

Hidrodinámica generalizada en gases bidimensionales moderadamente densos de discos rígidos

A. Rangel-Huerta

*Facultad de Ciencias de la Computación, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Ed. 135, 14 Sur y Av. San Claudio, Cd. Universitaria, 72570 Puebla, Pue., Mexico*

Recibido el 21 de octubre de 1998; aceptado el 12 de febrero de 1999

En este trabajo consideramos el comportamiento hidrodinámico de un gas bidimensional, moderadamente denso, en la región finita de vectores de onda y frecuencias. La teoría estándar de Enskog y el método de ocho-momentos de Grad, hacen posible encontrar las relaciones constitutivas generalizadas en la región donde se aplica la hidrodinámica generalizada. Mediante este procedimiento obtenemos los coeficientes de transporte que posteriormente relacionamos con sus respectivas funciones de memoria.

Descriptores: Teoría cinética; coeficientes de transporte generalizados

This paper presents the hydrodynamical behavior of a moderately dense bidimensional gas into the finite wave-vectors and frequencies region. Enskog's standard kinetic theory and Grad eight-moments method, make possible to find the generalized constitutive relations up to the generalized hydrodynamic regime. By means of this procedure, we have obtained the transport coefficients which are related with its corresponding memory functions.

Keywords: Kinetic theory; generalized transport coefficients

PACS: 51.40.+p; 05.20.Dd

1. Introducción

El comportamiento hidrodinámico de un fluido simple está caracterizado por la densidad espectral de las fluctuaciones espontáneas microscópicas que contienen toda la información relevante del sistema. En términos generales estas funciones de correlación son difíciles de evaluar directamente, sin embargo, se pueden aproximar cerca del régimen hidrodinámico (longitudes de onda largas y frecuencias bajas) a través de las ecuaciones hidrodinámicas de Navier-Stokes que describen la dinámica de un fluido viscoso. En esta descripción los coeficientes de transporte y las variables termodinámicas son datos adicionales del problema que provienen de ciertos resultados experimentales, o bien de algún modelo microscópico [1-3].

Un estudio cuidadoso de la teoría cinética generalizada de Enskog, permitió delimitar la aplicación de la hidrodinámica usual y definir el intervalo en longitudes de onda, frecuencias y densidad, donde es necesario hacer una descripción hidrodinámica generalizada de un fluido de esferas duras. El resultado básico de la teoría predice que el fluido se comporta dinámicamente como si solamente tuviera algunos eigenmodos efectivos de relajación en el régimen cinético [4, 5]. En particular, se definen tres regiones de densidad reducida $\delta = na^3$ (donde n es la densidad de número local y a es el diámetro molecular): el gas diluido $\delta \leq 0.1$, gas moderadamente denso $0.1 \leq \delta \leq 0.35$ y el régimen de gas denso $0.35 \leq \delta \leq 0.70$. Para fluidos diluidos y moderadamente densos, las ecuaciones de Navier-Stokes son válidas para vectores de onda tales que $ka \leq 1$ y además, para $1 \leq ka \leq 30$

las extensiones analíticas de los modos hidrodinámicos siguen representando los rasgos principales del factor de estructura dinámico.

Por otro lado, introduciendo una escala espacio-temporal en la hidrodinámica usual podemos hacer una descripción hidrodinámica generalizada que nos permite considerar de manera unificada las mediciones de dispersión inelástica de luz y neutrones en gases [6, 7], es decir, considerar una región finita de vectores de onda y frecuencias a partir del régimen hidrodinámico. Este procedimiento alternativo, de carácter fenomenológico, consiste en generalizar las relaciones constitutivas de manera que la respuesta de las fuerzas termodinámicas se pueda considerar como proveniente de los flujos disipativos del fluido con coeficientes de transporte generalizados que dependen del vector de onda y la frecuencia.

Excepto por algunos resultados de dinámica molecular [8], hasta hace poco no existía una deducción microscópica de los coeficientes generalizados para fluidos simples en densidades moderadas. La forma en que podemos obtenerlos de manera analítica, a partir de consideraciones del comportamiento microscópico molecular, es a través de la teoría cinética de los gases. Para gases diluidos la solución de la ecuación cinética de Boltzmann por medio del método de momentos de Grad [9], conduce a ecuaciones hidrodinámicas generalizadas para las variables relevantes del sistema que incluyen al tensor de presiones, flujo de calor y algunas otras variables no conservadas que son momentos de la función de distribución de orden tensorial mayor [10-13].

Nos queda claro que una descripción hidrodinámica generalizada para gases diluidos tiene el inconveniente de es-

tar limitada a densidades bajas. Para evitar en lo posible esta restricción, se ha implementado el método de momentos de Grad a la teoría estándar de Enskog, que es válida para gases monatómicos moderadamente densos de esferas duras [14, 15]. Este procedimiento es básicamente una extensión del tratamiento en densidades bajas, no obstante que las colisiones binarias no localizadas y los efectos de apantallamiento colisional, presentes en todos los sistemas densos, genera importantes dificultades. En efecto, para gases densos se deben incluir en la descripción las contribuciones de los flujos colisionales como contribuciones adicionales en las relaciones constitutivas generalizadas [16].

En virtud de que recientemente se han reportado algunos trabajos relativos al comportamiento hidrodinámico de fluidos bidimensionales de discos suaves y rígidos, en relación con los procesos microscópicos de relajación y transporte [17–21], y debido al hecho de que consideramos un estudio de este sistema como particularmente importante, porque presenta algunas simplificaciones en los algoritmos de dinámica molecular, en este trabajo presentamos los resultados del comportamiento de los coeficientes de transporte generalizados para un gas moderadamente denso de discos rígidos. El método de momentos de Grad se puede aplicar a la ecuación cinética estándar de Enskog en dos dimensiones, lo que nos lleva a conclusiones interesantes de los coeficientes de transporte en la región donde es válida de la hidrodinámica generalizada. Concretamente, la extensión del comportamiento hidrodinámico al régimen cinético se logra gracias a que la parte cinética del tensor de presiones y el flujo de calor son considerados momentos relevantes dentro de la descripción. Posteriormente, un procedimiento de reducción del espacio extendido de variables relevantes hacia el espacio de variables conservadas nos conduce a las relaciones constitutivas y ecuaciones hidrodinámicas generalizadas, dentro

del esquema general de funciones de memoria. Los cálculos corresponden a la aproximación de ocho momentos de Grad, en la expansión de la función de distribución, y a orden más bajo en la densidad. Los coeficientes de transporte generalizados como función del vector de onda y la frecuencia conservan las características más importantes de relajación en la región finita. Estos coeficientes contienen explícitamente a los tiempos de relajación asociados, quienes dependen directamente de las integrales de colisión molecular de discos rígidos; esto evidencia la influencia del régimen cinético.

Asimismo, como en el caso de gases de Enskog, el sistema que estamos considerando presenta ciertas dificultades al incorporar las contribuciones de los flujos colisionales que constituyen contribuciones importantes a los flujos en los sistemas densos. Aquí hemos desarrollado únicamente la descripción que corresponde al primer orden en la densidad, esto es más que suficiente para obtener la contribución principal [15], en densidades altas, de los coeficientes de transporte generalizados y de los tiempos de relajación correspondientes.

2. Modelo cinético

Consideremos un gas moderadamente denso de discos rígidos descrito por la ecuación cinética bidimensional de Enskog [18]. Esto significa que la función de distribución $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ evoluciona en el tiempo de acuerdo con la ecuación cinética siguiente:

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) = J_E(f, f); \quad (1)$$

en ella no se han considerado fuerzas externas, \mathbf{c} es la velocidad molecular y $J_E(f, f)$ el kernel colisional de Enskog, es decir,

$$J_E(f, f) = \int_{\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \geq 0} \left[\chi\left(\mathbf{x} + \frac{a}{2}\boldsymbol{\epsilon}, t\right) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}', t) f(\mathbf{x} + a\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{c}'_1, t) - \chi\left(\mathbf{x} - \frac{a}{2}\boldsymbol{\epsilon}, t\right) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) f(\mathbf{x} - a\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{c}_1, t) \right] a(\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) d\boldsymbol{\epsilon} d\mathbf{c}_1. \quad (2)$$

En las ecuaciones anteriores $(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1)$ y $(\mathbf{c}', \mathbf{c}'_1)$ son las velocidades de dos partículas antes y después de la colisión, $\mathbf{g} = \mathbf{c}_1 - \mathbf{c}$ es la velocidad relativa lineal, mientras que a es el diámetro molecular y $\boldsymbol{\epsilon}$ es un vector unitario con dirección igual a la línea que une los centros moleculares en colisión, apuntando hacia la molécula de referencia. La función χ es la función de distribución radial por pares para fluidos bidimensionales en equilibrio local, evaluada en el punto de contacto de los discos rígidos en colisión. Esta función toma en cuenta las correlaciones espaciales y el hecho de que la probabilidad de colisión aumenta para gases densos. El factor χ es función de la densidad local, es decir, de la posición y del tiempo, además debe ser evaluada en el punto de contacto de los discos en colisión $(\mathbf{x} \pm (a/2)\boldsymbol{\epsilon}, t)$.

La expansión en serie de Taylor del kernel colisional de la ecuación de Enskog, hace posible expresarlo como una suma

de términos caracterizados por su dependencia en el diámetro molecular, esto es,

$$J_E(f, f) = J^0(f, f; a) + J^1(f, f; a^2) + O(a^3), \quad (3)$$

donde

$$J^0(f, f) = \chi \int (f' f'_1 - f f_1) a(\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) d\boldsymbol{\epsilon} d\mathbf{c}_1, \quad (4)$$

$$J^1(f, f) = a \int [\chi \boldsymbol{\epsilon} \cdot (f' \nabla f'_1 + f \nabla f_1) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \nabla \chi) (f' f'_1 + f f_1)] a(\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) d\boldsymbol{\epsilon} d\mathbf{c}_1 \dots \quad (5)$$

J^0 se reduce a la contribución del gas diluido multiplicado por χ , por lo cual, es ligeramente más grande que la corres-

pendiente al gas diluido. J^I es un término de segundo orden en el diámetro molecular de disco rígido que contiene el primer orden en los gradientes de la función de distribución, de manera similar podemos construir los términos sucesivos de orden superior. Es un hecho bien conocido que esta clase de términos da origen al transporte colisional del sistema, un mecanismo de transporte dominante en gases densos.

Ahora conviene definir las variables conservadas que serán usadas para describir el comportamiento hidrodinámico del sistema:

$$n(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (6)$$

es la densidad de número, que define la densidad local $\rho(\mathbf{x}, t) = mn$, siendo m la masa molecular;

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{n} \int \mathbf{c} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (7)$$

es la velocidad hidrodinámica, mediante la cual podemos definir la velocidad peculiar $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u}$ y

$$\rho E(\mathbf{x}, t) = nK_B T(\mathbf{x}, t) = \int \frac{1}{2} m \mathbf{C}^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (8)$$

que denota la temperatura cinética $T(\mathbf{x}, t)$ a través de la energía cinética local del sistema $\rho E(\mathbf{x}, t)$, donde K_B es la constante de Boltzmann.

Las ecuaciones de balance para estas cantidades se obtienen directamente de la ecuación de Enskog, el cálculo es muy

similar al que se hace en gases diluidos, debido a que el kernel colisional se anula para las variables conservadas. Después de multiplicar esta ecuación por las diferentes propiedades moleculares y promediar sobre las velocidades resulta

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (9)$$

que es la ecuación de continuidad, y el balance de ímpetu,

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + P^K + P^I + \dots) = 0. \quad (10)$$

Aquí el tensor de presiones $P(\mathbf{x}, t) = P^K(\mathbf{x}, t) + P^I + (\mathbf{x}, t) \dots$ está formado de una parte cinética y otra contribución debida a los flujos colisionales, es decir,

$$P^K(\mathbf{x}, t) = \int m \mathbf{C} \mathbf{C} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (11)$$

y

$$P^I(\mathbf{x}, t) = \frac{a}{2} \int \chi m (\mathbf{C}' - \mathbf{C}) \epsilon f f_1 d\Gamma, \quad (12)$$

donde hemos denotado $d\Gamma = a(\mathbf{g} \cdot \mathbf{c}) d\epsilon d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}$ como el elemento de área que contiene la sección transversal del disco rígido (notemos que $P^I(\mathbf{x}, t)$ representa el flujo de ímpetu lineal producido por la transferencia colisional). De manera similar se genera la ecuación de balance para la energía local del sistema,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho E + \frac{1}{2} \rho \mathbf{u}^2 \right) + \nabla \cdot \left(\rho E \mathbf{u} + \frac{1}{2} \rho \mathbf{u}^2 \mathbf{u} + \mathbf{q}^K + \mathbf{q}^I + \dots \right) + (P^K + P^I + \dots) \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (13)$$

En esta ecuación la contribución cinética del flujo de calor se representa como sigue:

$$\mathbf{q}^K(\mathbf{x}, t) = \int \frac{1}{2} (m \mathbf{C}^2 - 4K_B T) \rho \mathbf{C} d\mathbf{c}, \quad (14)$$

mientras que el momento colisional se puede expresar así:

$$\mathbf{q}^I(\mathbf{x}, t) = \frac{a}{4} \int \chi m (\mathbf{C}'^2 - \mathbf{C}^2) \epsilon f f_1 d\Gamma. \quad (15)$$

Debemos notar que la expansión del kernel colisional nos conduce a varias contribuciones colisionales en la ecuación cinética y en los flujos correspondientes. No obstante, podemos considerar solamente las primeras contribuciones de cada flujo, debido a que esto nos proporciona la primera corrección en la densidad del gas. Para obtener una solución aproximada de la ecuación de Enskog, según el método de momentos de Grad, vamos a considerar una expansión de la función de distribución alrededor de la maxwelliana local correspondiente a los invariantes colisionales del sistema, éstos se encuentran definidos en las Ecs. (6)–(8), a saber,

$$f^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) = \left(n \frac{m}{2\pi K_B T} \right) \exp \left(\frac{-m \mathbf{C}^2}{2K_B T} \right). \quad (16)$$

En la expansión de Grad, se supone que podemos representar la función de distribución como una serie infinita de la forma,

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) = f^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \sum_s \frac{1}{s!} A^{(s)}(\mathbf{x}, t) H^{(s)}(\mathbf{c}), \quad (17)$$

donde $H^{(s)}(\mathbf{c})$ son los polinomios multidimensionales de Hermite y $A^{(s)}(\mathbf{x}, t)$ los momentos correspondientes de la función de distribución. En adelante usaremos como variables relevantes los flujos físicos relacionados con los momentos de Grad. Esto significa que el flujo de calor y el tensor de presiones cumplen un papel importante en la descripción y es por ello que necesitamos sus ecuaciones hidrodinámicas de evolución en lugar de las ecuaciones constitutivas usuales. Los polinomios de Hermite tienen como variables independientes la velocidad peculiar, de tal modo, que los momentos asociados son justamente las contribuciones cinéticas de los flujos. En contraste, las contribuciones del tensor de presiones y flujo de calor, que vienen del transporte colisional de un gas denso, no tienen una expresión directa en términos de los

polinomios de Hermite. No obstante que las contribuciones colisionales de los flujos no son variables independientes, se pueden expresar en términos de los flujos cinéticos corres-

pondientes, para ello sustituimos en las expresiones de los momentos de orden superior una forma adecuada de la función de distribución. En la aproximación de ocho momentos la función de distribución es la siguiente:

$$f^{(8)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) = f^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \left[1 + \frac{1}{2\rho} \left(\frac{m}{K_B T} \right)^2 P^{0K}(\mathbf{x}, t) : \mathbf{C}\mathbf{C} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{m}{K_B T} \right)^2 \left(\frac{m\mathbf{C}^2}{4K_B T} - 1 \right) \mathbf{q}^K(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{C} \right]. \quad (18)$$

Aquí hemos denotado con $(^{0K})$ la parte cinética y sin traza del tensor de presiones, para que al sustituir directamente la función de distribución $f^{(8)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ en las definiciones de los flujos colisionales de transporte, [Ec. (12) y Ec. (15)], podamos obtener su representación en esta aproximación, es decir,

$$P^I(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2} P^{0K} + n K_B T \delta_{ij} \right) \chi b \rho, \quad (19)$$

$$\mathbf{q}^I(\mathbf{x}, t) = \frac{3}{4} \chi b \rho \mathbf{q}^K \quad (20)$$

El segundo término de $P^I(\mathbf{x}, t)$ es la contribución a primer orden en la densidad de la presión hidrostática que es proporcional al factor de co-área molecular $b\rho = (\pi a^2/2m)\rho$, en tanto que δ_{ij} es el tensor unitario bidimensional. Debemos notar que las expresiones anteriores son válidas en general para el caso de discos rígidos, sin importar el régimen de vectores de onda que estemos considerando. En lo sucesivo utilizaremos la siguiente expansión virial para χ , adecuada a sistemas bidimensionales [18]:

$$\chi[n(\mathbf{x}, t)] = 1 + 0.7820b\rho(\mathbf{x}, t) + 0.5322[b\rho(\mathbf{x}, t)]^2 + 0.3338[b\rho(\mathbf{x}, t)]^3 + 0.1992[b\rho(\mathbf{x}, t)]^4 + 0.1141[b\rho(\mathbf{x}, t)]^5 + \dots \quad (21)$$

3. Ecuaciones de movimiento

Para avanzar un poco más dentro del cálculo, requerimos que la función de distribución $f^{(8)}(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ cumpla con la ecuación de Enskog. En lugar de sustituir directamente la función de distribución, construimos las ecuaciones de movimiento para las variables relevantes no conservadas mediante un proceso de integración de la ecuación cinética. Es un hecho bien conocido que en este caso el término de arrastre en la ecuación de Enskog introduce los momentos usuales del método

de Grad de orden superior. En efecto, vamos a tener una jerarquía de ecuaciones, en la cual necesitamos aplicar una suposición de cerradura; en nuestro caso limitaremos el cálculo a ocho momentos. Esto significa que todas las integrales deben ser calculadas con la función de distribución de Grad en la aproximación de momentos cinéticos correspondientes a la Ec. (18).

Siguiendo los pasos del proceso mencionado anteriormente, obtenemos que la parte linealizada del tensor de presiones obedece la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial P_{ij}^{0K}}{\partial t} + \nabla_l (S_{ijl}^K + S_{ijl}^I)^0 + 2nK_B T (1 + \chi b\rho) (\nabla \mathbf{u})_{ij}^0 - \left[nK_B T (\nabla \mathbf{u})_{ij}^0 + \frac{1}{4} (\nabla \mathbf{q}^K)_{ij}^0 \right] \chi b \rho = -2 \sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi P_{ij}^{0K} \quad (22)$$

donde

$$S_{ijl}^K = \int m (\mathbf{C}\mathbf{C}\mathbf{C})_{ijl} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \\ = \frac{1}{2} (q_i^K \delta_{jl} + q_j^K \delta_{il} + q_l^K \delta_{ij}) \quad (23)$$

y

$$S_{ijl}^I = \frac{a}{2} \int \chi m [(\mathbf{C}'\mathbf{C}' - \mathbf{C}\mathbf{C})\epsilon]_{ijl} f f_1 d\Gamma \\ = \frac{1}{2} \left(q_i^K \delta_{jl} + q_j^K \delta_{il} + \frac{1}{2} q_l^K \delta_{ij} \right) \chi b \rho, \quad (24)$$

con $i, j, l = 1, 2$. Por otro lado, la ecuación de movimiento linealizada para la parte cinética del flujo de calor tiene la siguiente forma,

$$\frac{\partial \mathbf{q}^K}{\partial t} + \nabla \cdot (J^K + J^I) - \frac{K_B T}{m} \nabla \cdot (P^{0K} + P^{0I}) \\ - \frac{1}{2} \rho T \left(\frac{K_B}{m} \right)^2 \chi b \rho \nabla T = - \sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi \mathbf{q}^K. \quad (25)$$

Aquí J^K, J^I son los flujos del flujo de calor correspondiente, asignados como un cuarto momento de la función de distribución que al ser evaluados dentro de la aproximación que estamos considerando los podemos representar como

$$\begin{aligned}
 J^K &= \int \frac{m}{2} \mathbf{C}^2 (\mathbf{C}\mathbf{C})_{ij} f d\mathbf{c} \\
 &= 2\rho \left(\frac{K_B T}{m} \right)^2 \delta_{ij} + 3 \frac{K_B T}{m} P_{ij}^{0K} \quad (26)
 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 J^I &= \frac{a}{2} \int \frac{m}{2} \chi (\mathbf{C}'^2 \mathbf{C}' - \mathbf{C}^2 \mathbf{C}) \epsilon f f_1 d\Gamma \\
 &= 2 \frac{K_B T}{m} \left(\rho \frac{K_B T}{m} \delta + \frac{7}{8} P^{0K} \right) \chi b \rho. \quad (27)
 \end{aligned}$$

Con todos estos elementos, estamos listos para escribir un conjunto completo linealizado de ecuaciones hidrodinámicas en términos de las variables relevantes del sistema y sus derivadas. La ecuación de la densidad de número es

$$\frac{\partial n}{\partial t} + n \nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \quad (28)$$

la ecuación del ímpetu lineal es

$$\begin{aligned}
 nm \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + n K_B \chi^{(4)} \nabla T \\
 + K_B T \left(\chi^{(8)} + \frac{\partial \chi}{\partial n} b n^2 \right) \nabla n + \chi^{(2)} \nabla P^{0K} = 0 \quad (29)
 \end{aligned}$$

donde $\chi^{(\nu)} = [1 + (\nu/4)\chi b n]$, $\nu = 1, 2, \dots$ representa una notación corta de las correlaciones espaciales que definen la dependencia en la densidad de la ecuación de movimiento. Finalmente, la temperatura cinética obedece la ecuación de balance que ponemos a continuación:

$$n K_B \frac{\partial T}{\partial t} + n K_B T \chi^{(4)} \nabla \mathbf{u} + \chi^{(3)} \nabla \mathbf{q}^K = 0. \quad (30)$$

Para las variables relevante no conservadas se aplica el mismo procedimiento, de tal manera que la parte cinética del tensor viscoso sin traza evoluciona según,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial P^{0K}}{\partial t} + 2n K_B T \chi^{(2)} (\nabla \mathbf{u})^0 \\
 + \chi^{(3)} (\nabla \mathbf{q}^K)^0 = -2 \sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi P_{ij}^{0K}, \quad (31)
 \end{aligned}$$

y la parte cinética del flujo de calor,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathbf{q}^K}{\partial t} + 2nm \left(\frac{K_B}{m} \right)^2 \chi^{(3)} \nabla T \\
 + \frac{K_B T}{m} \chi^{(3)} \nabla \cdot P^{0K} = - \sqrt{\frac{\pi a^2 K_B T}{m}} n \chi \mathbf{q}^K. \quad (32)
 \end{aligned}$$

Es evidente que podemos escribir un conjunto de ecuaciones similares para el tensor de presiones y flujo de calor completo, lo único que necesitamos es tomar en cuenta la relación entre las partes cinéticas y colisionales de los flujos. Las Ecs. (31,32) son ecuaciones del tipo de relajación cuyos tiempos característicos se pueden expresar como

$$\begin{aligned}
 \tau_p &= \frac{\tau_p^0}{\chi} = \frac{1}{2\chi n} \sqrt{\frac{m}{\pi a^2 K_B T}}, \\
 \tau_q &= \frac{\tau_q^0}{\chi} = \frac{1}{\chi n} \sqrt{\frac{m}{\pi a^2 K_B T}}. \quad (33)
 \end{aligned}$$

Notemos que estos tiempos de relajación están asociados con la interacción colisional de discos rígidos, de modo tal que solamente tenemos el diámetro del disco como parámetro variable. Por otro lado, sus valores son más pequeños que los tiempos de relajación del gas diluido τ_p^0, τ_q^0 , no obstante, debido al rango de variación de χ con la densidad siempre se mantienen dentro del mismo orden de magnitud.

4. Ecuaciones constitutivas generalizadas

En esta sección del trabajo vamos a obtener las relaciones constitutivas generalizadas del gas, para ello es necesario resolver las ecuaciones hidrodinámicas de las variables relevantes no conservadas en favor de los gradientes de las variables conservadas. Con el fin de llevar a cabo esta tarea, expresamos las ecuaciones de los flujos en el espacio de Fourier y tomamos su componente longitudinal, esto nos conduce a la siguiente expresión,

$$\begin{aligned}
 (1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi}) i \mathbf{k} i \mathbf{k} : P^{0K}(\mathbf{k}, \omega) - \eta_0 \frac{\chi^{(2)}}{\chi} k^2 [i \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}, \omega)] \\
 - \frac{1}{2} \tau_p^0 \frac{\chi^{(3)}}{\chi} k^2 [i \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}^K(\mathbf{k}, \omega)] = 0, \quad (34)
 \end{aligned}$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda y ω la frecuencia que resulta después de realizar la transformación. Aquí, $\eta_0 = (m K_B T / \pi)^{1/2} / 2a$ es la viscosidad cortante usual del régimen hidrodinámico para el sistema diluido bidimensional. Por otro lado, la ecuación de movimiento asociada con el flujo de calor tiene una expresión muy semejante, a saber,

$$\begin{aligned}
 (1 - i\omega \frac{\tau_q^0}{\chi}) i \mathbf{k} \mathbf{q}^K(\mathbf{k}, \omega) - \lambda_0 \frac{\chi^{(3)}}{\chi} k^2 T(\mathbf{k}, \omega) \\
 + \frac{K_B T}{m} \tau_q^0 \frac{\chi^{(3)}}{\chi} i \mathbf{k} i \mathbf{k} : P^{0K}(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (35)
 \end{aligned}$$

Como en el caso anterior, al simplificar las expresiones aparece la conductividad térmica del gas en el régimen diluido $\lambda_0 = 2(K_B^3 T / m \pi)^{1/2} / a$. La parte transversal de las Ecs.(31) y (32) se obtiene con ayuda del operador de proyección $Q = \delta_{ij} - \mathbf{k}\mathbf{k} / k^2$, lo que nos da como resultado,

$$\left(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi}\right) Q \cdot [i\mathbf{k} \cdot P^{0K}(\mathbf{k}, \omega)] - \eta_0 \frac{\chi^{(2)}}{\chi} k^2 Q \cdot [i\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}, \omega) - \frac{1}{2} \tau_p^0 \frac{\chi^{(3)}}{\chi} k^2 Q \cdot (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}^K(\mathbf{k}, \omega))] = 0 \quad (36)$$

y

$$\left(1 - i\omega \frac{\tau_q^0}{\chi}\right) Q \cdot i\mathbf{q}^K(\mathbf{k}, \omega) + \frac{K_B T}{m} \tau_0^q \frac{\chi^{(3)}}{\chi} Q \cdot [i\mathbf{k} \cdot P^{0K}(\mathbf{k}, \omega)] = 0. \quad (37)$$

Nuevamente todas las variables son las correspondientes transformadas de Fourier de las variables relevantes que dependen del vector de onda \mathbf{k} y la frecuencia ω .

Para obtener una descripción hidrodinámica generalizada de un gas denso de discos rígidos en el espacio reducido de variables conservadas $\rho(\mathbf{k}, \omega)$, $\mathbf{u}(\mathbf{k}, \omega)$, $T(\mathbf{k}, \omega)$, necesitamos resolver las ecuaciones de movimiento del tensor de presiones $P^{0K}(\mathbf{k}, \omega)$ y del flujo de calor $\mathbf{q}^K(\mathbf{k}, \omega)$. Mediante un procedimiento que consiste en desacoplar las Ecs. (34) y (35) e incorporar posteriormente los flujos colisionales de las Ecs. (19) y (20) conforme la Ref. 14, obtenemos un conjunto representativo de "ecuaciones constitutivas generalizadas". Para el gas denso bidimensional que estamos considerando se tiene

$$i\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}(\mathbf{k}, \omega) = \lambda(\mathbf{k}, \omega) k^2 T(\mathbf{k}, \omega) - \Upsilon(\mathbf{k}, \omega) k^2 [i\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}, \omega)] \quad (38)$$

$$i\mathbf{k} \cdot P^0(\mathbf{k}, \omega) = nm\nu(\mathbf{k}, \omega) k^2 [i\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}, \omega)] + \Upsilon(\mathbf{k}, \omega) \frac{k^4}{T} T(\mathbf{k}, \omega) \quad (39)$$

$$Q \cdot [i\mathbf{k} \cdot P^0(\mathbf{k}, \omega)] = nm\nu_t(\mathbf{k}, \omega) k^2 Q \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}, \omega), \quad (40)$$

donde $\mathbf{q}(\mathbf{k}, \omega)$, $P^0(\mathbf{k}, \omega)$ son los flujos totales de ímpetu y energía en la región finita de \mathbf{k}, ω . Al expresar las ecuaciones de relajamiento de esta manera, podemos identificar directamente a los coeficientes de transporte generalizados. Los resultados que obtenemos son los siguientes: La conductividad térmica generalizada,

$$\lambda(\mathbf{k}, \omega) = \lambda_0 \frac{(\chi^{(3)})^2}{\chi} \left[1 - i\omega \frac{\tau_q^0}{\chi} + \frac{1}{2} \frac{K_B T}{m} \left(\frac{\chi^{(3)}}{\chi} \right)^2 \frac{\tau_p^0 \tau_q^0 k^2}{(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi})} \right]^{-1}, \quad (41)$$

cuyo límite hidrodinámico lo podemos determinar directamente:

$$\lim_{(k, \omega) \rightarrow (0, 0)} \lambda(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\lambda_0}{\chi} \left(1 + \frac{3}{4} \chi bn \right)^2. \quad (42)$$

Las componentes longitudinal y/o transversal de la viscosidad cortante,

$$\nu(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\eta_0}{nm} \frac{(\chi^{(2)})^2}{\chi} \left[1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi} + \frac{1}{2} \frac{K_B T}{m} \left(\frac{\chi^{(3)}}{\chi} \right)^2 \frac{\tau_p^0 \tau_q^0 k^2}{(1 - i\omega \frac{\tau_q^0}{\chi})} \right]^{-1}; \quad (43)$$

su límite hidrodinámico correspondiente es

$$\lim_{(k, \omega) \rightarrow (0, 0)} \nu(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\eta_0}{nm\chi} \left(1 + \frac{1}{2} \chi bn \right)^2. \quad (44)$$

Mientras que $\Upsilon(\mathbf{k}, \omega)$, el coeficiente generalizado de efectos cruzados, también denominado coeficiente de termostricción, es

$$\Upsilon(\mathbf{k}, \omega) = \frac{T}{4} \frac{\chi^{(2)}}{\chi} \frac{\tau_q^0}{(1 - i\omega \frac{\tau_p^0}{\chi})} \lambda(\mathbf{k}, \omega) \quad (45)$$

y

$$\lim_{(k, \omega) \rightarrow (0, 0)} \Upsilon(\mathbf{k}, \omega) = \frac{T}{4\chi^2} \left(1 + \frac{1}{2} \chi bn \right) \left(1 + \frac{3}{4} \chi bn \right)^2 \tau_q^0 \lambda_0. \quad (46)$$

Para gases densos bidimensionales la viscosidad cortante longitudinal y transversal coinciden completamente. Notemos que tanto χ como $\chi^{(u)}$ tienden a la unidad conforme baja la densidad del gas, de modo tal que los coeficientes de transporte tienden a sus valores usuales en régimen diluido. Cabe mencionar la importancia de los tiempos de relajación que definen las diferentes etapas de evolución del gas hacia el estado de equilibrio y, a la vez, determinan el comportamiento con respecto al vector de onda y la frecuencia. Estos resultados confirman de manera muy clara la transición suave del régimen cinético al régimen hidrodinámico. Por otro lado, hemos determinado las expresiones analíticas de las transformaciones que sufren los coeficientes de transporte usuales en el régimen cinético para que se pueda preservar la estructura general de las relaciones constitutivas. La dependencia en la densidad del gas aparece de manera natural en los términos que contienen las funciones de correlación por pares. Esta característica es muy frecuente en los resultados que proporcionan la teoría estándar de Enskog para otros sistemas [22, 23].

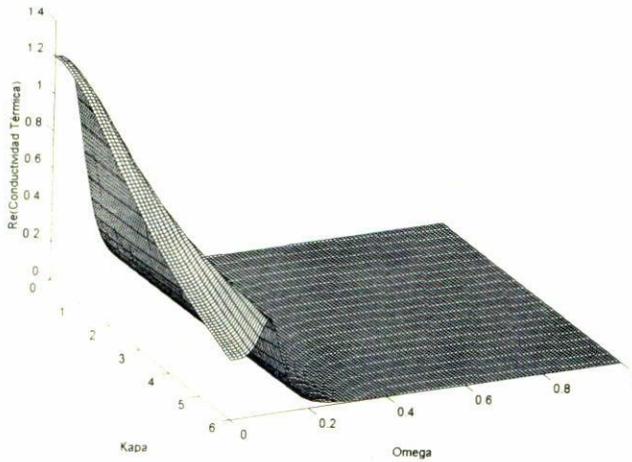


FIGURA 1. La parte real de la conductividad térmica generalizada, como función de las variables adimensionales ka y $\omega\tau_p^0$, para un gas denso bidimensional que se encuentra a la densidad reducida $\delta = 0.144$.

Vamos a analizar el comportamiento de los coeficientes de transporte en función de ka (Kapa) y $\omega\tau_p^0$ (Omega), el vector de onda y la frecuencia adimensional, respectivamente. En las gráficas 3-D representamos separadamente la parte real e imaginaria de los coeficientes generalizados quienes se encuentran normalizados con respecto a sus valores del gas diluido en el régimen hidrodinámico. Esto nos permite tener en cuenta totalmente la influencia debida a la densidad del sistema, cuyo valor más representativo para gases de Enskog es $\delta = 0.144$. La Fig. 1 muestra el comportamiento de la parte real de la conductividad térmica generalizada con respecto a las variables independientes. Como podemos observar, corresponde a una función de relajación que tiende a cero conforme nos movemos hacia el régimen cinético. No obstante, debido al valor relativamente grande de la densidad, este coeficiente, junto con los coeficientes generalizados restantes, está por arriba de la unidad en el régimen hidrodinámico ($ka = 0, \omega\tau_p^0 = 0$). Este comportamiento general, que también es característico en gases diluidos y gases densos de esferas duras, se presenta de manera menos pronunciada en la parte real de la viscosidad generalizada, lo que podemos apreciar en la Fig. 2. Con la misma influencia en la densidad, pero con diferente escala en los ejes de las variables independientes, en la Fig. 3 representamos el comportamiento de relajación para la parte real del coeficiente generalizado de efectos cruzados. Todos los coeficientes generalizados tienden a cero, no obstante de manera más lenta que cuando ocurre en gases diluidos, esta tendencia es menos pronunciada conforme aumenta la densidad. En las Figs. 4 y 5, graficamos la parte imaginaria de la conductividad térmica y viscosidad generalizada, cuyo máximo es más pronunciado que en los gases diluidos, y de manera similar a la parte real con el aumento en la densidad tienden más lentamente a cero. Con un cambio de escala en las variables independientes, en la Fig. 6 se encuentra la parte imaginaria del coeficiente de efectos cruzados. Este coeficiente, que regularmente no es

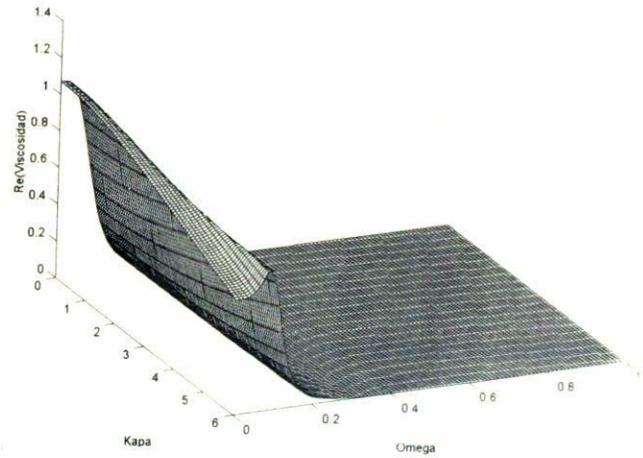


FIGURA 2. La parte real de la viscosidad generalizada, como función de las variables adimensionales ka y $\omega\tau_p^0$, para un gas denso bidimensional que se encuentra a la densidad reducida $\delta = 0.144$.

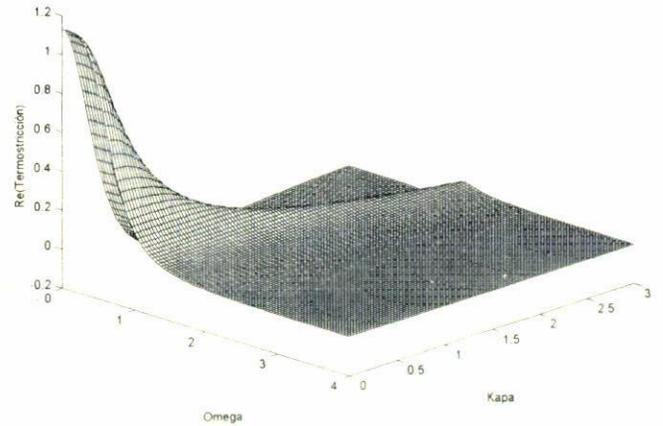


FIGURA 3. La parte real del coeficiente de termostricción, como función de las variables adimensionales ka y $\omega\tau_p^0$, para un gas denso bidimensional que se encuentra a la densidad reducida $\delta = 0.144$.

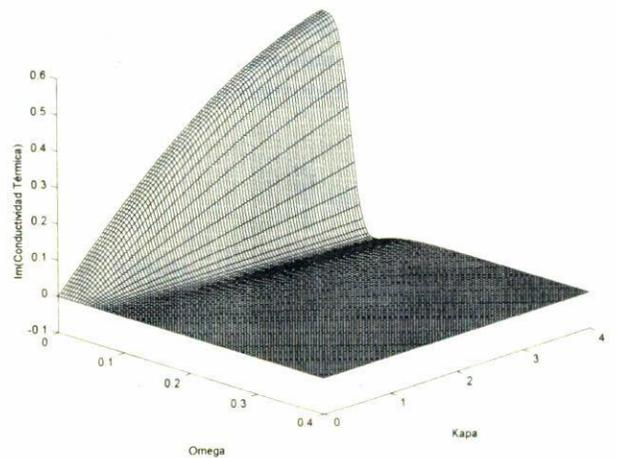


FIGURA 4. La parte imaginaria de la conductividad térmica generalizada, como función de las variables adimensionales ka y $\omega\tau_p^0$, para un gas denso bidimensional que se encuentra a la densidad reducida $\delta = 0.144$.

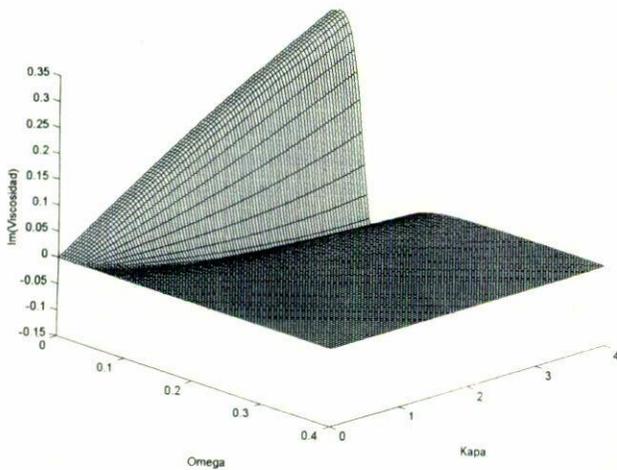


FIGURA 5. La parte imaginaria de la viscosidad generalizada, como función de las variables adimensionales ka y $\omega\tau_p^0$, para un gas denso bidimensional que se encuentra a la densidad reducida $\delta = 0.144$.

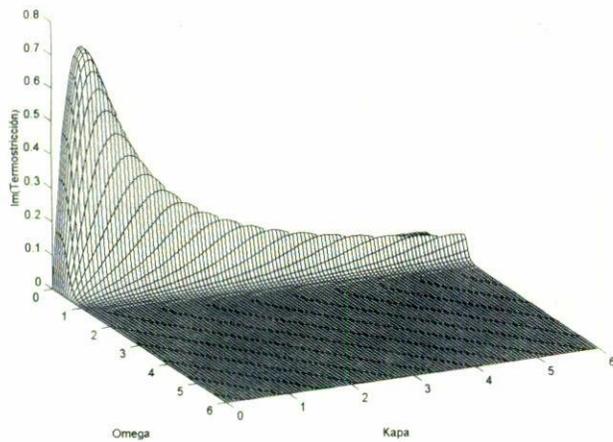


FIGURA 6. La parte imaginaria del coeficiente de termostricción, como función de las variables adimensionales ka y $\omega\tau_p^0$, para un gas denso bidimensional que se encuentra a la densidad reducida $\delta = 0.144$.

tratado de manera muy clara en la literatura, tiene un comportamiento similar al que se obtiene para gases diluidos.

5. Comparación con Funciones de Memoria

Para relacionar el modelo bidimensional Grad-Enskog con los formalismos usuales de funciones de correlación de la hidrodinámica generalizada, necesitamos reinterpretar los resultados de los coeficientes de transporte del gas denso bidimensional, en la región finita de \mathbf{k}, ω , como funciones de memoria correspondientes al esquema de la ecuación de Langevin generalizada [1, 2]. Recordemos que la descripción de un estado fuera de equilibrio de un sistema macroscópico, puede llevarse a cabo en términos de un conjunto de variable relevantes (A_i), que obedecen ecuaciones de movimiento determinadas por la matriz de frecuencia $\Omega_{ij}(\mathbf{k})$ y la matriz

de memoria $H_{ij}(\mathbf{k}, t)$. El comportamiento dinámico de tales variables se expresa como sigue:

$$\frac{\partial A_j(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = i\Omega_{jl}(\mathbf{k})A_l(\mathbf{k}, t) - \int_0^t H_{il}(\mathbf{k}, t')A_l(\mathbf{k}, t - t') dt' + F_j(\mathbf{k}, t). \quad (47)$$

En esta ecuación hemos indicado explícitamente la dependencia sobre el vector de onda de todas las cantidades, F_j es el valor de la fuerza fluctuante asociada con todas las variables relevantes que no se tomaron en cuenta en esta descripción. Si las variables relevantes $A_j(\mathbf{k}, t)$ se eligen de tal manera que representen los procesos de relajación lenta en el fluido, entonces la ecuación de Langevin es una buena descripción del comportamiento hidrodinámico en la región finita de longitudes de onda y frecuencias. La matriz de frecuencia $\Omega_{ij}(\mathbf{k})$ determina a través de sus eigenvalores las frecuencias de los modos colectivos de relajación lenta. La matriz de amortiguamiento o kernel de memoria, $H_{ij}(\mathbf{k}, t)$ contiene las constantes de amortiguamiento que son cantidades estrechamente relacionadas con los coeficientes de transporte generalizados. En efecto, el método de momentos de Grad proporciona un conjunto de ecuaciones de evolución de las variables relevantes, que suplementadas con las relaciones constitutivas generalizadas, las podemos representar en el espacio de Fourier de la forma siguiente,

$$-i\omega A_i(\mathbf{k}, \omega) = L_{ij}(\mathbf{k}, \omega)A_j(\mathbf{k}, \omega), \quad (48)$$

donde

$$L_{ij}(\mathbf{k}, \omega) = i\Omega_{ij}(\mathbf{k}) - H_{ij}(\mathbf{k}, t), \text{ y } A_i(\mathbf{k}, \omega)$$

está formado de las variables relevantes conservadas adimensionales,

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \left[\frac{n(\mathbf{k}, \omega)}{n}, \left(\frac{m}{K_B T \chi^{(8)}} \right)^{\frac{1}{2}} i\mathbf{k}u(\mathbf{k}, \omega), \left(\frac{1}{\chi^{(8)}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T(\mathbf{k}, \omega)}{T} \right]. \quad (49)$$

Bajo estas condiciones podemos representar los elementos distintos de cero de la matriz frecuencia:

$$\Omega_{12}(\mathbf{k}) = \Omega_{21}(\mathbf{k}) = -\sqrt{\frac{K_B T}{m}} \chi^{(8)} k, \quad (50)$$

$$\Omega_{23}(\mathbf{k}) = \Omega_{32}(\mathbf{k}) = -\sqrt{\frac{K_B T}{m}} \chi^{(4)} k, \quad (51)$$

y los elementos distintos de cero la matriz de memoria, estos últimos se expresan en términos de los coeficientes generalizados, esto es,

$$H_{22}(\mathbf{k}, \omega) = \nu(\mathbf{k}, \omega)k^2, H_{33}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\lambda(\mathbf{k}, \omega)}{nK_B}k^2, \quad (52)$$

$$H_{23}(\mathbf{k}, \omega) = H_{32}(\mathbf{k}, \omega) = - \left(\frac{K_B T}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Upsilon(\mathbf{k}, \omega)}{nK_B T} i k^3, \quad (53)$$

$$H_{44}(\mathbf{k}, \omega) = H_{55}(\mathbf{k}, \omega) = \nu(\mathbf{k}, \omega)k^2. \quad (54)$$

Al escribir las ecuaciones hidrodinámica de esta manera, vemos con claridad que los coeficientes de transporte generalizados representan la respuesta no-local y no-instantánea del sistema. Además, en el caso del gas denso bidimensional la respuesta del sistema, por efectos de deformación cortante, coincide tanto en la dirección longitudinal como en la transversal. La matriz de memoria resulta ser simétrica [14], como consecuencia de la reciprocidad de efectos cruzados en las relaciones constitutivas generalizadas.

6. Conclusiones

Hemos presentado un estudio del comportamiento hidrodinámico generalizado de un gas moderadamente denso de discos rígidos en la región finita de vectores de onda y frecuencias. La teoría estandar de Enskog para este sistema, a

través del método de ocho-momentos de Grad, hace posible considerar al tensor de presiones y al flujo de calor como variables relevantes. Un estudio cuidadoso de los flujos termodinámicos nos indica cómo incorporar los flujos cinéticos y colisionales en la región finita de vectores de onda. Este procedimiento nos permite obtener expresiones analíticas de los coeficientes de transporte generalizados cuyo comportamiento en la región finita está determinado por algunos tiempos de relajación característicos, mientras que la dependencia en la densidad está presente a través de las funciones de correlación por pares. Los coeficientes generalizados se reducen a los coeficientes de transporte usuales de Chapman y Enskog en el régimen hidrodinámico y, por otro lado, a los resultados del gas diluido en densidades bajas. Finalmente, hemos realizado una comparación de nuestro tratamiento con el formalismo usual de la hidrodinámica generalizada. En este contexto es posible identificar a los coeficientes de transporte como las funciones de memoria que describen la respuesta no localizada y no instantánea del sistema.

Agradecimientos

El autor desea agradecer el apoyo financiero de CONACYT-México, bajo el rubro proyecto de investigación inicial 126148-A.

1. J.P. Boon and S. Yip, *Molecular hydrodynamics*, (Dover Pub. Inc., New York, 1991).
2. J.P. Hansen and I.R. McDonald, *Theory of simple fluids*, 2nd edition, (Academic Press Inc., London, 1986).
3. P. Résibois and H. De Leener, *Classical kinetic Theory of fluids*, (John Wiley & Sons, New York, 1977).
4. I.M. de Scheeper *et al.*, *Phys. Rev. A* **39** (1989) 259.
5. E.G.D. Cohen and B. Kamgar-Parsi, *Phys. Lett.* **144A** (1986) 241.
6. C.H. Wang, *Spectroscopy of Condensed Media Dynamic of Molecular Interactions*, (Academic Press Inc., London, 1985).
7. S.W. Lovesey and T. Springer, *Dynamic of Solid and Liquids by Neutron Scattering*, (Spring-Verlag, New York, 1977).
8. W.E. Alley and B.J. Alder, *Phys. Rev. A* **27** (1983) 3158.
9. H. Grad, *Principles of the Kinetic Theory of Gases, Thermodynamic in Gases, Handbudeher Physic*, (Springer-Verlag, Berlín, 1958) Vol. 12.
10. R.M. Velasco and L.S. García-Colín, *Phys. Rev. A* **44** (1991) 4961.
11. R.M. Velasco and L.S. García-Colín, *J. Stat. Phys.* **69** (1992) 217.
12. R.M. Velasco, "Teoría Cinética de gases", *Memorias EMFE*, México (1993).
13. R.M. Velasco and L.S. García-Colín, *J. Non Equilib. Thermodyn.* **20** (1995) 1.
14. A. Rangel-Huerta and R.M. Velasco, *J. Non Equilib. Thermodyn.* **21** (1996) 41.
15. A. Rangel-Huerta and R.M. Velasco, *J. Non Equilib. Thermodyn.* **21** (1996) 321.
16. A. Rangel-Huerta, Ph.D. Thesis, Depto. de Física CBI, UAM-Iztapalapa (1996).
17. G.M. Kremer and E. Rosa Jr., *J. Chem. Phys.* **89** (1988) 3240.
18. Wilson Marques Jr., *Braz. J. Phys.* **24** (1994) 685.
19. B.Ch. Eu and A.G. Mazon, *Phys. Rev. E* **56** (1997) 2981.
20. D. Bertolini and A. Tani, *Phys. Rev. E* **56** (1997) 4135.
21. D.C. Rapaport, *Trans. Theo. & Stat. Phys.* **23** (1994) 235.
22. H. Gould, L. Spornick, and J. Tobochnik, *Thermal and Statistical Physics Simulations*, first edition, (John Wiley & Sons, Inc., 1995).
23. D.C. Rapaport, *The art of the Molecular Dynamic simulations*, (Cambridge University Press, 1997).