
BOLLETTINO

UNIONE MATEMATICA ITALIANA

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

MARZIA BISI

Equazioni cinetiche per interazioni non conservative

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. 9-A—La Matematica nella Società e nella Cultura (2006), n.2 (Fascicolo dedicato alle tesi di dottorato), p. 203–206.

Unione Matematica Italiana

http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2006_8_9A_2_203_0

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Equazioni cinetiche per interazioni non conservative

MARZIA BISI

La teoria cinetica è una branca della fisica-matematica che descrive la dinamica di gas rarefatti basandosi sullo studio della funzione di distribuzione f delle molecole, i cui momenti rispetto alla variabile cinetica forniscono tutti i campi macroscopici significativi nelle applicazioni, quali la densità, la velocità macroscopica, la temperatura, la pressione e il flusso di calore. L'evoluzione di tale funzione di distribuzione è governata dall'equazione di Boltzmann [4]:

$$(1) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} g \rho(g, \chi) [f(\mathbf{v}')f(\mathbf{w}') - f(\mathbf{v})f(\mathbf{w})] d\mathbf{w} d\hat{\Omega}',$$

dove (\mathbf{v}, \mathbf{w}) denotano le velocità pre-collisionali, $(\mathbf{v}', \mathbf{w}')$ quelle post-collisionali, il vettore $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{w} = g \hat{\Omega}$ è la velocità relativa pre-collisionale, e $\rho(g, \chi)$ viene chiamata sezione d'urto differenziale e dipende dai parametri d'impatto della collisione. Tale equazione cinetica è di tipo integro-differenziale non lineare, assai complessa e delicata da risolvere, tuttavia permette di estrarre importanti informazioni sul comportamento dei gas. Si dimostra che gli equilibri collisionali corrispondono a distribuzioni di tipo gaussiano dette Maxwelliane, e lo studio di un opportuno funzionale H di entropia indica che, a partire da una qualsiasi configurazione iniziale, il gas evolve in modo irreversibile verso uno stato di equilibrio. Inoltre, risultato assai rilevante per le applicazioni, opportuni sviluppi asintotici quali quello di Chapman-Enskog o, più recente, di Grad, permettono di derivare equazioni macroscopiche che descrivono l'evoluzione delle quantità fluidodinamiche di interesse fisico, accurate a diversi livelli di approssimazione (equazioni di Eulero, di Navier-Stokes, di Burnett ...). Nella letteratura scientifica, questi argomenti sono stati ampiamente trattati per gas le cui particelle interagiscono soltanto con collisioni "elastiche", che conservano massa, velocità media ed energia cinetica del sistema. Soltanto recentemente l'approccio cinetico è stato esteso a interazioni intermolecolari più complesse, che comportano anche una variazione dell'energia cinetica totale. Nella tesi sono state prese in considerazione due diverse tipologie di interazioni non conservative. Innanzi tutto studiamo miscele di gas che, oltre a tutte le possibili collisioni elastiche, presentano anche una reazione chimica bimolecolare reversibile: la conservazione dell'energia totale (cinetica più chimica) implica che durante una reazione endotermica, in cui l'energia chimica post-collisionale risulta maggiore di quella pre-collisionale, vi è una diminuzione di energia cinetica, mentre durante la reazione inversa (esotermica) si verifica il fenomeno opposto. Poi, la seconda parte della tesi è dedicata alla teoria cinetica per mezzi "granulari", costituiti da particelle assi-

milabili a sfere rigide che interagiscono tra loro con collisioni istantanee inelastiche che comportano una dissipazione di energia cinetica, la quale viene trasferita ad altri gradi di libertà che non influiscono in alcun modo sul sistema considerato.

1. – Miscela di gas con reazioni chimiche.

Consideriamo una miscela di 4 specie di gas A^s , $s = 1, \dots, 4$, le cui particelle possono dare luogo, oltre che a urti elastici, alla seguente reazione chimica bimolecolare reversibile:



Il modello cinetico generalmente usato per descrivere questo sistema è dato dall'equazione di Boltzmann classica con l'aggiunta di un "termine di collisione chimico". Si è proceduto alla chiusura delle equazioni macroscopiche dei momenti usando le funzioni di distribuzione proposte da Grad, costituite da espansioni in polinomi di Hermite attorno alla distribuzione Maxwelliana di equilibrio, opportunamente troncate al terzo ordine in un regime di alta collisionalità:

$$(3) \quad f_G^s(\mathbf{v}) = f_M^s(\mathbf{v}) \left[1 + \frac{m^s}{2n^s(KT^s)^2} p_{ij}^s c_i^s c_j^s + \frac{2m^s}{5n^s(KT^s)^2} q_i^s c_i^s \left(\frac{m^s}{2KT^s} (c^s)^2 - \frac{5}{2} \right) \right]$$

dove f_M^s indica la distribuzione Maxwelliana, e \mathbf{c}^s la velocità peculiare della specie s . Queste espansioni permettono di trovare un sistema chiuso di equazioni del trasporto approssimate per la densità n^s , la velocità media \mathbf{u}^s , la temperatura T^s , il tensore deviatore di stress \mathbf{p}^s e il flusso di calore \mathbf{q}^s di ogni specie. Nelle risultanti "equazioni di Grad" (13 per ogni specie) compaiono anche i contributi dovuti alle collisioni tra le molecole, che è possibile esplicitare in forma esatta qualora i potenziali di interazione siano del tipo "molecole Maxwelliane" [1]. Abbiamo mostrato che le equazioni di bilancio così costruite costituiscono un'approssimazione "robusta", in quanto risultano preservate le equazioni di conservazione esatte ed i corretti equilibri collisionali.

È stato possibile poi portare avanti un'analisi asintotica di tale sistema di equazioni, mediante un'espansione di tipo Chapman-Enskog in termini di due "numeri di Knudsen", che rappresentano il rapporto tra il tempo caratteristico delle interazioni meccaniche, o chimiche, e un'unità di tempo macroscopica. In un regime in cui le collisioni elastiche giocano il ruolo dominante, abbiamo analizzato sia il caso in cui la reazione chimica risulta essere dominante rispetto all'operatore di streaming, sia quello in cui i due fenomeni in questione hanno lo stesso tempo caratteristico. Queste due situazioni danno risultati significativamente diversi, soprattutto perché cambia il numero di variabili indipendenti da considerare; comunque in entrambi i casi riusciamo a ottenere equazioni costitutive (con alcuni coefficienti espressi necessariamente solo in forma implicita) che permettono di scrivere un sistema chiuso di equazioni idrodinamiche del tipo Navier-Stokes. In particolare, nel caso di reazione chimica veloce le equazioni fluidodinamiche per le 7 variabili idrodinamiche indi-

pendenti $n^1 + n^3$, $n^1 + n^4$, $n^2 + n^4$ (opportune combinazioni di densità), \mathbf{u} (velocità macroscopica) e $U = \frac{3}{2}nKT + \sum_{s=1}^4 E^s n^s$ (energia interna totale) risultano essere

$$(4) \quad \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(n^s + n^r) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [(n^s + n^r)\mathbf{u}] &= 0 \quad (s, r) = (1, 3), (1, 4), (2, 4), \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} [nK(T^{(0)} + \varepsilon T^{(1)})] &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho u^2 + U \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[\left(\frac{1}{2} \rho u^2 + U + nKT^{(0)} + \varepsilon nKT^{(1)} \right) \mathbf{u} \right] &= 0, \end{aligned}$$

dove ρ è la densità di massa, $T^{(0)}$ è legata alle densità dalla legge dell'azione di massa, mentre la correzione $T^{(1)}$ coinvolge anche le derivate spaziali delle variabili idrodinamiche. Il caso particolare $\varepsilon = 0$ riproduce le equazioni di Eulero.

2. - Mezzi granulari.

I mezzi "granulari" sono costituiti da un grandissimo numero di particelle che interagiscono tra loro con collisioni istantanee le quali, a differenza di quanto avviene in un gas rarefatto, sono parzialmente inelastiche. Tale proprietà viene tenuta in conto introducendo un opportuno coefficiente di restituzione e nelle relazioni tra le velocità molecolari pre- e post-collisionali. Diversi modelli cinetici dissipativi sono stati introdotti nella letteratura scientifica, tra i quali quello più comunemente usato è l'equazione di Boltzmann-Enskog:

$$(5) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = G(n) \sigma^2 \int \int_{B^3 S_+} (\mathbf{g} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \{ \chi f(\mathbf{v}^{**}) f(\mathbf{w}^{**}) - f(\mathbf{v}) f(\mathbf{w}) \} d\mathbf{w} d\hat{\mathbf{n}},$$

dove σ è il diametro dei grani e G , dipendente dalla densità, è la funzione di correlazione tra le particelle.

Lo studio analitico di tale modello presenta molte complicazioni in più rispetto all'equazione di Boltzmann elastica, pertanto informazioni sulla velocità di dissipazione dell'energia ("cooling problem") vengono spesso estratte da modelli cinetici più semplici. Importanti risultati si ottengono ad esempio a partire da "equazioni di frizione", ottenute dal modello (5) nel limite quasi elastico: abbiamo dimostrato che tali equazioni ammettono soluzioni di similarità, date in forma esplicita, la cui importanza nel processo di raffreddamento del mezzo può essere studiata mediante un opportuno funzionale di entropia. Un'altra variante dell'equazione (5) consiste nell'assumere interazioni pseudo-Maxwelliane, che consentono un notevole studio analitico facendo ricorso alla trasformata di Fourier [3]. In particolare, per particelle in un bagno termico (che mantiene la temperatura lontana da zero) abbiamo ricavato stime esplicite della velocità di convergenza verso il corrispondente equilibrio diffusivo, sia in termini di opportune metriche (deboli) di Fourier, sia nella norma forte L^1 .

Partendo invece dalla più complessa, ma fisicamente più realistica, equazione di Boltzmann-Enskog, abbiamo considerato il problema di derivare un sistema chiuso di

equazioni di evoluzione per i momenti macroscopici più significativi. Abbiamo dimostrato, per mezzo di un opportuno funzionale di entropia, che il metodo dei 13 momenti di Grad può essere ragionevolmente applicato anche a mezzi granulari, purché caratterizzati da bassa inelasticità. Sono stati esplicitati [2] tutti i termini di collisione che compaiono nelle equazioni di Grad (spazialmente monodimensionali), nel caso generale in cui il coefficiente di restituzione $e = 1 - 2\beta|\mathbf{g} \cdot \hat{\mathbf{n}}|^\delta$, in cui $\beta \geq 0$ è il parametro di inelasticità e $\delta \geq 0$ dà il grado di dipendenza dalla velocità relativa. Poi, una procedura asintotica di tipo Chapman-Enskog ha permesso di ottenere equazioni idrodinamiche di Navier-Stokes per mezzi debolmente inelastici:

$$(6) \quad \begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nu)}{\partial z} &= 0, \\ n \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial(nT)}{\partial z} - \varepsilon \frac{5}{12} \sqrt{\pi} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{T^{\frac{1}{2}}}{G(n)} \frac{\partial u}{\partial z} \right) &= 0, \\ \frac{3}{2} n \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial z} \right) + nT \frac{\partial u}{\partial z} - \varepsilon \frac{5}{12} \sqrt{\pi} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{G(n)} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 - \varepsilon \frac{75}{64} \sqrt{\pi} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{T^{\frac{1}{2}}}{G(n)} \frac{\partial T}{\partial z} \right) &= \\ &= -a \frac{2^\delta}{\sqrt{\pi}} 8 \Gamma \left(\frac{\delta+4}{2} \right) G(n) n^2 T^{\frac{\delta+3}{2}} + \varepsilon a^2 \frac{4^\delta}{\sqrt{\pi}} 8 \Gamma(\delta+2) G(n) n^2 T^{\frac{2\delta+3}{2}}. \end{aligned}$$

Analogamente al caso elastico, nella parte di streaming compaiono termini di ordine ε contenenti le derivate seconde di u e T : tali correzioni sono inversamente proporzionali alla funzione di correlazione, ma non sono affette dall'inelasticità. Nella parte collisionale dell'equazione per la temperatura, notiamo lo stesso contributo $O(1)$ che compare nelle equazioni di Eulero [5], più una correzione di ordine ε che per coefficienti di restituzione non costanti presenta una diversa dipendenza dalla temperatura.

BIBLIOGRAFIA

- [1] BISI M., GROPPi M. e SPIGA G., *Grad's distribution functions in the kinetic equations for a chemical reaction*, Contin. Mech. Thermodyn., **14** (2002), 207-222.
- [2] BISI M., SPIGA G. e TOSCANI G., *Grad's equations and hydrodynamics for weakly inelastic granular flows*, Phys. of Fluids, **16** (2004), 4235-4247.
- [3] BOBYLEV A. V., CARRILLO J. A. e GAMBA I., *On some properties of kinetic and hydrodynamic equations for inelastic interactions*, J. Stat. Phys., **98** (2000), 743-773.
- [4] CERCIGNANI C., *Theory and application of the Boltzmann equation*, Scottish Academic Press, Edinburgh (1975).
- [5] TOSCANI G., *Kinetic and hydrodynamic models of nearly elastic granular flows*, Monatsh. Math., **142** (2004), 179-192.

Dipartimento di Matematica, Università di Parma
e-mail: marzia.bisi@unipr.it

Dottorato in Matematica, Statistica, Scienze Computazionali e Informatica
(sede amministrativa: Milano Università) - Ciclo XVII
Direttore di ricerca: Prof. Giuseppe Toscani, Università di Pavia
Correlatore: Prof. Giampiero Spiga, Università di Parma