y}}{\partial x} & \frac{\partial u_{0z}}{\partial x} \\ \frac{\partial u_{0x}}{\partial y} & \frac{\partial u_{0y}}{\partial y} & \frac{\partial u_{0z}}{\partial y} \\ \frac{\partial u_{0x}}{\partial z} & \frac{\partial u_{0y}}{\partial z} & \frac{\partial u_{0z}}{\partial z} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial u_{0x}}{\partial x} & \frac{\partial u_{0x}}{\partial y} & \frac{\partial u_{0x}}{\partial z} \\ \frac{\partial u_{0y}}{\partial x} & \frac{\partial u_{0y}}{\partial y} & \frac{\partial u_{0y}}{\partial z} \\ \frac{\partial u_{0z}}{\partial x} & \frac{\partial u_{0z}}{\partial y} & \frac{\partial u_{0z}}{\partial z} \end{array} \right) - \frac{2}{3} \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial u_{0z}}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial u_{0z}}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial u_{0z}}{\partial z} \end{array} \right) \right], \quad (a.11)$$

que se reduce a

$$2p(\nabla \mathbf{u}_0)^{\circ} = p \left(\begin{array}{ccc} 0 & 0 & \frac{\partial u_{0x}}{\partial z} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial u_{0x}}{\partial z} & 0 & 0 \end{array} \right), \quad (a.12)$$

después de tomar en cuenta las condiciones de simetría. Luego escribimos el segundo término de la ecuación (a.10)

$$\frac{4}{5}(\nabla \mathbf{q})^{\circ} = \frac{2}{5} \left[\left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial q_x}{\partial x} & \frac{\partial q_y}{\partial x} & \frac{\partial q_z}{\partial x} \\ \frac{\partial q_x}{\partial y} & \frac{\partial q_y}{\partial y} & \frac{\partial q_z}{\partial y} \\ \frac{\partial q_x}{\partial z} & \frac{\partial q_y}{\partial z} & \frac{\partial q_z}{\partial z} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial q_x}{\partial x} & \frac{\partial q_x}{\partial y} & \frac{\partial q_x}{\partial z} \\ \frac{\partial q_y}{\partial x} & \frac{\partial q_y}{\partial y} & \frac{\partial q_y}{\partial z} \\ \frac{\partial q_z}{\partial x} & \frac{\partial q_z}{\partial y} & \frac{\partial q_z}{\partial z} \end{array} \right) - \frac{2}{3} \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial q_z}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial q_z}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial q_z}{\partial z} \end{array} \right) \right], \quad (a.13)$$

después de tomar en cuenta la simetría que presenta el problema de flujo laminar, tenemos

$$\frac{4}{5}(\nabla \mathbf{q})^{\circ} = -\frac{2}{5} \left(\begin{array}{ccc} 0 & 0 & \frac{\partial q_x}{\partial z} \\ 0 & 0 & \frac{\partial q_y}{\partial z} \\ \frac{\partial q_x}{\partial z} & \frac{\partial q_y}{\partial z} & \frac{4}{3} \frac{\partial q_z}{\partial z} \end{array} \right). \quad (a.14)$$

A.5 La ecuación del flujo de calor

$$\frac{5}{2}(\nabla RT_0) \cdot \mathbf{P}^0 + \frac{5}{2}p_0(\nabla RT_0) + p_0 \left(\nabla \cdot \frac{\mathbf{P}^0}{\rho} \right) = -\frac{1}{\tau_q} \mathbf{q}, \quad (a.15)$$

escribimos de manera explícita cada uno de los términos que aparecen en la ecuación (a.15), el primero de ellos es

$$\frac{5}{2}(\nabla RT_0) \cdot \mathbf{P}^\circ = \frac{5}{2}R \begin{pmatrix} P_{xx} \frac{\partial T_0}{\partial x} + P_{yx} \frac{\partial T_0}{\partial y} + P_{zx} \frac{\partial T_0}{\partial z}, \\ P_{xy} \frac{\partial T_0}{\partial x} + P_{yy} \frac{\partial T_0}{\partial y} + P_{zy} \frac{\partial T_0}{\partial z}, \\ P_{xz} \frac{\partial T_0}{\partial x} + P_{yz} \frac{\partial T_0}{\partial y} + P_{zz} \frac{\partial T_0}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (a.16)$$

que se reduce a la expresión

$$\frac{5}{2}(\nabla RT_0) \cdot \mathbf{P}^\circ = \frac{5}{2}R \begin{pmatrix} P_{zx} \frac{\partial T_0}{\partial z}, \\ P_{zy} \frac{\partial T_0}{\partial z}, \\ P_{zz} \frac{\partial T_0}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (a.17)$$

el segundo término de la ecuación (a.15) se escribe como

$$p_0 \nabla \cdot \frac{\mathbf{P}}{\rho_0} = p_0 \begin{pmatrix} \frac{\partial P_{xx}}{\partial x \rho_0} + \frac{\partial P_{yx}}{\partial y \rho_0} + \frac{\partial P_{zx}}{\partial z \rho_0}, \\ \frac{\partial P_{xy}}{\partial x \rho_0} + \frac{\partial P_{yy}}{\partial y \rho_0} + \frac{\partial P_{zy}}{\partial z \rho_0}, \\ \frac{\partial P_{xz}}{\partial x \rho_0} + \frac{\partial P_{yz}}{\partial y \rho_0} + \frac{\partial P_{zz}}{\partial z \rho_0} \end{pmatrix}, \quad (a.18)$$

la ecuación (a.18) la escribimos en una forma simplificada, al tomar en cuenta las condiciones de simetría que presenta el flujo Couette

$$p_0 \nabla \cdot \frac{\mathbf{P}}{\rho_0} = p_0 \begin{pmatrix} \frac{\partial p_{xz}}{\partial z \rho_0}, \\ \frac{\partial p_{zy}}{\partial z \rho_0}, \\ \frac{\partial p_{zz}}{\partial z \rho_0} \end{pmatrix}. \quad (a.19)$$

Finalmente, el tercer término de la ecuación (a.15)

$$\frac{5}{2}p_0(\nabla RT_0) = \frac{5}{2}P_0R \left(\frac{\partial T_0}{\partial x}, \frac{\partial T_0}{\partial y}, \frac{\partial T_0}{\partial z} \right), \quad (a.20)$$

después de tomar en cuenta la simetría que presenta el problema flujo Couette, la ecuación (a.20) se escribe como

$$\frac{5}{2}p_0(\nabla RT_0) = \frac{5}{2}P_0R \left(0, 0, \frac{\partial T_0}{\partial z} \right). \quad (a.21)$$

Apéndice B

El proposito de este apéndice es el de mostrar a grandes rasgos, en que consisten las aproximaciones *Ecuación de Boltzmann reticular* (Lattice Boltzmann Equation), y *Automata de gas reticular* (Lattice Gas Automata), y mencionar como creemos que pueden ser tomadas en cuenta las fronteras.

B.1 Ecuación de Boltzmann reticular

La ecuación de Boltzmann discreta es un modelo matemático de la teoría cinética de un gas de partículas puntuales que sólo pueden acceder a un número finito de velocidades. La idea de discretizar el espacio de velocidades originalmente fue de Maxwell, sin embargo fue Broadwell [69], quien aterrizó estas ideas proponiendo un modelo simple de un gas con sólo seis velocidades, con el mismo modulo y dirigidas a lo largo de direcciones negativas y positivas de un sistema ortogonal cartesiano.

La motivación original de una teoría cinética discreta, fue modelar un gas de partículas lo suficientemente simple y proporcionar descripciones analíticas de patrones de flujo.

En la llamada Ecuación de Boltzmann reticular o Lattice Boltzmann Equation (LBE) se considera un conjunto discreto y finito de velocidades de partículas, ($\mathbf{c} \in v_i, i = 0, \dots, b$), definido en una red de Bravais \mathcal{L} con dimensión D . Esta red consiste de igual celdas cúbicas cada una ocupando un dominio espacial $D(x)$ con volumen $\Delta V (= \Delta t^D)$. Las partículas sólo pueden saltar de una celda centrada en \mathbf{x} a una de las b -celdas vecinas (es decir, $\mathbf{x} + v_i \Delta t$) durante un intervalo de tiempo Δt ($=1$ por conveniencia). En principio uno reemplaza la función de distribución de una partícula $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ por una población de

estado $N_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t)\Delta V$. Físicamente $N(\mathbf{x}, t)$ es el número total de partículas con velocidad v_i ocupando una celda de la red en \mathbf{x} y al tiempo t . Su dinámica es usualmente descrita por una ecuación diferencial cinética, llamada Lattice-Boltzmann Equation

$$N_i(\mathbf{x} + v_i\Delta t, t + \Delta t) = N'_i(\mathbf{x}, t)$$

donde $N'_i(\mathbf{x}, t) = N_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{x}, t)$ es la población de estado post-colisional, y $\Omega_i(\mathbf{x}, t)$ es conocida como el término de colisión que comunmente toma la forma de la llamada ecuación BGK con un tiempo de relajación τ . En general todas las relaciones y definiciones hidrodinámicas son las mismas como en un sistema continuo excepto por el remplazamiento de $\int dv$ por una sumatoria \sum_i .

Cuando no hay fronteras, el espacio configuracional entero puede modelarse totalmente por celdas cúbicas como sucede en una la red de Bravais donde todas las celdas cúbicas son idénticas. En el caso en que este presente una superficie frontera (ver figura 1a), se puede recurrir al modelo más simple de celdas regulares que es la cuadrada y modelar de manera adecuada la frontera. En particular las celdas que se encuentran en las proximidades de una frontera, se les llama celdas de superficie y pueden ser construidas a partir de celdas cúbicas regulares, esto se logra al *cortar* parte de sus volúmenes con las superficies físicas. De esta manera se eliminan las fracciones de las celdas cúbicas originales que han caído detrás de cualquier superficie sólida, creando así una celda con una forma distinta.

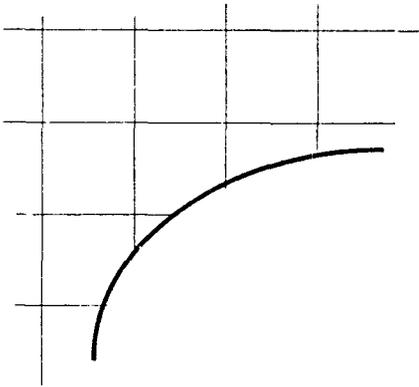


Figura b.1a:

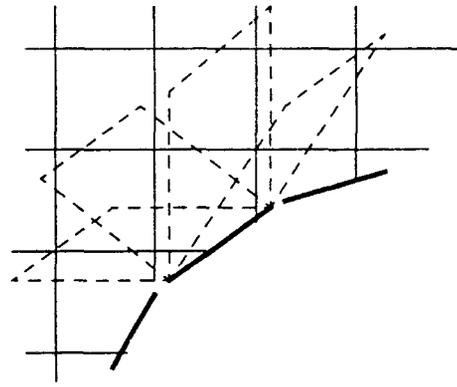


Figura b.1b:

Estas celdas superficiales que resultan pueden tener en principio distintos volúmenes $\Delta V(x) < \Delta V_i$, debido a que las celdas pueden ser seccionadas o cortadas en diferentes formas según la forma de la superficie. En este modelo se supone que las caras de las celdas resultantes son tangenciales a la superficie sólida (ver figura 1b).

Un camino que se puede seguir para tomar en cuenta las fronteras, es modificar la ecuación de Boltzmann [26]

$$N_i(x \rightarrow x + v_i \Delta t, t + \Delta t) = P(x \rightarrow x + v_i \Delta t) N_i'(r, t) + Q_i(r + v_i \Delta t, t),$$

donde $P(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + v_i \Delta t, t + \Delta t)$ que es determinado por la geometría, representa la fracción de las partículas que son enviadas de la celda en \mathbf{x} a la celda en $\mathbf{x} + v_i \Delta t$.

De forma explícita

$$P(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + v_i \Delta t, t + \Delta t) = 1 - P_i^s(\mathbf{x})$$

donde $P_i^s(\mathbf{x})$ es la fracción de las partículas que chocarían con cualquier superficie sólida y $Q_i(\mathbf{x} + v_i \Delta t, t)$ representa la contribución de las colisiones por parte de todas las superficies en la celda que se encuentra en $\mathbf{x} + v_i \Delta t$.

En particular, una superficie que presenta una curvatura se puede aproximar por medio de una serie de secciones planas. La superficie que resulta tiene una forma poligonal que consiste de un conjunto de secciones planas, ($S^\alpha : \alpha = 1, \dots, \alpha_m$), donde cada una de ellas es tangencial a la superficie original. Cada cara tiene su normal superficial única n^α ($|n^\alpha| = 1$) señalando hacia el lado del dominio del fluido y área A^α .

Si $\Gamma_i^{out,\alpha}(t)$ es el número total de partículas continuamente emitidas (reflejadas) durante Δt de las caras S^α con velocidad v_i , entonces esas partículas deben ocupar uniformemente el mismo dominio del espacio.

El total de las partículas incidentes del dominio del fluido (i.e. de las celdas) en las secciones planas o lados S^α con velocidad v_i es dado por

$$\Gamma_i^{in,\alpha}(t) = \sum_x P_i^\alpha(\mathbf{x}) N_i(\mathbf{x}, t).$$

El algoritmo de la superficie B^α en una cara o lado plano de la nueva celda S^α , se interpreta como un mapeo que convierte las partículas incidentes en unas emergentes

$$B^\alpha : \{\Gamma_i^{in,\alpha}(t); \forall v_i \cdot n^\alpha \leq 0\} \rightarrow \{\Gamma_i^{out,\alpha}(t); \forall v_i \cdot n^\alpha \geq 0\}.$$

Por otra parte, de manera análoga a la aproximación del continuo, los flujos asociados con la hidrodinámica fundamental son definidos como

$$\begin{aligned} j_m^\alpha(t) &= \frac{1}{A^\alpha \Delta t} \left[\sum_{i,v_i \cdot n \geq 0} \Gamma_i^{out,\alpha}(t) - \sum_{i,v_i \cdot n \leq 0} \Gamma_i^{in,\alpha}(t) \right] \\ j_m^\alpha(t) &= \frac{1}{A^\alpha \Delta t} \left[\sum_{i,v_i \cdot n \geq 0} \frac{v_i^2}{2} \Gamma_i^{out,\alpha}(t) - \sum_{i,v_i \cdot n \leq 0} \frac{v_i^2}{2} \Gamma_i^{in,\alpha}(t) \right] \\ \mathbf{J}_m^\alpha(t) &= \frac{1}{A^\alpha \Delta t} \left[\sum_{i,v_i \cdot n \geq 0} v_i \Gamma_i^{out,\alpha}(t) - \sum_{i,v_i \cdot n \leq 0} v_i \Gamma_i^{in,\alpha}(t) \right]. \end{aligned}$$

Que son las versiones discretas en la velocidad, de la pérdida o ganancia de la masa local, energía y momento en el sistema debido a la presencia de una superficie sólida por unidad de área y de tiempo. Debido a que la masa total, el momento y la energía se conservan en el fluido para una sistema LB, sus valores totales sólo pueden cambiar a través de flujos que atraviesan las fronteras. Por lo que necesario dar un modelo de la forma en que interactúan las partículas con la pared.

Lo que sigue es introducir o incorporar la forma en que están relacionados Γ^{out} y Γ^{in} . En particular para colisiones especulares estas cantidades se escriben como

$$\Gamma_i^{out,\alpha}(t) = \Gamma_{i^*}^{in,\alpha}(t), \quad \forall v_{i^*} \cdot n^\alpha \geq 0, \quad v_{i^*} = -v_i$$

que nos dice que las relaciones para el flujo de masa y momento se anulan para el caso en que no hay intercambio de información.

Por otra parte, para tomar en cuenta los procesos de intercambio de momento con la superficie frontera, se construye una distribución en equilibrio de referencia para la sección plana S^α , basada en propiedades hidrodinámicas usuales de su fluido circundante. Estas propiedades pueden ser obtenidas de un conjunto completo de distribuciones de una partícula de las celdas en la vecindad inmediata

$$f_i^\alpha(t) = f_i(x_\alpha + n\Delta l/2, t), \quad i = 0, \dots, b.$$

En la literatura, observamos que se ha construido [26] la distribución de partículas salientes o reflejadas, basada en la aproximación BGK

$$f_i^\alpha(t)' = f_i^{eq,\alpha}(t) + \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) [f_{i^\star}^\alpha(t) - f_{i^\star}^{eq,\alpha}(t)], \quad \forall v_{i^\star} \cdot n^\alpha \geq 0$$

donde $f_{i^\star}^{eq,\alpha}(t)$ es una distribución de equilibrio de las secciones planas y $f_{i^\star}^\alpha(t)$ está asociada con un flujo de estado incidente

$$f_{i^\star}^\alpha(t) = \Gamma_{i^\star}^{in,\alpha}(t)/V_i^\alpha, \quad v_{i^\star} \cdot n^\alpha \leq 0$$

De acuerdo con la aproximación BGK, la distribución de flujo emergente (saliente) se puede escribir como

$$\begin{aligned} \Gamma_i^{out,\alpha}(t) &= V_i^\alpha f_i^\alpha(t)' \\ &= V_i^\alpha [f_i^{eq,\alpha}(t) + f_{i^\star}^{eq,\alpha}(t)] - \Gamma_{i^\star}^{in,\alpha}(t), \quad \forall v_i \cdot n^\alpha \geq 0 \end{aligned}$$

Que se obtiene al tomar $\tau = 1/2$.

De esta manera cuando se modelan las condiciones de frontera para un espacio discreto, vemos que la geometría de las fronteras es importante y que ésta se puede tomar en cuenta en la ecuación de Boltzmann discreta. Por otro lado a través del flujo de partículas incidentes y emergentes podemos incorporar la información acerca de los distintos procesos de intercambio que suceden en la frontera. Por lo anterior, vemos que el modelo de fronteras que hemos manejado en este trabajo puede ser usado en LBE, expresandolo en forma adecuada (discretizada).

B.2 Automata de gas reticular

Ulam y Von Newman, motivados por el procesamiento de información de sistemas biológicos complejos (no estudiaron tales sistemas), sugirieron un modelamiento abstracto de estos problemas, empleando modelos de espacios completamente discretos, relacionando la idea de espacios celulares. La idea fue hallar una estructura lógica minimal y el desarrollo de una dinámica lo suficientemente poderosa para simular sistemas complejos [25].

En esta aproximación, se comenzó por colocar una colección de maquinas de estado finito y de valores binarios, donde el siguiente estado de cada maquina depende sólo de su ambiente inmediato (vecinos inmediatos). En otras palabras, el estado de cada maquina dependera sólo de los estados de las maquinas en alguna pequeña vecindad. Esto nos dice que sólo consideramos una dinámica que es local.

El espacio natural en el cual se trabaja es una malla (Lattice), con maquinas de estado finito elementales colocadas en los vértices. Vemos en la literatura [25] que para los distintos tipos de mallas, es necesario establecer reglas para definir como las maquinas interactúan en un vecindad para hallar el estado de cada maquina.

La geometría de la malla es importante debido a que esta dependera de los requerimientos que exijan nuestro problema en particular. Por ejemplo, la celda geométrica más simple es la cuadrada, sin embargo tiene la limitante de que no muestra la propiedad de isotropía, es decir hay algunas direcciones que son preferenciadas, lo que se puede hacer es cambiar la geometría de la celda a una triangular o hexagonal, según las condiciones y propiedades que presenta el problema que uno quiera abordar.

En general hay libertad de elegir la forma geométrica de la malla y establecer las reglas de colisión convenientes, lo que se realiza es un algoritmo de la evolución del sistema que se repetira hasta un número de veces que es elegido también.

Finalmente diremos que los espacios celulares que han sido estudiados en años recientes, ahora son conocidos como automatas celulares.

En el caso particular en que se desee tomar en cuenta condiciones de frontera, entonces debemos elegir una red adecuada a nuestro requerimientos. En este punto las reglas de colisión juegan un papel fundamental, éstas se pueden implementar sin problema [25]. Los detalles de como se realiza la implementación, no los incluimos aquí, el lector interesado puede hallar más información con lujo de detalles en [25].

Apéndice C

En este apéndice mostramos los simbolos que usamos en el desarrollo de este trabajo y señalamos lo que representa cada uno de ellos

- $\rho(\mathbf{r}, t)$: densidad
- $n(\mathbf{r}, t)$: densidad numérica
- $\mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t)$: velocidad hidrodinámica
- \mathbf{c} : velocidad molecular
- $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u}_0$: velocidad peculiar
- $p(\mathbf{r}, t)$: presión hidrostática
- $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$: tensor de presiones
- $\mathbf{P}^\circ(\mathbf{r}, t)$: tensor viscoso simétrico sin traza
- $\mathcal{P}(\mathbf{r}, t)$: tensor viscoso simétrico sin traza adimensional
- $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$: flujo de calor
- $\mathbf{Q}(\mathbf{r}, t)$: flujo de calor adimensional
- $H^{(s)}(\mathbf{c})$: polinomios tensoriales de Hermite
- δ_{ij} : delta de Kronecker

- $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}_0 \cdot \nabla$: derivada material
- λ : coeficiente de conductividad térmica
- η : coeficiente de viscosidad cortante
- τ_q : tiempo de relajamiento del flujo de calor
- τ_p : tiempo de relajamiento del tensor viscoso simétrico sin traza
- $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$: vectores unitarios
- \mathbf{F} : fuerza externa
- K_B : constante de Boltzmann
- R : constante universal de los gases
- $T(\mathbf{r}, t)$: temperatura cinética
- T_w : temperatura de la pared
- $E(\mathbf{r}, t)$: representa la energía interna
- σ : diámetro de las partículas
- l : trayectoria libre media
- $\Omega_{ij}^{(l,r)}$: respresenta a las integrales de colisión
- \underline{I} : tensor unitario.
- \mathcal{S} : tensor de tercer orden
- \mathcal{Q} : tensor de cuarto orden
- $\mathbf{a}^{(s)}$: son los momentos de Grad
- T_w : temperatura de la pared
- $f^{(0)}, f_w$: funciones de distribución Maxwellianas
- $[F, G]$: paréntesis de colisión

- $J(f, f)$: integral de colisión
- $I(G)$: operador integral linealizado en G
- ζ_v : coeficiente de deslizamiento
- ζ_T : coeficiente de salto de temperatura
- \mathcal{R} : kernel de dispersión
- M^- : flujo de masa normal a la superficie frontera
- $\Phi = \frac{1-\alpha+\theta}{1+\alpha-\theta}$: contiene a los coeficientes de acomodación
- $v_x = \frac{u_{0x}}{\sqrt{RT_w}}$: velocidad promedio del fluido
- $v_w = \frac{u_w}{\sqrt{RT_w}}$: velocidad de la pared
- $V_x = v_x - v_w$: velocidad de deslizamiento
- $\frac{T_s - T_w}{T_s}$: salto de temperatura
- $K_n = \frac{l}{2L}$: número de Knudsen
- $2L$: distancia de separación entre las placas paralelas
- f^+ : función de distribución de las partículas después de interactuar con la pared
- f^- : función de distribución de las partículas que inciden sobre la pared
- $\Theta(c_n)$: función escalón de Heaviside
- \mathcal{K} : es la constante de normalización
- $M = \frac{u_x}{u_s}$: número de Mach
- $Re = \frac{u_x L}{\eta}$: número de Reynolds
- $\phi^{(i)}$: son funciones con las que se representa la desviación del sistema con respecto al estado de equilibrio local
- $\left(\frac{dp_x}{dx}\right)$: gradiente de presiones constante

- u_r : velocidad de referencia
- u_s : velocidad del sonido

Bibliografía

- [1] J. J. Smolderer, *Experimental methods and results in rarefied gas dynamics, On Rarefied gas flows theory and experiment*, (Springer-Verlag 1981, 416)
- [2] J. H. Ferziger, and H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*, (North Holland, Amsterdam 1972)
- [3] S. A. Schaaf, *Mecanics of Rarefied Gases. In Encyclopedia of Physics*, S. Flugge. VIII, Part 2 (Berlin, Springer-Verlag, 1963)
- [4] C. Cercignani, *Theory and Application of the Boltzmann Equation*, (Scottish Academic Press, Edinburgh, London 1975)
- [5] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti, *The Mathematical Theory of Dilute Gases*, (Springer, Verlag 1994)
- [6] E. P. Muntz, *Rarefied gas Dynamic*, Ann. Rev. Fluid Mech. **21** (1989), 387
- [7] M. N. Kogan, *Molecular Gas Dynamic*, Ann. Rev. Fluid Mech. **5** (1973), 382
- [8] J. C. Maxwell, *On Stresses in Rarefied Gases arising from Inequalities of Temperature. In The Scientific Papers of James Clerk Maxwell*, (Dover, New York **2** 1952, 681)
- [9] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, (Pergamon Press. 1987)
- [10] H. Schlichting, *Boundary-layer Theory*, (McGraw-Hill 1979)
- [11] J. G. Knudsen, D. L. Katz, *Fluid Dynamics and Heat Transfer*, (McGraw-Hill, New York 1958)

- [12] V. P. Shidlovskii, *Introduction to the dynamics of rarefied gases*, (Elsevier, New York 1967)
- [13] C. Cercignani, *The Kramers problem for a not completely diffusing wall*, J. Math. Anal. Appl. **10** (1965), 568
- [14] S. K. Loyalka, *Velocity Slip Coefficient and the Diffusion Slip Velocity for a Multi-component Gas Mixture*, Phys. Fluids **14** (1971), 2599
- [15] S. K. Loyalka, *Temperature Jump in a Gas Mixture*, Phys. Fluids **17** (1974), 897
- [16] S. K. Loyalka, *Slip in the thermal creep flow*, Phys. Fluids **14** (1971), 21
- [17] S. K. Loyalka, *Velocity profile in the Knudsen layer for the Kramer's problem*, Phys. Fluids **18** (1975), 1666
- [18] S. K. Loyalka, J. H. Ferziger, *Model dependence of the temperature slip coefficient*, Phys. Fluids **11** (1968), 1668
- [19] S. K. Loyalka, J. H. Ferziger, *Model dependence of the temperature slip coefficient*, Phys. Fluids **10** (1967), 1833
- [20] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook, *A model for collision processes in gases*, Phys. Rev. **94** (1954), 511
- [21] H. W. Liepmann, R. Warasimba, M. T. Chahine, *Structure of a plane shock layer*, Phys. Fluids **5** (1962), 1313
- [22] G. A. Bird, *Monte Carlo Simulation of Gas Flows*, Ann. Rev. Fluid Mech. **10** (1978), 11
- [23] G. A. Bird, *Molecular gas dynamics*, (London, Oxford Univ. Press. 1976)
- [24] F. J. Alexander, A. L. García, *The direct simulation Monte Carlo Method*, Computer in Phys. **11** (1997), 588
- [25] B. Hasslacher, *Discrete Fluids*, Los Alamos Science Special Issue (1997), 157

- [26] H. Chen, C. Teixeira, K. Molvig, *Realization of fluid boundary conditions via discrete Boltzmann dynamics*, International Journal of Modern Physics C, **9** (1998) 1281
- [27] G. A. Bird, Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas, Phys. Fluids **6** (1963), 1518
- [28] X. He, Q. Zou, L. Luo, M. Dembo, *Analytic solution of simple flows and analysis of nonslip boundary conditions for the Lattice Boltzmann BGK model*, J. Stat. Phys. **8** (1995), 115
- [29] X. He, L. Luo, M. Dembo, *Some progress in the Lattice Boltzmann method: Reynolds number enhancement in simulations*, Physica A **239** (1997), 276
- [30] T. Ytrehus, J. J. Smolderen, J. F. Wendt, *Knudsen Layer for tracer gas diffusion*, Phys. Fluids **18** (1975), 1253
- [31] C. Cercignani, G. Tironi, *Some applications of a linearized kinetic model with correct Prandtl number*, Nuovo Cimento **43** (1966), 64
- [32] F. Sharipov, *Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. I General theory for single gas*, Physica A **203** (1994), 437; *Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. II Application of the theory for single gas*, Physica A **203** (1994), 457
- [33] G. Lohöfer, *Navier-Stokes boundary conditions of a gas mixture*, Phys. Fluids **29** (1989), 4025
- [34] H. A. Kramers, *On the behavior of a gas near a wall*, Nuovo Cimento Suppl **6** (1949), 297
- [35] C. Cercignani, *Plane Couette Flow According to the Method of Elementary Solutions*, J. Math. Anal. Appl. **11** (1965), 93
- [36] Y. Sone, S. Takata and T. Ohwada, *Numerical analysis of the plane Couette flow of a rarefied gas on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules*, Eur. J. Mech. B/Fluids **9** (1990), 273

- [37] D. J. Evans, *Computer experiment for nonlinear thermodynamics of Couette flow*, J. Chem., Phys. **78** (1983), 3297
- [38] D. Roger Willis, *Comparison of Kinetic Theory Analyses of Linearized Couette Flow*, Phys. Fluids **5** (1962), 127
- [39] J. K. Haviland, M. L. Lavin, *Application of the Monte Carlo Method to Heat Transfer in a Rarefied Gas*, Phys. Fluids **5** (1962), 1399
- [40] D. Risso, P. Cordero, *Dilute gas Couette flow: Theory and molecular dynamics simulation*, Phys. Review E **56** (1997), 489
- [41] H. Grad, *On The Kinetic Theory of Rarefied Gases*, Commun. Pure and Appl. Math. **2** (1949), 331; *Note on N-Dimensional Hermite Polynomials*. Commun. Pure and Appl. Math. **2** (1949), 325
- [42] R. Peralta-Fabi, R. Zwanzig, *On the slipping boundary condition for low density gas flow*, J. Chem. Phys. **78** (1983), 2525
- [43] S. Chapman, T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. (3rd ed., Cambridge Univ. Press, Cambridge 1970)
- [44] S. R. De Groot, P. Mazur, *Non-equilibrium thermodynamics*, (Dover, New York 1984)
- [45] L. García-Colín, *Teoría cinética de gases*, (Colección CBI. Universidad Autónoma Metropolitana 1990)
- [46] L. García-Colín, *Termodinámica de los Procesos Irreversibles*, (Colección CBI. Universidad Autónoma Metropolitana 1990)
- [47] E. H. Kennard, *Kinetic Theory of Gases*, (McGraw-Hill, 1938)
- [48] J. T. Lin, D. R. Willis, *Kinetic Theory Analysis of temperature Jump in a Polyatomic gas*, Phys. Fluids **15** (1972), 31
- [49] C. Cercignani, M. Lampis, *Kinetic models for gas-surface interactions*, Transp. Theory Stat. Phys. **1** (1971), 101

- [50] T. Klinc, I. Kuščer, *Slip coefficients for general gas-surface interaction*, Phys. Fluids **15** (1972), 1018
- [51] R. G. Lord, *Some further extensions of the Cecignani-Lampis gas-surface interaction model*, Phys. Fluids **7** (1995), 1159
- [52] E. B. Arkilic, *Measurement of the mass flow and tangential momentum accomodation coefficient in silicon micromachined channels*. PhD. thesis, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (1997)
(www.raphael.mit.edu/breuer/pubs/Arkilic_Thesis.pdf)
- [53] F. G. Collins, E. C. Knox, *Parameters of Nocilla gas-surface interaction model from measured accomodation coefficients*, AIAA J. **32** (1994), 765
- [54] L. B. Thomas, R. G. Lord, *Comparative measurements of tangential momentum ant thermal accomodations on polished and roughened steel spheres*. In rarefied Gas Dynamics, 8th Symposium. (New York 1974, 405)
- [55] B. T. Porodnov, P. E. Suetin, S. F. Borisov, V. D. Akinshin. *Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels*. J. Fluids Mech. **64** (1974), 417
- [56] J. López-Lemus, R. M. Velasco. *Slip boundary conditions in Couette flow*, Physica A **272** (1999)
- [57] R. M. Velasco, L. García-Colín, *Kinetic approach to generalized hydrodynamics*, Phys. Rev. A **44** (1991). 4961; *Generalized Hydrodynamics in Gases*, J. Nonequilib. Thermodyn. **20** (1995), 1
- [58] S. Y. Liem, D. Brown, J. H. R. Clarke, *Investigation of the homogeneous-shear nonequilibrium-molecular-dynamics method*, Phys. Rev. A **45** (1992), 3706
- [59] M. Tij, A. Santos, *Combined heat and momentum transport in a dilute gas*, Phys. Fluids **7** (1995), 2858
- [60] V. Garzó, M. López de Haro, *Kinetic model for heat and momentum transport*, Phys. Fluids **6** (1994), 3787; *Nonlinear transport for a dilute gas in steady Couette flow*, Phys. Fluids **9** (1997), 776

- [61] J. Brey, A. Santos, J. W. Dufty, *Heat and momentum transport for from equilibrium*, Phys. Rev. A **36** (1987), 2842
- [62] P. Cordero, D. Risso, *Nonlinear transport laws for low density fluids*, Physica A **257** (1998), 36
- [63] C. S. Kim, J. W. Dufty, A. Santos, J. J. Brey, *Analysis of nonlinear transport in Couette flow*, Phys. Review A **40** (1989), 7165
- [64] A. Santos, V. Garzó, J. J. Brey, *Comparison between the homogeneous-shear and the sliding-boundary methods to produce shear flow*, Phys. Rev. A **36** (1992), 8018
- [65] D. Risso, P. Cordero, *Two-Dimensional gas of disks: Thermal conductivity*, J. Stat. Phys. **82** (1996), 1453
- [66] D. L. Morris, L. Hannon, A. L. García, *Slip lenght in a dilute gas*, Phys. Review A **46** (1992), 5279
- [67] D. K. Bhattacharya, G. C. Lie, *Nonequilibrium gas flow in the transition regime: A molecular-dynamics study*, Phys. Rev. A **43** (1991), 761
- [68] I. G. Currie, *Fundamental Mechanics of Fluids*, (McGraw-Hill, 1993)
- [69] I. E. Broadwell, *Shock structure in a simple discrete velocity gas*, Phys. Fluids **7** (1964), 1243; *Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method*, J. Fluid Mech. **19** (1964), 401