Fizica fluidelor
Cursul 13

Victor E. Ambruș

Universitatea de Vest din Timișoara

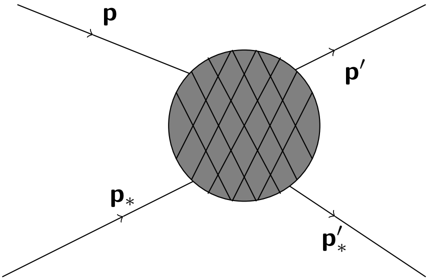
Capitolul VII. Fluidele la scală mezoscopică

- **VII.1. Ecuația Boltzmann.**
- **VII.2. Teorema H și distribuția Maxwell-Boltzmann.**
- VII.3. Ecuații de transport.
- VII.4. Coeficienți de transport.

VII.1. Ecuația Boltzmann.
VII.1.1. Limitele de aplicabilitate ale ec. Navier-Stokes.

- Ecuațiile Navier-Stokes se aplică unei game variate de probleme uzuale, de la curgeri laminare la curgeri turbulente.
- În cazul fluidelor nenewtoniene (creme, geluri), ec. Navier-Stokes se pot extinde permițând coeficienților de transport (μ, μ_v, λ) să depindă de starea cinematică a fluidului (de exemplu, de rata de forfecare).
- Ec. Navier-Stokes își pierd aplicabilitatea atunci când presupunerile din spatele acestora nu mai sunt rezonabile:
  - Natura corpusculară a constituenților fluidului devine importantă, invalidând presupunerea continuumului. Formal, drumul liber mijlociu $\lambda_{\rm mfp}$ devine comparabil cu scala L pe care variază proprietățile fluidului, ${\rm Kn} = \lambda_{\rm mfp}/L \gtrsim 1$.
  - Câmpurile disipative τ_{ij}, q_i devin comparabile cu cele nedisipative: $|\tau_{ij}|/P \gtrsim 1$, $q_i/E \gtrsim 1$.

VII.1.2. Ecuația Boltzmann



- În general, sistemele mezoscopice conțin un număr foarte mare de particule ($N_A \simeq 6,02 \times 10^{23}\,\mathrm{mol}^{-1}$).
- Pentru a gestiona aceste grade de libertate, se poate defini funcția de distribuție uniparticulă $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$, a cărei evoluție este guvernată de ec. Boltzmann:

$$\partial_t f + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = J[f],$$

unde termenul de coliziune $J[f] = \Gamma^+ - \Gamma^-$ reprezintă diferența dintre particulele care, în urma coliziunilor, intră (Γ^+) sau ies (Γ^-) de pe linia de curent.

VII.1.3. Coliziuni

- În formularea ecuației care-i poartă numele, Boltzmann a făcut următoarele presupuneri:

1. Doar coliziunile binare sunt luate în considerare;
2. Coliziunile au loc punctual;
3. Coliziunile sunt instantanee;
4. Particulele care se ciocnesc sunt complet necorelate (*Stosszahlansatz*): $f_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, t) = f(\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1, t) f(\mathbf{x}_2, \mathbf{p}_2, t)$.

- În cele ce urmează, vom considera doar coliziuni perfect elastice.

VII.1.3. Coliziuni

- Particulele care ies de pe linia de curent reprezintă particule care au inițial impulsul $\mathbf{p}$ și care se ciocnesc cu o particulă de impuls $\mathbf{p}_*$:

$$\Gamma^- = \int d\mathbf{p}_* d\mathbf{p}' d\mathbf{p}'_* \delta_{\mathbf{p}} \delta_E \frac{|\mathbf{p} - \mathbf{p}_*|}{m} \frac{d\sigma}{d\Omega} f\, f_*, \tag{1}$$

unde $\mathbf{p}'$ și $\mathbf{p}'_*$ reprezintă impulsurile particulelor după ciocnire, $f\, f_* |\mathbf{p} - \mathbf{p}_*|/m$ reprezintă fluxul de particule care interacționează, $d\sigma/d\Omega$ reprezintă secțiunea diferențială eficace a procesului, iar $\delta_{\mathbf{p}}$ și δ_E asigură conservarea impulsului și energiei totale, după cum urmează:

$$\delta_{\mathbf{p}} \equiv \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_* - \mathbf{p}' - \mathbf{p}'_*), \qquad \delta_E = \delta(E + E_* - E' - E'_*). \tag{2}$$

- Particulele care intră pe linia de curent sunt particulele cu impuls $\mathbf{p}'$ oarecare, care în urma unei coliziuni cu o particulă de impuls $\mathbf{p}'_*$ vor avea impulsul $\mathbf{p}$:

$$\Gamma^+ = \int d\mathbf{p}_* d\mathbf{p}' d\mathbf{p}'_* \delta_{\mathbf{p}} \delta_E \frac{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}'_*|}{m} \frac{d\sigma}{d\Omega} f' f'_*. \tag{3}$$

VII.2. Teorema H a lui Boltzmann
VII.2.1. Funcția H

- Fie funcția H definită după cum urmează:

$$H = \int d\mathbf{x} d\mathbf{p}\, f\, \ln f. \tag{4}$$

- Folosind ec. (4) se poate calcula derivata temporală a lui H:

$$\begin{aligned}\frac{dH}{dt} &= \int d\mathbf{x} d\mathbf{p}\, J[f](1 + \ln\, f) \\ &= \frac{1}{4} \int d\mathbf{x} d\mathbf{p}\, d\mathbf{p}_*\, d\mathbf{p}'\, d\mathbf{p}'_*\, \delta_{\mathbf{p}} \delta_E \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}'_*|}{m} \\ &\quad \times (f' f'_* - f\, f_*)(\ln\, f + \ln\, f_* - \ln\, f' - \ln\, f'_*).\end{aligned} \tag{5}$$

- Termenul de pe ultima linie poate fi pus sub forma:

$$(f' f'_* - f\, f_*)(\ln\, f + \ln\, f_* - \ln\, f' - \ln\, f'_*) = f' f'_* \left(1 - \frac{f\, f_*}{f' f'_*}\right) \ln\, \frac{f\, f_*}{f' f'_*}.$$

- Având în vedere că $(1 - x) \ln x \leq 0$ și că $d\sigma / d\Omega \geq 0$, rezultă:

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \tag{6}$$

VII.2.2. Relația cu legea a doua a termodinamicii

- *Teorema H a lui Boltzmann*: într-un sistem izolat, funcția H nu poate să crească.
- Caracterul monoton descrescător al funcției H reflectă caracterul ireversibil al ecuației Boltzmann.
- Cu ajutorul teoremei H, se poate defini *entropia specifică* $\eta = -RH$.
- Legătura dintre H și η reprezintă o dovadă a principiului al doilea al termodinamicii.

VII.2.3. Invarianți de coliziune

- Entropia își încetează creșterea când $dH/dt = 0$ și sistemul se găsește în echilibru termodinamic.
- Pentru a studia proprietățile fluidului în echilibru termodinamic, e util ca dH/dt să fie exprimat după cum urmează:

$$\frac{dH}{dt} = \int d\mathbf{x} J[f, 1 + \ln f], \qquad J[f, \psi] = \int d\mathbf{p}\, J[f]\psi. \tag{7}$$

- Mărimile ψ pentru care $J[f, \psi] = 0$ se numesc *invarianți de coliziune*.
- Datorită legilor de conservare a impulsului și a energiei, avem:

$$J[f, 1] = 0, \qquad J[f, \mathbf{p}] = 0, \qquad J[f, \mathbf{p}^2/2m] = 0. \tag{8}$$

- Condiția ca $dH/dt = 0$ implică $J[f^{(\rm eq)}, 1 + \ln f^{(\rm eq)}] = 0$, de unde rezultă că $1 + \ln f^{(\rm eq)}$ e o combinație liniară a invarianților de coliziune (8):

$$f^{(\rm eq)} = N \exp\left[-\alpha(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)^2\right]. \tag{9}$$

- Semnificația fizică a parametrilor N, α și $\mathbf{p}_0$ poate fi elucidată știind că $f^{(\mathrm{eq})}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ reprezintă o densitate de particule.
- **Densitatea totală de particule** $n(\mathbf{x}, t)$ în punctul $\mathbf{x}$, la momentul t, se poate afla integrând $f^{(\mathrm{eq})}$ în raport cu $\mathbf{p}$:[1]

$$n(x) = \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})} = N \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2}. \tag{10}$$

- **Viteza macroscopică** $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ se poate calcula mediind impulsul $\mathbf{p}$ în raport cu f:

$$\rho(x)\mathbf{u}(x) = \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})}\, \mathbf{p} = n\mathbf{p}_0, \tag{11}$$

  de unde rezultă că $\mathbf{p}_0 = m\mathbf{u}$.
- **Temperatura** $T(\mathbf{x}, t)$ este legată de mișcarea particulelor în raport cu mediul fluid (în sistemul de referință în care acesta este în repaus). Drept urmare, T este corelată cu media cantității $(\mathbf{p} - m\mathbf{u})^2/2m$, după cum urmează:

$$\frac{3}{2} n K_B T = \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})}\, \frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2m} = \frac{3N}{4m\alpha} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2}, \tag{12}$$

  unde $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{p} - m\mathbf{u}$ este impulsul propriu.

[1] Astfel de integrale sunt numite *integrale Gauss*.

VII.2.4. Distribuția Maxwell-Boltzmann

- Din ecuațiile anterioare rezultă că:

$$\alpha = \frac{1}{2mK_B T}, \tag{13a}$$

$$N = \frac{n}{(2\pi mK_B T)^{3/2}}, \tag{13b}$$

$$\mathbf{p}_0 = m\mathbf{u}. \tag{13c}$$

- Înlocuind ec. (13) în ec. (9) obținem forma finală a **distribuției Maxwell-Boltzmann**:

$$f^{(\mathrm{eq})}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \frac{n}{(2\pi mK_B T)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{u})^2}{2mK_B T}\right]. \tag{14}$$

Probleme

1. Arătați că
$$(1-x)\ln x \leq 0.$$
2. Arătați că $\psi \in \{1, \mathbf{p}, \mathbf{p}^2/2m\}$ sunt invarianți de coliziune, în sensul că $J[f,\psi] = \int d\mathbf{p}\, J[f]\psi = 0$, ținând cont de definiția lui J:
$$J[f] = \int d\mathbf{p}_* d\mathbf{p}' d\mathbf{p}'_* \delta_{\mathbf{p}} \delta_E \frac{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}'_*|}{m} \frac{d\sigma}{d\Omega}(f' f'_* - f f_*).$$
3. Să considerăm o stare staționară descrisă de $f = f^{(\mathrm{eq})}$. Arătați că în acest caz,
$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{x}, \qquad T = T_0, \qquad n = n_0 \exp\left[\boldsymbol{\omega}^2 \mathbf{x}'^2 - (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{x}')^2\right],$$
unde n_0, T_0, $\mathbf{u}_0$ și $\boldsymbol{\omega}$ sunt mărimi constante iar $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + (\mathbf{u}_0 \times \boldsymbol{\omega})/\omega^2$.

Probleme

4. Momentele absolute și centrate ale funcției de distribuție la echilibru $f^{(\mathrm{eq})}$ se definesc după cum urmează:

$$M^{\mathrm{eq},s}_{i_1,i_2,\ldots i_s} = \int d\mathbf{p}\, f\, p_{i_1} p_{i_2} \cdots p_{i_s}\,, \quad \mu^{\mathrm{eq},s}_{i_1,i_2,\ldots i_s} = \int d\mathbf{p}\, f\, \xi_{i_1} \xi_{i_2} \cdots \xi_{i_s}\,.$$

Arătați că:

$$\text{(a)}\; \mu^{\mathrm{eq},(0)} = \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})} = n,$$

$$\text{(b)}\; \mu^{\mathrm{eq},(1)}_i = \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})} \xi_i = 0,$$

$$\text{(c)}\; \mu^{\mathrm{eq},(2)}_{ij} = \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})} \xi_i \xi_j = \rho K_B T \delta_{ij},$$

$$\text{(d)}\; M^{\mathrm{eq},(2)}_{ij} = \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})} p_i p_j = \rho K_B T \delta_{ij} + m\rho u_i u_j,$$

$$\text{(e)}\; \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})} \frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2m} = \frac{3}{2} n K_B T,$$

$$\text{(e)}\; \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{3}{2} n K_B T + \frac{1}{2}\rho \mathbf{u}^2.$$

5. Arătați că $T^{\mathrm{eq}}_{ij} = \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})} \xi_i \xi_j / m = P\delta_{ij}$.

Probleme

6. Arătați că:

(a) $\mu_{ijk}^{\mathrm{eq},(3)} = 0,$

(b) $M_{ijk}^{\mathrm{eq},(3)} = m\rho K_B T(u_i\delta_{jk} + u_j\delta_{ik} + u_k\delta_{ij}) + m^2\rho u_i u_j u_k,$

(c) $\int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{5}{2}nK_B T\mathbf{u} + \frac{1}{2}\rho\mathbf{u}^2\mathbf{u},$

(d) $\mu_{ijk\ell}^{\mathrm{eq},(4)} = m\rho(K_B T)^2(\delta_{ij}\delta_{k\ell} + \delta_{ik}\delta_{j\ell} + \delta_{i\ell}\delta_{jk}),$

(e) $$M_{ijk\ell}^{\mathrm{eq},(4)} = m\rho(K_B T)^2(\underbrace{\delta_{ij}\delta_{k\ell} + \dots}_{\text{3 termeni}}) + m^2\rho K_B T(\underbrace{u_i u_j\delta_{k\ell} + \dots}_{\text{6 termeni}}) + m^3\rho u_i u_j u_k u_\ell.$$

(f) $$\int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\frac{p_i}{m}\frac{p_j}{m} = \frac{5n}{2m}(K_B T)^2\delta_{ij} + \frac{1}{2}nK_B T(7u_i u_j + \delta_{ij}\mathbf{u}^2) + \frac{1}{2}\rho\mathbf{u}^2 u_i u_j.$$

7. Arătați că $q_i^{\mathrm{eq}} = \int d\mathbf{p}\, f^{(\mathrm{eq})}\boldsymbol{\xi}^2\xi_i/2m^2 = 0.$