Fenomeni di Trasporto

- Choudhuri, *The Physics of Fluids and Plasmas: an introduction for astrophysicist*, Sect. 3.4, page 40

February 8, 2016

Abbiamo mostrato in precedenza che, nel caso di una funzione di distribuzione Maxwelliana, i momenti della funzione di distribuzione portino alle Equazioni di Eulero:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) &= 0 \\
\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} + \frac{1}{\rho}\nabla p &= \boldsymbol{a} \\
\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \boldsymbol{u}) &= -p\nabla \cdot \boldsymbol{u}
\end{aligned} \tag{1}$$

Questo sistema di 5 equazioni contiene altrettante variabili indipendenti: ρ, $\boldsymbol{u}$ e p assumendo un'equazione di stato $\rho e = \rho e(\rho, p)$ e che la forza esterna sia data e solo funzione delle coordinate. Il sistema è quindi chiuso e utilizzabile per ricavare la dinamica in termini di grandezze macroscopiche.

La teoria cinetica mostra quindi come le equazioni di Eulero possano descrivere la dinamica di una classe ristretta di fluidi (ideali) la cui funzione di distribuzione locale è di tipo Maxwelliano. Un discorso analogo è stato fatto anche per le equazioni magnetoidrodinamice ideali.

La distribuzione di Maxwell-Boltzmann

$$f^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}, t) = n(\boldsymbol{x}, t)\left(\frac{m}{2\pi k_B T(\boldsymbol{x}, t)}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t))^2}{2k_B T(\boldsymbol{x}, t)}\right] \tag{2}$$

descrive la velocità delle particelle in un gas ideale dove le particelle si muovono liberamente all'interno di un contenitore stazionario senza interagire tra loro ad eccezione di collisioni molto brevi in cui si scambiano energia e momento tra loro o con l'ambiente. In questo contesto le particelle si riferiscono ad atomi o molecole gassoses e il sistema di particelle si presume abbia raggiunto l'equilibrio termodinamico. Definendo la velocità termica come la deviazione rispetto alla media $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{v} - \boldsymbol{u}$ e ponendo $v_{th} = \sqrt{2k_B T/m}$ possiamo riscrivere l'equazione (2) come

$$f^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}, t) = \frac{n(\boldsymbol{x}, t)}{(v_{th}\sqrt{\pi})^3} \exp\left(-\frac{w^2}{v_{th}^2}\right)$$

La scelta di una distribuzione Maxwelliana, tuttavia, non è stata rigorosamente giustificata e trascura importanti effetti legati al trasporto di energia e momento da una regione all'altra del fluido. Infatti, il flusso di calore, definito come

$$\boldsymbol{q} = n\left\langle \boldsymbol{w}\left(\frac{1}{2}mw^2\right)\right\rangle \qquad \left(\text{dove} \quad \langle y \rangle = \frac{1}{n}\int_{-\infty}^{+\infty} y\, d^3v\right)$$

descrive il moto peculiare delle particelle, è identicamente nullo per una distribuzione di tipo Maxwelliano (2) dal momento che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w_k w^2 \exp\left[-\alpha \boldsymbol{w}^2\right] d^3w = 0 \qquad (\boldsymbol{w} = \boldsymbol{v} - \boldsymbol{u} \quad \Longrightarrow \quad d^3w = d^3v)$$

Questo implica che non ci sia trasporto di energia da una parte all'altra del sistema nella forma di flusso di calore associata all'energia cinetica interna delle molecole.

Analogamente, il tensore P definito come

$$\mathsf{P}_{ij} = nm \langle w_i w_k \rangle = P\delta_{ij} + \Pi_{ij} \tag{3}$$

risulta nullo tranne che per i termini sulla diagonale $P = nm \left\langle w^2 \right\rangle$ cosicchè

$$\Pi_{ij} = 0 \tag{4}$$

Questo implica l'assenza di viscosità che è responsabile per il trasporto e lo scambio di quantità di moto tra due strati di fluido. In altre parole, le equazioni ideali descrivono un fluido in cui sono assenti i processi di trasporto. Tali processi possono, in effetti, diventare importanti quando ci sono forti gradienti di temperatura o velocità e questo tipo di situazione richiede una correzione alla funzione di distribuzione.

Per comprendere meglio di cosa si tratta, si consideri un punto P all'interno di un fluido con un forte gradiente di temperatura e tale per cui la regione a destra di tale punto sia molto più calda della regione a sinistra. All'instaurarsi di un flusso tra le due regioni, si avrà che le molecole che passano per P dalla regione calda a quella fredda saranno descritte da una funzione di distribuzione con temperatura maggiore mentre l'opposto sarà vero per il flusso di particelle che migrano dalla regione fredda a quella calda. Il risultato di questo processo in prossimità del punto P è quindi una distribuzione non più Maxwelliana.

1 Approssimazione BGK

Dovendo considerare deviazioni dalla funzione Maxwelliana adottiamo un approccio perturbativo scrivendo pertanto

$$f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t) = f^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t) + g(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t) \tag{5}$$

dove f_0 è la distribuzione Maxwelliana data dall'Eq. (2) mentre g rappresenta un termine correttivo.

Nell'equazione di Boltzmann si può approssimare l'integrale collisionale con

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla + \boldsymbol{a} \cdot \nabla_v\right) f = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau} \tag{6}$$

dove $\tau = 1/(n\sigma_{tot}\bar{v}_{rel})$ è il tempo di collisione, σ_{tot} è la sezione d'urto totale per collisioni e $\bar{v}_{rel}$ è la velocità relativa media tra le particelle (Choudhuri, sezione 3.4). Se una distribuzione arbitraria f si rilassa alla distribuzione Maxwelliana $f^{(0)}$ in un tempo τ, il tasso a cui questo processo avviene è dato dal membro di destra dell'equazione (6)[1].

Presenteremo ora un trattamento dei fenomeni di trasporto basato sull'approssimazione data dall'equazione BGK (6) dai nomi di Bhatnagar, Gross e Krook (1954) che ne hanno reso popolare l'utilizzo. Tale approssimazione permette di mettere in luce gli aspetti fondamentali di molti processi fisici senza grosse difficoltà come invece sarebbe richiesto dalla trattazione più completa in cui si tiene conto, cioè, dell'integrale collisionale.

[1]Si consideri infatti l'equazione differenziale $df/dt = -(f - f^{(0)})/\tau$. La soluzione di questa equatione è infatti $f(t) - f^{(0)} = (f(0) - f^{(0)})e^{-t/\tau}$ e dimostra che su tempi scala dell'ordine di τ la funzione tende a diventare sempre più simile alla $f^{(0)}$.

Espansione di Chapman-Enskog. Cominciamo con il fare una stima della deviazione da una distribuzione puramente Maxwelliana. Se il sistema ha un forte gradiente, allora il termine $\boldsymbol{v} \cdot \nabla$ a membro di sinistra è responsabile dello scostamento da una distribuzione Maxwelliana. Una stima dimensionale fornisce

$$\frac{[v]f^{(0)}}{[L]} \approx \frac{|g|}{\tau} \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{|g|}{f^{(0)}} \approx \frac{\lambda}{[L]}$$

dove $[v]$ è la tipica velocità molecolare, $[L]$ è la distanza tipica su cui le proprietà del sistema cambiano in modo apprezzabile mentre $\lambda = [v]\tau$ rappresenta il libero cammino medio. Pertanto, lo scostamento da una distribuzione puramente Maxwelliana sarà piccolo se il libero cammino medio è piccolo rispetto alla tipica lunghezza scala. Questo suggerisce di espandere la funzione di distribuzione in serie introducendo il parametro

$$\alpha = \frac{\lambda}{L} \tag{7}$$

ottenendo così l'espansione di *Chapman-Enskog*

$$f = f^{(0)} + \alpha f^{(1)} + \alpha^2 f^{(2)} + ... \tag{8}$$

dove $f^{(k)}$ sono dello stesso ordine. Sostituendo (8) dentro la (6) si possono valutare i termini in successione. A tal scopo definiamo

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t) = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla + \boldsymbol{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{v}} \tag{9}$$

l'operatore a membro di sinistra dell'Eq. (6). Si avrà:

$$\mathcal{L}(f^{(0)} + \alpha f^{(1)} + \alpha^2 f^{(2)} + ...) = -\frac{\alpha f^{(1)} + \alpha^2 f^{(2)} + \alpha^3 f^{(3)}}{\tau}$$

Notando ora che $\tau = \alpha[L]/[v]$ rappresenta anche il rapporto dei tempi scala, potremo scrivere

$$\frac{[L]}{[v]}\mathcal{L}(f^{(0)} + \alpha f^{(1)} + \alpha^2 f^{(2)} + ...) = f^{(1)} + \alpha f^{(2)} + \alpha^2 f^{(3)}$$

dove, detto $[t] = [L]/[v]$ l'unità di tempo scala, avremo che

$$[t]\mathcal{L} = \frac{\partial}{\partial t/[t]} + \frac{\boldsymbol{v}}{[v]} \cdot \nabla_{x/[L]} + \frac{a}{[v]^2/[L]}\nabla_{\boldsymbol{v}/[v]} = \frac{\partial}{\partial \bar{t}} + \bar{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla_{\bar{x}} + \bar{\boldsymbol{a}} \cdot \nabla_{\bar{\boldsymbol{v}}}$$

rappresenta la forma adimensionale dell'operatore di evoluzione.

In questa sede ci limitiamo a considerare solo il termine del prim'ordine. Per calcolare la correzione del prim'ordine approssimamo f con $f^{(0)}$ nella (6) ottenendo cosi

$$f^{(1)} = -[t]\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_i\frac{\partial}{\partial x_i} + a_i\frac{\partial}{\partial v_i}\right)f^{(0)} \tag{10}$$

Chiaramente $f^{(0)}$ dipende da t e x_i attraverso la definizione di $n(\boldsymbol{x}, t)$, $T(\boldsymbol{x}, t)$ e $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)$ cosicchè

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial t}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial n} + \frac{\partial T}{\partial t}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} + \frac{\partial u_i}{\partial t}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial u_i}\,. \tag{11}$$

Un'espressione analoga vale per $\partial f^{(0)}/\partial x_i$. Sostituendo l'equazione (2) nella (10) si trova, dopo un lungo calcolo algebrico,

$$g = \alpha f^{(1)} = -\tau \left[\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial x_i} w_i \left(\frac{m}{2k_B T} w^2 - \frac{5}{2} \right) + \frac{m}{k_B T} \Lambda_{ij} \left(w_i w_j - \frac{\delta_{ij}}{3} w^2 \right) \right] f^{(0)} \tag{12}$$

dove

$$\Lambda_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \tag{13}$$

I dettagli della derivazione si possono trovare in Huang, *Statistical Mechanics* (1987, §5.5).

Abbiamo così trovato l'espressione, al prim'ordine, per la deviazione dalla distribuzione di Maxwell. Dal momento che tale espressione risulta delle non-uniformità del sistema, non deve meravigliare che l'espressione per g contenga il gradiente della temperatura e delle velocità. La dipendenza lineare da τ è altresi facile da comprendere. Un grande valore di τ implica che le particelle possono spostarsi per lunghi tragitti senza collisioni e la funzione di distribuzione devierà maggiormente da quella Maxwelliana. D'altro canto, un valore più piccolo di τ implica che le collisioni sono più efficienti e frequenti accelerando in tal modo il processo di rilassamento verso una distribuzione Maxwelliana (e quindi g sarà più piccolo).

Flusso di Calore. Con questo risultato andiamo a calcolare il flusso di calore:

$$\boldsymbol{q} = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \boldsymbol{w} w^2 f \, d^3 v = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \boldsymbol{w} w^2 g \, d^3 v = -\kappa \nabla T \tag{14}$$

dove solo termine proporzionale a $\partial T/\partial x$ contribuisce all'integrale mentre il coefficiente

$$\kappa = \frac{\tau m}{6T} \int \left[w^4 \left(\frac{m}{2k_B T} w^2 - \frac{5}{2} \right) \right] f^{(0)} d^3 v = \frac{5}{2} \tau n \frac{k_B^2 T}{m} \tag{15}$$

viene chiamato coefficiente di *conduttività termica*. Il vettore $\boldsymbol{q}$ rappresenta pertanto un flusso di calore e dimostra come il trasporto di energia in presenza di un gradiente di temperatura è determinato anche dal solo moto termico delle particelle, ed esiste anche in assenza di flusso di particelle. Infatti, le particelle che passano dalla regione con temperatura più alta a quella con temperatura più bassa posseggono un'energia maggiore rispetto a quella delle particelle che vanno nel verso opposto; pertanto, anche se i flussi di particelle nei due versi sono uguali, vi è comunque un flusso di energia netto non compensato.

Tensore di Pressione. In modo analogo vediamo che il tensore P_{ij} nella (3) si potrà ora calcolare come

$$\Pi_{ij} = m \int w_i w_j g \, d^3 v = -\frac{\tau m^2}{k_B T} \Lambda_{kl} \int w_i w_j \left(w_k w_l - \frac{1}{3} \delta_{kl} w^2 \right) f^{(0)} \, d^3 w \tag{16}$$

L'espressione precedente mostra come P_{ij} sia un tensore simmetrico e dipenda linearmente da Λ. Si dimostra inoltre che Π ha traccia nulla ($\sum_i \Pi_{ii} = 0$). Prendendo infatti il singolo elemento che giace sulla diagonale otteniamo

$$\Pi_{ii} = C \Lambda_{kl} \int w_i^2 \left(w_k w_l - \frac{\delta_{kl}}{3} w^2 \right) f^{(0)} d^3 w = C \sum_k \Lambda_{kk} \int w_i^2 \left(w_k^2 - \frac{1}{3} w^2 \right) f^{(0)} d^3 w$$

dal momento che le componenti con $k \neq l$ danno contributo nullo essendo funzioni dispari. Sommando su i si ha

$$\mathrm{Tr}(\Pi) = \sum_i \Pi_{ii} = C \sum_k \Lambda_{kk} \int w^2 \left(w_k^2 - \frac{1}{3} w^2 \right) f^{(0)} d^3 w \,. \tag{17}$$

Per dimostrare che ciascun integrale sotto sommatoria su k si annulla, ricordiamo che[2]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w_k^2 e^{-w^2} d^3 w = \frac{1}{2} \pi^{3/2} \,, \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} w_k^4 e^{-w^2} d^3 w = \frac{3}{4} \pi^{3/2}$$

e che l'integrazione è fattorizzabile nel prodotto di tre integrali, ottenendo così

$$\int w_i^2 w_k^2 e^{-w^2} d^3 w = \pi^{3/2} \frac{1}{4} \quad (i \neq k) \qquad \int w_i^4 e^{-w^2} d^3 w = \pi^{3/2} \frac{3}{4} \,.$$

Pertanto, per ciascun termine della sommatoria dell'Eq. (17), avremo che $w_i^2 w_k^2$ contribuisce per un fattore $1/4$ mentre w_i^4 contribuisce per un fattore $3/4$:

$$\int w^2 \left(w_k^2 - \frac{1}{3} w^2 \right) e^{-w^2} d^3 w = (\pi)^{3/2} \left[\frac{3}{4} + \frac{2}{4} - \frac{1}{3} \left(3\frac{3}{4} + 6\frac{1}{4} \right) \right] = 0$$

Quindi $\mathrm{Tr}(\Pi) = 0$.

Inoltre, dal momento che Π dipende linearmente da Λ la cui traccia è $\Lambda_{ii} = \nabla \cdot \boldsymbol{u}$ possiamo assumere per Π la seguente forma:

$$\Pi_{ij} = -2\mu \left(\Lambda_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \boldsymbol{u} \right) \tag{18}$$

dove per ottenere il coefficiente μ possiamo valutare una delle componenti di Π_{ij} dalla (16) ottenendo per $i = 1$, $j = 2$:

$$\Pi_{12} = \frac{\tau m^2}{k_B T} \Lambda_{kl} \int w_1 w_2 \left(w_k w_l - \frac{1}{3} \delta_{kl} w^2 \right) f^{(0)} \, d^3 v = -2 \frac{\tau m^2}{k_B T} \Lambda_{12} \int w_1^2 w_2^2 f^{(0)} \, d^3 w \tag{19}$$

dal momento che la funzione integranda dà contributo non nullo soltanto quando k e l sono uguali a 1 e 2 (o 2 e 1). Confrontando questa espressione con la (18) concludiamo che

$$\mu = \frac{\tau m^2}{k_B T} \int w_1^2 w_2^2 f^{(0)} \, d^3 w = \tau n k_B T \tag{20}$$

Vediamo pertanto che gli elementi non diagonali di Π_{ij} non sono più nulli e che tali elementi sono associati al trasporto di quantità di moto da uno strato ad alta velocità verso uno più lento. Il coefficiente μ viene chiamato coefficiente di viscosità e quantifica la resistenza dei fluidi allo scorrimento. Tale resistenza si oppone al moto relativo tra due strati di fluido che scorrono a velocità differente ed è proporzionale al gradiente di velocità. Si tratta in altri termini del coefficiente di scambio di quantità di moto che dipende dal tipo di fluido e dalla temperatura.

Aggiunto all'equazioni del moto permette di ottenere le equazioni di Navier-Stokes per un fluido viscoso:

$$\rho \frac{du_i}{dt} = \rho a_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \boldsymbol{u} \right) \right] \tag{21}$$

[2] Si utilizzi

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} \exp(-x^2/a^2) dx = 2\sqrt{\pi} \frac{(2n)!}{n!} \left(\frac{a}{2} \right)^{2n+1}$$

Se μ è costante la precedente espressione si può riscrivere come

$$\rho\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = \rho\boldsymbol{a} - \nabla p + \mu\left[\nabla^2\boldsymbol{u} + \frac{1}{2}\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\right] \tag{22}$$

Si noti che il termine $\nabla\cdot\boldsymbol{u}$ è importante solo nel caso di fluidi comprimibili. Nel caso di fluidi incompressibili o debolmente comprimibili può essere trascurato ottenendo così l'espressione più semplice

$$\frac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u} = a - \frac{\nabla p}{\rho} + \nu\nabla^2\boldsymbol{u} \tag{23}$$

dove $\nu = \mu/\rho$ viene chiamato *coefficiente di viscosità cinematica.*

Per riassumere, la funzione di distribuzione si avvicina a quella di Maxwell se il libero cammino medio è piccolo in confronto alla lunghezza scala del sistema.