

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO  
FACULTAD DE CIENCIAS

---

---



T E S I S

"EFECTOS DE PARED EN LA DIFUSION  
DE PARTICULAS BROWNIANAS:  
TRATAMIENTO HIDRODINAMICO"

PRESENTADA POR:

Alejandro Rodríguez Palacios

PARA OBTENER EL TITULO DE:

F í s i c o

DIRECTOR:

Dr. Rosalío Rodríguez Zepeda

México, D. F., 1985.



Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## INDICE

INTRODUCCION .....	1
I. LA FORMULA DE BRENNER .....	4
II. MOVIMIENTO BROWNIANO EN FLUJO CORTANTE UNIFORME ....	19
2.1 EL MODELO .....	19
2.2 ECUACION DE LANGEVIN V.S. ECUACION DE FOKKER-PLANCK .....	21
2.3 SOLUCION DE LA ECUACION DE LANGEVIN .....	27
III. DIFUSION EN UN FLUJO CORTANTE UNIFORME Y EN PRESENCIA DE UNA PARED .....	31
3.1 DESPLAZAMIENTO CUADRATICO MEDIO .....	32
3.2 COEFICIENTE DE DIFUSION .....	35
IV. DISCUSION Y CONCLUSIONES .....	41
APENDICE A .....	44
APENDICE B .....	45
REFERENCIAS .....	50

## INTRODUCCION

El estudio del movimiento de pequeñas partículas a través de un fluido viscoso data de mediados del siglo pasado. Comenzando con el análisis que hiciera Stokes del movimiento traslacional de una esfera rígida a través de un fluido estacionario sin fronteras para números de Reynolds pequeños. Desde entonces este estudio se ha extendido a diversos tipos de partículas y de movimientos, incluyendo tanto campos externos como internos, así como los efectos de la proximidad de paredes en la fuerza hidrodinámica de arrastre de la partícula y en su velocidad.

En general, la importancia del movimiento browniano en un campo de fuerza reside tanto en sus aspectos prácticos como teóricos. Entre los primeros pueden contarse los siguientes: sedimentación, electroforesis, coagulación, etc. y entre los segundos están: problemas generales como el escape de barreras de potencial y la teoría de difusión de reacciones químicas. La investigación de este tipo de movimiento es de interés en campos como la física de los polímeros, la ciencia de los coloides y la reología (e.g. efectos reoópticos y reoeléctricos) entre otros y en algunas aplicaciones como las técnicas de separación (hidrodinámica-cromatográfica, fragmentación del campo de flujo, etc.).

Por otro lado, existe una relación bien establecida entre las fluctuaciones de un sistema y sus propiedades de transporte a través de las funciones de correlación. Como estas últimas se pueden medir directamente, las propiedades de transporte

pueden determinarse. Además existe suficiente evidencia experimental<sup>(1)</sup> que muestra que el movimiento de un cuerpo sólido en un fluido viscoso se ve afectado considerablemente por la presencia de paredes. En efecto, éstas modifican apreciablemente la fuerza de arrastre experimentada por el cuerpo.

Consecuencias de este hecho se tienen, entre otras, dentro de la física de polímeros (e.g. en la formación de agregados); y dentro del área biológica en problemas tales como el movimiento de moléculas y difusión de proteínas y lípidos en membranas biológicas y en procesos fisiológicos de transporte en membranas. Sin embargo, la influencia de las paredes en las propiedades de transporte de un sistema apenas si se ha estudiado. Es pues de fundamental importancia el estudio del movimiento browniano en un campo de fuerza en donde la presencia de paredes tiene efectos relevantes.

El objetivo principal de este trabajo consiste en investigar cómo afecta la presencia de paredes (plano sólido infinito) al coeficiente de difusión de una partícula browniana esférica, moviéndose a través de un fluido newtoniano viscoso en flujo cortante uniforme para números de Reynolds pequeños. Para esto, utilizando la corrección a la fuerza hidrodinámica de arrastre deducida por Brenner<sup>(2)</sup>, construimos la ecuación de Langevin que describe el movimiento de la partícula. Esta ecuación contiene la presencia de la pared a través del coeficiente de fricción, así como la del flujo particular que se estudia.

De esta ecuación calculamos explícitamente el desplazamiento cuadrático medio de la partícula y con él obtenemos el coeficiente de difusión,  $D$ , el cual ciertamente, contiene los efectos

de la presencia de la pared y del flujo externo.

Los resultados muestran que, al comparar los valores de  $D$  con los del coeficiente de difusión en ausencia de paredes,  $D_{\infty}$ , para distancias pequeñas entre la partícula y la pared, las correcciones son significativas y pueden ser de hasta un 20%. Esto muestra la influencia que tienen las paredes en una de las propiedades de transporte del sistema.

Finalmente, dentro de las conclusiones se discuten estos resultados, se hace una crítica del método y del modelo usados y se exhiben sus limitaciones. Además, se menciona la falta de resultados experimentales con los cuales pudiéramos comparar las predicciones de este modelo. Adicionalmente, se sugieren posibles extensiones del trabajo.

Agradezco a las personas que de una u otra forma intervinieron en la realización de este trabajo.

# CAPITULO I

## LA FORMULA DE BRENNER

Se ha observado experimentalmente<sup>(3,4,5)</sup> que el comportamiento de un cuerpo sólido moviéndose a través de un fluido viscoso, en general, se ve afectado considerablemente debido a la presencia de paredes. En particular se ha reportado<sup>(1)</sup> un aumento significativo (20%) en la fuerza hidrodinámica de arrastre experimentada por el cuerpo. Dado que se conocen muchas aplicaciones de importancia práctica, que dependen directamente de la fuerza de arrastre<sup>(6,7,8)</sup>, es evidente la necesidad de corregir dicha fuerza por el efecto de paredes. Frecuentemente, es suficiente conocer la magnitud de esta corrección para razones relativamente pequeñas entre las dimensiones características del cuerpo y la distancia de éste a la pared.

El primero en deducir una expresión para la fuerza hidrodinámica de arrastre de un cuerpo arbitrario incluyendo estas correcciones fué Brenner<sup>(2,9)</sup>. Para esto, utilizó una técnica de solución conocida como el método de reflexiones<sup>(10)</sup> de la hidrodinámica clásica. Este método supone, apoyado en que las ecuaciones de movimiento del fluido y las condiciones de frontera son lineales, que los campos de velocidad y de presión del fluido se pueden descomponer en una suma de campos

$$\vec{v} = \sum_i \vec{v}^{(i)},$$

$$p = \sum_i p^{(i)}, \quad i=1,2,3,\dots$$

en donde cada término satisface, separadamente, las ecuaciones de movimiento. Los campos individuales se determinan sucesivamente mediante la aplicación de las siguientes condiciones de frontera

$$\vec{v}^{(1)} = \vec{U} \quad \text{en } P,$$

$$\vec{v}^{(2)} = -\vec{v}^{(1)} \quad \text{en } S,$$

$$\vec{v}^{(3)} = -\vec{v}^{(2)} \quad \text{en } P,$$

$$\vec{v}^{(4)} = -\vec{v}^{(3)} \quad \text{en } S, \text{ etc.}$$

Aquí  $\vec{U}$  es la velocidad con la que se mueve el cuerpo P y S es la pared. Además,

$$\vec{v}^{(i)} \rightarrow 0 \quad \text{cuando } r \rightarrow \infty,$$

en donde r se mide desde el 'centro' del cuerpo. La fuerza de arrastre  $\vec{F}$ , ejercida sobre el cuerpo por el fluido, se puede obtener sumando las contribuciones a ésta de cada uno de los campos individuales  $\vec{F}^{(i)}$ , i.e.,

$$\vec{F} = \sum_i \vec{F}^{(i)}.$$

Si bien es cierto que mediante este método se obtiene una expresión analítica que contiene las correcciones a la fuerza de arrastre, su deducción es larga y complicada. Además, por

otro lado, el método no es lo suficientemente preciso para determinar la validez de la aproximación de la fórmula resultante para  $\vec{F}$ . Por estas razones, en la literatura se han utilizado métodos más poderosos para deducir la misma fórmula y que al mismo tiempo permiten precisar su validez. Así por ejemplo, Williams utiliza las representaciones integrales de las ecuaciones hidrodinámicas correspondientes para deducir la fórmula de Brenner<sup>(11)</sup>. En este capítulo esbozaremos brevemente las ideas principales de este método omitiendo los simples pero tediosos detalles algebraicos. Estos pueden encontrarse en el artículo original y en las referencias allí citadas.

Incidentalmente, cabe señalar que este método fué desarrollado inicialmente por Lorentz hace 80 años<sup>(12)</sup>. Posteriormente fué extendido por Oseen a otras situaciones<sup>(13)</sup> y permite, por un lado, obtener la fórmula de Brenner de una manera mucho más directa y elegante, y por otro, determinar con mayor precisión la validez de la aproximación para  $\vec{F}$ .

A continuación, haremos primeramente una breve descripción de las representaciones integrales y, posteriormente, describiremos someramente la deducción de Williams de la fórmula de Brenner.

Como es sabido, las representaciones integrales (función de Green) son de gran importancia teórica. Ya que permiten resolver una ecuación diferencial lineal con condiciones de frontera apropiadas, mediante una cuadratura, es decir, transformando la ecuación diferencial en una ecuación integral. Veamos brevemente cuál es la idea central de este método<sup>(14)</sup>.

Consideremos una región  $V$  del espacio, acotada por una super

ficie cerrada  $S$ , para la cual buscamos una solución denotada por  $\phi(\vec{r})$  de la ecuación diferencial no homogénea que escribimos como

$$\mathcal{L} \phi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}), \quad (1.1)$$

en donde  $\mathcal{L}$  denota un operador diferencial y  $\psi(\vec{r})$  es una función continua en  $V$ . Además,  $\phi(\vec{r})$  debe satisfacer ciertas condiciones de frontera dadas. Ahora bien, si existe una solución única  $\phi(\vec{r})$  para cada  $\psi(\vec{r})$ , debe existir un operador inverso  $\mathcal{L}^{-1}$  tal que para toda  $\psi(\vec{r})$ , la solución formal de (1.1) sea

$$\phi(\vec{r}) = \mathcal{L}^{-1} \psi(\vec{r}). \quad (1.2)$$

Aquí, el operador  $\mathcal{L}^{-1}$  denota la operación inversa a la representada por  $\mathcal{L}$ , "más" la aplicación de las condiciones de frontera asociadas.

Se sabe que por definición<sup>(14)</sup>, la solución de (1.1) cuando  $\psi(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ , es la función de Green  $G(\vec{r}, \vec{r}_0)$ , para el operador  $\mathcal{L}$  y las condiciones de frontera dadas. De esta manera, la función de Green satisface la ecuación

$$\mathcal{L} G(\vec{r}, \vec{r}_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \quad (1.3)$$

con las mismas condiciones de frontera que satisface  $\phi(\vec{r})$ . De aquí se sigue que

$$G(\vec{r}, \vec{r}_0) = \mathcal{L}^{-1} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0). \quad (1.4)$$

Valiéndonos de la función delta de Dirac, podemos escribir (1.2) como

$$\phi(\vec{r}) = \int \mathcal{L}^{-1} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \psi(\vec{r}_0) d\mathcal{V}_0 \quad (1.5)$$

en donde  $d\mathcal{V}_0$  denota el elemento de volumen que encierra al punto  $\vec{r}_0$ . Haciendo uso de (1.4) obtenemos finalmente

$$\phi(\vec{r}) = \int G(\vec{r}, \vec{r}_0) \psi(\vec{r}_0) d\mathcal{V}_0, \quad (1.6)$$

que es la solución general de la ecuación inhomogénea (1.1).

Si bien el método es elegante, es poco práctico ya que encontrar la función de Green correspondiente puede ser sumamente difícil y tedioso o simplemente puede no existir. Además, buscar el operador inverso  $\mathcal{L}^{-1}$  implica resolver un problema de eigenvalores. Ilustraremos rápidamente esto.

Si el operador diferencial es hermitiano,  $\mathcal{L}$ , podemos esperar que sus eigenfunciones formen un conjunto completo. Encontrar estas eigenfunciones  $\psi_\lambda$  y los eigenvalores  $\lambda$ , correspondientes, implica resolver el problema de eigenvalores

$$\mathcal{L} \psi_\lambda(\vec{r}) = \lambda \psi_\lambda(\vec{r}) \quad (1.7)$$

con las mismas condiciones de frontera sobre  $\psi_\lambda$  como sobre  $\phi(\vec{r})$ . Entonces

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \int d\lambda \psi_\lambda(\vec{r}) \overline{\psi_\lambda(\vec{r}_0)} \quad (1.8)$$

si los eigenvalores forman un conjunto continuo; si forman un conjunto discreto se sustituye  $\sum_{\lambda}$  en lugar de  $\int d\lambda$ . De aquí que (1.4), la función de Green para el operador  $\mathcal{L}$  y las condiciones de frontera dadas, sea

$$G(r, r') = \int d\lambda \frac{\psi_{\lambda}(\vec{r}) \overline{\psi_{\lambda}(\vec{r}_0)}}{\lambda}, \quad (1.9)$$

siempre que  $\lambda \neq 0$  y no exista una sucesión infinita de  $\lambda$ 's que tienda a cero como un punto límite. De esta manera, se construyen las funciones de Green para todos los operadores hermitianos  $\mathcal{L}$  que no tengan eigenvalores nulos. La expresión (1.9) se conoce como la expansión en eigenfunciones para la función de Green. En general, la expresión anterior es difícil de resolver aun para operadores hermitianos que no tengan eigenvalores nulos. Por esto, como se mencionó antes, el método es poco práctico.

A continuación, vamos a utilizar el método de las representaciones integrales para calcular el efecto de la proximidad de una pared en la resistencia de Stokes de un cuerpo arbitrario moviéndose en un fluido viscoso. Como veremos esto implica resolver un conjunto de ecuaciones integrales de la forma (1.6), cuya solución puede ser obtenida completamente siempre y cuando se conozca la solución al problema del flujo de Stokes para un medio sin fronteras. Para esto, como se mencionó antes, describiremos brevemente la deducción hecha por Williams.

Consideremos un fluido newtoniano viscoso e incompresible. La velocidad  $\vec{v}$  y la presión  $p$  de éste en un flujo stokesiano (movimiento reptante, cap.2 sec.1), satisfacen las siguientes ecuaciones de movimiento y de continuidad, respectivamente,

$$\mu \nabla^2 \vec{v} - \nabla p = 0 , \quad (1.10a)$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 , \quad (1.10b)$$

en donde  $\mu$  es la viscosidad dinámica.

Sea ahora  $V$  un volumen limitado por una superficie cerrada  $S$ . Supongamos que las ecuaciones (1.10) tienen una solución regular en  $V$ . Sea  $P_0$  un punto en  $V$  para el cual buscamos una solución de (1.10). Para obtener el campo producido por una fuente distribuída en el espacio y descrita por un punto variable  $P$ , calculamos la contribución de cada punto elemental  $P$  en  $P_0$ . Debido al carácter lineal de (1.10), sumando todas estas contribuciones construimos la solución integral de (1.10).

Ahora bien, buscamos una solución que dependa de cualquiera de los dos puntos  $P$  y  $P_0$ . Para ello, definiremos las siguientes funciones

$$\vec{T} = \mathbb{1} \nabla^2 |\vec{r} - \vec{r}_0| - \nabla [\nabla |\vec{r} - \vec{r}_0|] , \quad (1.11a)$$

$$\vec{p} = -\mu \nabla [\nabla^2 |\vec{r} - \vec{r}_0|] , \quad (1.11b)$$

con  $\vec{T} = \vec{T}(\vec{r}, \vec{r}_0)$ , en donde  $\mathbb{1}$  es el tensor unitario, y  $\vec{r}$  y  $\vec{r}_0$  son los vectores de posición de  $P$  y  $P_0$ , respectivamente. Si imponemos además, la condición adicional  $\vec{T} = 0$  sobre  $S$ , las funciones definidas por (1.11) satisfacen las ecuaciones

$$\mu \nabla^2 \vec{T} - \nabla \vec{p} = -8\pi\mu \mathbb{1} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) , \quad (1.12a)$$

$$\nabla \cdot \vec{T} = 0. \quad (1.12b)$$

Mediante una generalización de la segunda identidad de Green podemos obtener una expresión para  $\vec{v}(P)$ , la solución de las ecuaciones (1.10) para cualquier punto P en la región comprendida entre dos superficies cerradas  $S_1$  y  $S_2$ , en donde  $S_1$  está completamente contenida en  $S_2$  y tal que  $\vec{v}$  se anula en  $S_2$ . Entonces partiendo de la segunda identidad de Green<sup>(10)</sup>

$$\int_V (f \nabla^2 g - g \nabla^2 f) dV = \oint_S (f \frac{\partial g}{\partial n} - g \frac{\partial f}{\partial n}) dS, \quad (1.13)$$

identificaremos a f con  $\vec{v}$  y a g con  $\vec{T}$ , usando (1.11) y (1.12) y después de manipulaciones algebraicas simples se obtiene que

$$\begin{aligned} \int_V \left\{ \frac{1}{\mu} [\nabla \cdot (\vec{v} \vec{p}) - \nabla \cdot (\vec{T} \rho)] - 8\pi \vec{v} \cdot \mathbb{1} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \right\} dV = \\ = \oint_S \left( \vec{v} \cdot \frac{\partial \vec{T}}{\partial n} - \frac{\partial \vec{v}}{\partial n} \cdot \vec{T} \right) dS. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Si ahora usamos la definición integral de la función delta de Dirac, el teorema de Gauss y agrupamos apropiadamente, se obtiene

$$\vec{v}(P) = -\frac{1}{8\pi\mu} \oint_S \left\{ \left( \mu \frac{\partial \vec{v}}{\partial n} - \rho \hat{n} \right) \cdot \vec{T} - \vec{v} \cdot \left( \mu \frac{\partial \vec{T}}{\partial n} - \hat{n} \vec{p} \right) \right\} dS, \quad (1.15)$$

en donde P es un punto variable sobre S y  $\hat{n}$  denota la normal exterior a S.

Es conveniente escribir  $\vec{T}$  y  $\vec{p}$  como  $\vec{T}_1 + \vec{T}_2$  y  $\vec{p}_1 + \vec{p}_2$ , respectivamente, en donde  $\vec{T}_1$  y  $\vec{p}_1$  satisfacen (1.12) y  $\vec{T}_2$  y  $\vec{p}_2$

satisfacen

$$\mu \nabla^2 \vec{T}_2 - \nabla \vec{p}_2 = 0, \quad (1.16a)$$

$$\nabla \cdot \vec{T}_2 = 0. \quad (1.16b)$$

Ahora, considerando la región  $V$  comprendida entre dos superficies cerradas  $S_1$  y  $S_2$ , con  $S_1$  contenida en  $S_2$ , tenemos que cuando  $S_2$  está en infinito  $T$  y  $p$  se reemplazan en (1.15) por  $T_\infty$  y  $p_\infty$ , respectivamente. De las condiciones de frontera

$$\vec{v} = \text{cte.} \quad \text{en } S_1, \quad (1.17a)$$

$$\vec{v} = \vec{0} \quad \text{en } S_2, \quad (1.17b)$$

de los teoremas de Green y de las ecuaciones (1.12), Williams obtiene la expresión

$$\vec{v}(P) = - \frac{1}{8\mu\pi} \oint_{S_1} \vec{f} \cdot \vec{T} \, dS, \quad (1.18)$$

en donde

$$\vec{f} = \mu \frac{\partial \vec{v}}{\partial n} - p \hat{n} \quad (1.19)$$

(en el caso general de una superficie móvil, la velocidad  $\vec{v}$  debe ser igual a la velocidad de la superficie  $S_1$ ).

Podemos aplicar la expresión (1.18) al problema del movimiento del fluido generado por un cuerpo rígido  $S_1$  moviéndose

con velocidad uniforme  $\vec{U}$  a través de un fluido viscoso en la región limitada (encerrada) por una superficie rígida  $S_2$  y entonces, la velocidad del fluido estará dada por (1.18). Además, de la definición del tensor de esfuerzos,  $\vec{\tau}$ , para un fluido newtoniano<sup>(15)</sup>

$$\vec{\tau} = -p\mathbf{1} + \mu\nabla\vec{v} \quad (1.20)$$

se tiene que la fuerza  $\vec{F}$  sobre el cuerpo, queda definida por

$$\vec{F} = \oint_{S_1} \vec{\tau} \cdot d\vec{S} \quad (1.21)$$

En este caso,  $\vec{\tau} \cdot d\vec{S}$  está dada por (1.19), i.e., la componente normal de  $\vec{\tau}$ .

Sabemos que para cualquier cuerpo en el régimen de Stokes en un medio sin fronteras, existe una relación lineal que conecta la fuerza de arrastre  $\vec{F}_\infty$  experimentada por el cuerpo con la velocidad  $\vec{U}$  del mismo, dada por

$$\vec{F}_\infty = -6\pi\mu c \vec{U} \cdot \vec{\phi}_\infty, \quad (1.22)$$

en donde el tensor simétrico  $\vec{\phi}_\infty$  es el tensor de resistencia de Stokes (independiente de la orientación del cuerpo con respecto a su dirección de movimiento a través del fluido) y  $c$  la dimensión característica de  $S_1$ . Las propiedades de los tensores simétricos permiten que para toda partícula 'arbitraria' en el flujo de arrastre se pueda definir un conjunto único de tres ejes mutuamente perpendiculares tales que, si el movimiento de la par-

tícula a través de un fluido sin fronteras es paralelo a uno de ellos, la partícula experimentará una fuerza solo en esa dirección. A estos ejes se les conoce como los ejes principales de resistencia<sup>(2,9)</sup>.

Definimos ahora el parámetro  $\epsilon (=c/l)$  como la razón de la dimensión característica de  $S_1$  (denotada por  $c$ ) a la mínima distancia entre un punto en  $S_1$  y un punto en  $S_2$  (denotada por  $l$ ). Escogiendo el origen  $O$  en algún punto sobre  $S_1$  y si  $P$  y  $P_0$  ambos están en  $S_1$ , entonces

$$\vec{T}_2 = \vec{T}_2^0 + \vec{r} \cdot [\nabla \vec{T}_2]_{\vec{r}=\vec{r}_0=\vec{0}} + \vec{r}_0 \cdot [\nabla^0 \vec{T}_2]_{\vec{r}=\vec{r}_0=\vec{0}} + O(\epsilon^3), \quad (1.23)$$

en donde  $\vec{T}_2^0 = \vec{T}_2(0,0)$  y el superíndice "0" en  $\nabla$  indica diferenciación con respecto a las componentes de  $\vec{r}_0$ .

El problema con valor a la frontera para el flujo que rebasa (pasa) a  $S_1$ , se reduce entonces a la solución del conjunto de ecuaciones integrales

$$\vec{U} = -\frac{1}{8\pi\mu} \oint_{S_1} \vec{f} \cdot (\vec{T}_1 + \vec{T}_2) dS, \quad (1.24)$$

con  $P$  y  $P_0$  ambos en  $S_1$ . Si en la ecuación anterior reemplazamos a  $\vec{T}_2$  por  $\vec{T}_2^0$  (es decir, si despreciamos las contribuciones del segundo y tercer términos del miembro derecho de (1.23) que son de  $O(\epsilon^2)$ ), se tiene que

$$\vec{U} = -\frac{1}{8\pi\mu} \left\{ \oint_{S_1} \vec{f} \cdot \vec{T}_1 dS + \oint_{S_1} \vec{f} dS \cdot \vec{T}_2^0 \right\} \quad (1.25)$$

y usando (1.21) se obtiene

$$\vec{U} + \frac{1}{8\pi\mu} \vec{F} \cdot \vec{T}_2^0 = - \frac{1}{8\pi\mu} \oint_S \vec{f} \cdot \vec{T}_1 dS. \quad (1.26)$$

Esta ecuación es la representación integral para el flujo de Stokes cuando  $S_1$  se está moviendo en un fluido sin fronteras con velocidad constante dada por

$$\vec{U} + \frac{1}{8\pi\mu} \vec{F} \cdot \vec{T}_2^0. \quad (1.27)$$

De las ecuaciones (1.22), (1.26) se tiene que

$$\vec{F} = -6\pi\mu c \left( \vec{U} + \frac{1}{8\pi\mu} \vec{F} \cdot \vec{T}_2^0 \right) \cdot \vec{\Phi}_\omega, \quad (1.28)$$

cuya solución es

$$\vec{F} = -6\pi\mu c \vec{U} \cdot \left[ \vec{\Phi}_\omega^{-1} + \frac{3}{4} c \vec{T}_2^0 \right]^{-1}. \quad (1.29)$$

Esta expresión para la fuerza de arrastre es precisamente la que dedujo Brenner utilizando el complicado método de reflexiones antes mencionado.

En el caso particular en que el movimiento del cuerpo sea paralelo a uno de sus ejes principales de resistencia, entonces (1.28) se convierte en

$$\frac{F}{F_\omega} = \frac{1}{1 - \kappa (F_\omega / 6\pi\mu U L)} + O(\epsilon^3). \quad (1.30)$$

que es la corrección a la Ley de Stokes de resistencia, donde

$c$  : dimensión característica del cuerpo.

- $l$  : distancia mínima entre el cuerpo y la pared.  
 $\mu$  : viscosidad del fluido.  
 $U$  : velocidad del cuerpo.  
 $k$  : constante adimensional, independiente de la forma del cuerpo. Solamente depende de la naturaleza de las paredes.  
 $F_{\infty}$  : fuerza de arrastre sobre el cuerpo cuando éste se mueve con velocidad  $U$ , a través de un fluido SIN fronteras.  
 $F$  : fuerza de arrastre sobre el cuerpo cuando éste se mueve con velocidad  $U$ , a través de un fluido CON fronteras.

Resumiendo: la corrección a la fuerza de Stokes debida al efecto de la proximidad de una pared, para una partícula arbitraria moviéndose paralelamente a uno de sus ejes principales de resistencia, puede ser calculada utilizando solamente la fuerza experimentada por la partícula en un fluido sin paredes siempre que

- i) se conozca la corrección debida a la presencia de la pared para una partícula esférica, y
- ii) la partícula sea pequeña comparada con su distancia a la pared ( $\epsilon \ll 1$ ).

El valor numérico del parámetro  $k$  en la ecuación (1.30), puede obtenerse para cualquier frontera donde se conozca el efecto de la pared sobre una partícula esférica mediante

$$\frac{F}{6\pi\mu c U} = \frac{1}{1 - k(c/l)} + O(\epsilon^3). \quad (1.31)$$

El caso de interés en este trabajo, es el de una partícula esférica moviéndose paralelamente a uno de sus ejes de resistencia a través de un fluido viscoso, en donde la pared es un plano sólido infinito. Para este caso, el tensor simétrico de resistencia,  $\vec{\Phi}_\infty$ , es un escalar y el valor correspondiente<sup>(13)</sup> para  $k$  es  $9/16$ . Con esto podemos establecer una analogía entre la fuerza de Stokes para un medio sin fronteras,  $\vec{F}_\infty$ , y la corrección a dicha fuerza en presencia de paredes,  $\vec{F}$ . De la expresión (1.22) tenemos para el caso que nos ocupa

$$\vec{F}_\infty = -\eta U \quad (1.32)$$

con  $\eta = 6\pi\mu c$ . Entonces, tomando para  $F$  la expresión

$$F = -\gamma' U \quad (1.33)$$

se obtiene de (1.31) que

$$\gamma' = \left( \frac{l}{l - \kappa c} \right) 6\pi\mu c. \quad (1.34)$$

De esta manera, la relación entre  $F_\infty$  y  $F$  está dada por

$$\frac{F}{F_\infty} = \frac{l}{l - \kappa c} + O(\epsilon^3). \quad (1.35)$$

La ventaja del resultado anterior está en que si  $k$  puede ser determinada mediante un cálculo directo de  $F$  para un cuerpo particular, entonces ese valor de  $k$ , puede ser usado para dar  $F$  para cualquier otro cuerpo, siempre y cuando se conozca la fuerza en

un fluido sin fronteras.

En el siguiente capítulo, después de plantear el problema y de describir un modelo particular, usaremos la fórmula de Brenner para construir la ecuación de Langevin que describe el movimiento de una partícula browniana sólida de forma esférica en un flujo que satisface las ecuaciones (1.10).

CAPITULO II  
MOVIMIENTO BROWNIANO EN FLUJO CORTANTE UNIFORME

2.1 EL MODELO

En esta sección nos interesa describir el movimiento de una partícula browniana sólida de forma esférica a través de un fluido viscoso en flujo cortante uniforme y en la vecindad de un plano sólido infinito.

Comencemos por describir el flujo en el que se mueve la partícula browniana. Consideremos un fluido newtoniano viscoso comprendido entre dos placas planas paralelas, en movimiento relativo producido por la acción de un agente externo al sistema. Esto induce un flujo cortante uniforme y laminar de la forma

$$v_i(r_i, t) = a_{ij} r_j \quad (2.1)$$

en donde el tensor razón de corte,  $a_{ij}$ , está definido por

$$a_{ij} \equiv \frac{\partial v_i}{\partial x_j}, \quad (2.2)$$

el cual, supondremos también, tiene magnitud constante, esto es,

$$(a_{ij} a_{ij})^{1/2} = \text{cte.} \quad (2.3)$$

El término flujo laminar se emplea para indicar una condición de flujo ordenado, en el cual, los elementos de fluido se

deslizan en capas contiguas sin que haya transferencia de masa entre una capa y otra. Solamente se verifica un intercambio de impulso entre ellas. El flujo laminar existirá cuando el número de Reynolds sea menor a un cierto valor crítico. Por encima de éste, el régimen laminar se vuelve inestable y se genera otro tipo de flujo que puede ser turbulento. El valor de este número de Reynolds crítico depende de la geometría del flujo y de la longitud y velocidad características del flujo en cuestión. Este número está definido por

$$R_e = \frac{\rho V_0 L}{\mu} = \frac{\text{fuerzas inerciales}}{\text{fuerzas viscosas}}, \quad (2.4)$$

en donde  $L$  y  $V_0$  son la longitud y velocidad características, respectivamente,  $\rho$  es la densidad y  $\mu$  es la viscosidad del fluido.

De la amplia gama de valores (entre cero y el valor crítico) que puede tomar el número de Reynolds, existe un caso de interés para este trabajo, en el que aquél tiende a cero. En este caso, se pueden despreciar completamente las fuerzas inerciales. Esto implica que el movimiento es tan lento que primero, las aceleraciones convectivas no tienen efectos significativos y, segundo, las inestabilidades hidrodinámicas asociadas con el o los valores críticos del número de Reynolds pueden ser despreciadas. A este tipo de movimiento se le conoce como movimiento reptante (creeping motion) y está definido por el sistema de ecuaciones (1.10). El flujo cortante uniforme descrito líneas arriba constituye un caso particular de este tipo de flujo.

Por esto, si bien el tensor razón de corte  $a_{ij}$  tiene magnitud constante, su valor, aunque arbitrario, está limitado, en principio, por el valor del número de Reynolds crítico. Así pues, la posibilidad de que para un valor crítico de  $a_{ij}$  ocurra una inestabilidad hidrodinámica en el sistema no se investiga en este trabajo.

Consideremos ahora el movimiento browniano de la partícula. En general, existen dos formas de describir el movimiento browniano<sup>(16)</sup>: en términos de una ecuación de Langevin o por una densidad de probabilidad que satisface una ecuación de Fokker-Planck; ambas ecuaciones con condiciones iniciales y de frontera dadas. La equivalencia entre estas dos ecuaciones se puede establecer rigurosamente sólo para el caso en el que las ecuaciones anteriores sean lineales; en este caso, se puede pasar de la ecuación de Fokker-Planck a la de Langevin y viceversa<sup>(17)</sup>.

En la siguiente sección construiremos la ecuación de Langevin para el sistema aquí descrito y deduciremos la ecuación de Fokker-Planck correspondiente.

## 2.2 ECUACION DE LANGEVIN V.S. ECUACION DE FOKKER-PLANCK

La suposición básica que nos permite construir una ecuación de Langevin para el movimiento browniano de una partícula esférica, es que la fuerza que determina el movimiento de ésta se puede escribir como la suma de: (i) una fuerza de arrastre sistemática (Ley de Stokes) debida a la velocidad de la partícula relativa al movimiento del fluido en su vecindad y

(ii) una fuerza aleatoria producida como consecuencia de las colisiones entre la partícula y las moléculas del fluido. Así, para una partícula browniana de masa  $m$ , sobre la que no actúa campo externo alguno, la ecuación de Langevin es

$$m \frac{d\vec{U}}{dt} = \vec{F}_f + \vec{F}_a . \quad (2.5)$$

Supondremos que la fuerza de fricción,  $\vec{F}_f$ , es proporcional a la velocidad relativa  $\vec{U} - \vec{V}$ , entre la partícula y el fluido, en donde  $\vec{V}$  está dada por (2.1). Además, puesto que la partícula se mueve en la vecindad de una pared, la expresión que usaremos para esta fuerza será, precisamente, la fórmula de Brenner dada por la ecuación (1.33), la cual incluye las correcciones debidas a la presencia de la pared.

De esta manera, la ecuación de Langevin que describe, en el sistema del laboratorio, el movimiento de una partícula browniana sólida de forma esférica a través de un fluido viscoso y en la vecindad de un plano sólido infinito, tiene la forma

$$\frac{d}{dt} R_i(t) = U_i(t) , \quad (2.6a)$$

$$\frac{d}{dt} U_i(t) = -\gamma [U_i(t) - a_{ij} R_j(t)] + f_i(t) , \quad (2.6b)$$

en donde  $R_i(t)$  y  $U_i(t)$  son la posición y la velocidad de la partícula y la constante de fricción por unidad de masa,  $\gamma$ , está dada por la expresión (1.34). Además, la fuerza aleatoria por unidad de masa,  $f_i(t)$ , tiene las siguientes propiedades estadísticas

$$\langle f_i(t) \rangle = 0, \quad (2.7a)$$

$$\langle f_i(t) f_j(t') \rangle = G \delta_{ij}(t - t'), \quad (2.7b)$$

con

$$G = \frac{2k_B T \gamma}{m}. \quad (2.7c)$$

La ecuación (2.7b) implica la existencia de un intervalo de tiempo para el cual la fuerza aleatoria,  $f_i(t)$ , pueda experimentar muchas fluctuaciones sin que la velocidad o la posición de la partícula cambien apreciablemente. De entre las posibles condiciones iniciales para este sistema, escogeremos por simplicidad las siguientes

$$R_i(t = 0) = 0, \quad (2.8a)$$

$$U_i(t = 0) = U_i(0). \quad (2.8b)$$

A continuación, construiremos la ecuación de Fokker-Planck equivalente a la ecuación de Langevin obtenida antes y mostraremos que el método estándar para resolver aquélla no es aplicable en este caso<sup>(18)</sup>. Esto, nos llevará a la elección de la ecuación de Langevin como la más conveniente para describir a nuestro modelo.

La ecuación de Langevin anterior se puede expresar de la forma

$$\dot{q}_i = k_i(q) + \sum_{j=1}^n g_{ij} f_j(t), \quad i=1,2,\dots,n, \quad (2.9)$$

en donde  $q_i$  denota a las variables del sistema y  $k_i$  y  $g_{ij}$  son, en general, funciones de  $q$ . Además, las  $f_j(t)$  representan funciones aleatorias que satisfacen

$$\langle f_j(t) \rangle = 0, \quad (2.10a)$$

$$\langle f_j(t) f_k(t') \rangle = \delta_{jk} \delta(t - t'). \quad (2.10b)$$

Se puede mostrar<sup>(17,19)</sup> que la ecuación (2.9) es equivalente a la siguiente ecuación de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(q) = - \sum_{\mu=1}^n \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} [K_{\mu}(q) P(q)] + \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^n \frac{\partial^2}{\partial q_{\mu} \partial q_{\nu}} [K_{\mu\nu}(q) P(q)], \quad (2.11)$$

en donde  $K_{\mu}$  y  $K_{\mu\nu}$ , el vector de arrastre y el tensor de difusión, respectivamente, están dados por las expresiones

$$K_i(q) = k_i(q) + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \left( \frac{\partial}{\partial q_j} g_{ik}(q) \right) g_{jk}(q), \quad (2.12)$$

$$K_{ij}(q) = \sum_k g_{ik}(q) g_{jk}(q). \quad (2.13)$$

De aquí se sigue que, si se conoce la ecuación (2.9), los coeficientes de arrastre y difusión se pueden calcular de (2.12) y (2.13). Inversamente también es cierto que, si se conocen estos coeficientes de la ecuación de Fokker-Planck (2.11), invirtiendo las relaciones (2.12) y (2.13) se pueden encontrar<sup>(19)</sup>  $k_i$  y  $g_{ij}$ .

Si la ecuación de Fokker-Planck (2.11) es lineal en  $q$ , es decir, si  $K_i(q)$  es una función lineal en  $q$  y si  $K_{ij}$  es constante, entonces esta ecuación de Fokker-Planck lineal multivariada siempre se puede escribir de la siguiente forma<sup>(20)</sup>

$$\frac{\partial}{\partial t} P = -A_{ij} \frac{\partial}{\partial q_i} q_j P + \frac{1}{2} B_{ij} \frac{\partial^2 P}{\partial q_i \partial q_j}, \quad (2.14)$$

en donde  $q_i$ , nuevamente, denota a las variables del sistema y los coeficientes de arrastre,  $A_{ij}q_j$ , y de difusión,  $B_{ij}$ , se pueden calcular a partir de la ecuación de Langevin por el procedimiento descrito anteriormente. Para el caso que nos ocupa, haciendo uso de las ecuaciones (2.6), estos coeficientes resultan ser

$$A_{ij} = \left( \begin{array}{c|c} \textcircled{0} & \mathbf{1} \\ \hline \gamma \bar{\mathbf{a}} & -\gamma \mathbf{1} \end{array} \right), \quad (2.15a)$$

$$B_{ij} = \left( \begin{array}{c|c} \textcircled{0} & \textcircled{0} \\ \hline \textcircled{0} & \mathbf{1} \end{array} \right), \quad (2.15b)$$

donde  $\bar{\mathbf{a}}$  es el tensor razón de corte. De manera que la ecuación de Fokker-Planck equivalente a la ecuación de Langevin (2.6) está dada por (2.14) con los coeficientes (2.15).

Las condiciones iniciales (2.8) para la ecuación de Langevin son equivalentes a las siguientes condiciones iniciales para la ecuación de Fokker-Planck

$$P(R_i, U_i, t=0) = \delta(R_i) \delta(U_i - U_i(0)). \quad (2.16)$$

Ahora bien, para encontrar la solución de la ecuación (2.14)

con estas condiciones iniciales, el método estándar<sup>(18)</sup> supone que  $A_{ij}$  es diagonalizable. Es decir que existe una matriz  $C_{ij}$  tal que

$$\sum_j C_{ij} A_{jk} = \lambda_i C_{ik} , \quad (2.17)$$

en donde los eigenvalores  $\lambda_i$  son las raíces de la ecuación

$$\text{Det} ( A_{ij} - \lambda \delta_{ij} ) = 0 . \quad (2.18)$$

Sin embargo, la matriz  $A_{ij}$  dada explícitamente por (2.15a) es singular ( apéndice A ), lo que implica que no tiene inversa. Además, es degenerada con eigenvalores 0,  $-\gamma$  y por lo tanto no es diagonalizable.

Así pues, aunque el movimiento browniano en flujo cortante es un problema lineal en cuatro dimensiones, su solución no es trivial debido a que no se puede diagonalizar a la matriz de los coeficientes de las ecuaciones determinísticas de movimiento<sup>(21)</sup>. Por estas razones, el método usual de solución<sup>(18)</sup> para problemas lineales no es aplicable en este caso. Como consecuencia, en adelante trabajaremos con la ecuación de Langevin (2.6) que describe a nuestro sistema. En la siguiente sección, resolviendo esta ecuación encontraremos la posición y la velocidad de una partícula browniana en presencia del flujo y la pared.

## 2.3 SOLUCION DE LA ECUACION DE LANGEVIN

Resolviendo las ecuaciones de Langevin, en el sistema del laboratorio, dadas por las relaciones (2.6) con las condiciones iniciales (2.8), obtenemos las soluciones generales

$$R_i(t) = \frac{U_i(t_0)}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t d\tau [1 - e^{-\gamma(t-\tau)}] [\mu a_{ij} R_j(\tau) + f_i(\tau)], \quad (2.19a)$$

$$U_i(t) = U_i(t_0) e^{-\gamma t} + \int_0^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} [\mu a_{ij} R_j(\tau) + f_i(\tau)]. \quad (2.19b)$$

Estas soluciones contienen toda la información sobre la evolución dinámica del sistema y de ellas pueden obtenerse, en principio, todos los momentos de  $P(R_i, U_i, t | R_i^0, U_i^0, t^0)$ , así como las correlaciones respectivas.

Antes de calcular explícitamente alguna de estas cantidades, representaremos convenientemente a la ecuación de Langevin (2.6) y a sus soluciones (2.19) en el sistema de referencia de reposo instantáneo. Se introduce este sistema de referencia, básicamente con el propósito de examinar los efectos del flujo cortante independientemente de los efectos convectivos. Estos pueden eliminarse formalmente transformando las ecuaciones de Langevin a coordenadas lagrangianas mediante una transformación cuasi-galileana definida de la siguiente manera

$$R'_i(t) = \Lambda_{ij}(t) R_j(t), \quad (2.20a)$$

$$V'_i(t) = V_i(t) - a_{ij} R_j(t), \quad (2.20b)$$

en donde

$$\Lambda_{ij}(\pm t) = \delta_{ij} \mp ta_{ij} . \quad (2.20c)$$

Obsérvese que esta transformación se hace para cada punto y para cada instante de tiempo. Además, puede mostrarse<sup>(22)</sup> que esta transformación corresponde a una transformación no inercial.

Como veremos en siguiente capítulo, el cálculo del coeficiente de difusión se simplificará si además de la transformación (2.20), utilizamos adicionalmente una transformación de escala definida mediante

$$\beta_i(t) = R'_i(t) , \quad (2.21a)$$

$$\alpha_i(t) = \Lambda_{ij}(-t) v'_j(t) . \quad (2.21b)$$

esto nos lleva al sistema de reposo instantáneo escalado.

Usando estas transformaciones, las ecuaciones de Langevin en el sistema del laboratorio (2.6), con las condiciones iniciales (2.8), se transforman, en el sistema de reposo instantáneo escalado, en

$$\frac{d}{dt} \beta_i(t) = \Lambda_{ij}(2t) \alpha_j(t) , \quad (2.22a)$$

$$\frac{d}{dt} \alpha_i(t) = -\gamma \alpha_i(t) + \bar{f}_i(t) , \quad (2.22b)$$

en donde

$$\bar{f}_i(t) = \Lambda_{ij}(-t) f_j(t), \quad (2.22c)$$

$$\Lambda_{ij}(2t) = \delta_{ij} - 2ta_{ij}. \quad (2.22d)$$

Para las condiciones iniciales dadas por

$$\beta_i(t=0) = 0, \quad (2.23a)$$

$$\alpha_i(t=0) = \alpha_i(0), \quad (2.23b)$$

las soluciones generales son

$$\beta_i(t) = \int_0^t d\tau e^{-\gamma\tau} \Lambda_{ij}(2t) \alpha_j(0) + \int_0^t d\tau \Lambda_{ij}(2t) \int_0^\tau d\tau' e^{-\gamma(\tau-\tau')} \bar{f}_j(\tau'), \quad (2.24a)$$

$$\alpha_i(t) = \alpha_i(0) e^{-\gamma t} + \int_0^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} \bar{f}_i(\tau). \quad (2.24b)$$

La ecuación (2.24a) se puede escribir como

$$\beta_i(t) = [M_{ij}(0) - M_{ij}(t)] \alpha_j(0) + \int_0^t d\tau [M_{ij}(\tau) - M_{ij}(t)] e^{\gamma\tau} \bar{f}_j(\tau), \quad (2.25a)$$

en donde

$$M_{ij}(t) \equiv \frac{1}{\gamma} e^{-\gamma t} \Lambda_{ij}\left(2\left(\frac{1}{\gamma} + t\right)\right), \quad (2.25b)$$

con

$$\Lambda_{ij}\left(2\left(\frac{1}{\gamma} + t\right)\right) = \delta_{ij} - 2\left(\frac{1}{\gamma} + t\right) a_{ij}. \quad (2.25c)$$

En el siguiente capítulo calcularemos una propiedad de transporte del sistema, el coeficiente de difusión de la partícula browniana.

CAPITULO III  
DIFUSION EN FLUJO CORTANTE UNIFORME  
Y EN PRESENCIA DE UNA PARED

Nuestro interés es calcular las correcciones al coeficiente de difusión de una partícula browniana esférica que se mueve a través de un fluido viscoso en flujo cortante uniforme y en la vecindad de un plano sólido infinito.

Aunque de las soluciones generales (2.9), en principio, es posible calcular cualquier momento de  $P(R_i, U_i, t | R_i^0, U_i^0, t^0)$  y cualquier correlación, para nuestro propósito es necesario calcular solamente el desplazamiento cuadrático medio. Otros momentos y correlaciones para este sistema se calculan explícitamente en el apéndice B.

En general, el coeficiente de difusión está definido, en el sistema de laboratorio, por la siguiente expresión

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \delta R_i^2(t) \rangle}{2t}, \quad (3.1)$$

en donde  $\langle \delta R_i^2(t) \rangle$ , es el desplazamiento cuadrático medio. Los paréntesis angulares  $\langle \dots \rangle$  representan promedios sobre el ensamble de condiciones iniciales y las cantidades entre éstos representan las fluctuaciones de las variables correspondientes.

### 3.1 DESPLAZAMIENTO CUADRÁTICO MEDIO

Por conveniencia trabajaremos en un sistema en reposo donde la ecuación (3.1) puede escribirse como

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \delta \beta_i^2(t) \rangle}{2t}, \quad (3.2)$$

donde  $\langle \delta \beta_i^2(t) \rangle$ , el desplazamiento cuadrático medio en el sistema en reposo, está definido por

$$\langle \delta \beta_i^2(t) \rangle = \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \langle \delta \alpha_i(\tau) \delta \alpha_i(\tau') \rangle, \quad (3.3)$$

en donde

$$\langle \delta \alpha_i(t) \delta \alpha_i(t') \rangle \quad (3.4)$$

representa a la correlación de fluctuación en la velocidad. Las fluctuaciones  $\delta \beta_i(t)$  y  $\delta \alpha_i(t)$  están definidas por

$$\delta \beta_i(t) = \beta_i(t) - \langle \beta_i(t) \rangle, \quad (3.5a)$$

$$\delta \alpha_i(t) = \alpha_i(t) - \langle \alpha_i(t) \rangle, \quad (3.5b)$$

en donde  $\alpha_i(t)$  y  $\beta_i(t)$  son la velocidad y la posición, respectivamente, de la partícula browniana y están dadas por las ecuaciones (2.24). Ahora, promediando estas ecuaciones sobre el ensamble de condiciones iniciales y utilizando (2.7) obtenemos

$$\langle \alpha_i(t) \rangle = \alpha_i(t_0) e^{-\gamma t} \quad (3.6a)$$

$$\langle \beta_i(t) \rangle = [M_{ij}(t_0) - M_{ij}(t)] \alpha_j(t_0) \quad (3.6b)$$

con  $M_{ij}(t)$  dada por (2.25b).

De estas ecuaciones y de (2.24b), la expresión (3.5b) queda como

$$\delta \alpha_i(t) = \int_0^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} \bar{f}_i(\tau) \quad (3.7)$$

en donde, como antes,  $\bar{f}_i(t) = \Lambda_{ij}(-t) f_j(t)$ . Luego, multiplicando la expresión anterior por  $\delta \alpha_i(t')$  y promediando, obtenemos la siguiente relación para la correlación de velocidades

$$\langle \delta \alpha_i(t) \delta \alpha_i(t') \rangle = e^{-\gamma(t+t')} \int_0^t d\tau \int_0^{t'} d\tau' e^{\gamma(\tau+\tau')} \langle \bar{f}_i(\tau) \bar{f}_i(\tau') \rangle \quad (3.8)$$

Usando las ecuaciones (2.7) y (2.22c) se pueden calcular las integrales anteriores obteniéndose que

$$\langle \delta \alpha_i(t) \delta \alpha_i(t') \rangle = G e^{-\gamma t'} \Gamma(\vec{a}, t) \quad (3.9)$$

en donde

$$\Gamma(\vec{a}, t) = e^{-\gamma t} \left[ \lambda_{\kappa l}^{(0)} I_0(t) + \lambda_{\kappa l}^{(1)} I_1(t) + \lambda_{\kappa l}^{(2)} I_2(t) \right] \delta_{\kappa l} \quad (3.10)$$

(recuérdese que la transformación (2.21) depende del tensor razón de corte,  $a_{ij}$ ) con

$$\lambda_{\kappa\epsilon}^{(0)} = \delta_{\kappa\epsilon} \delta_{\kappa\epsilon}, \quad (3.11a)$$

$$\lambda_{\kappa\epsilon}^{(1)} = a_{\kappa\epsilon} \delta_{\kappa\epsilon} + \delta_{\kappa\epsilon} a_{\kappa\epsilon}, \quad (3.11b)$$

$$\lambda_{\kappa\epsilon}^{(2)} = a_{\kappa\epsilon} a_{\kappa\epsilon}, \quad (3.11c)$$

y en donde las funciones  $I_n(t)$  están definidas por la forma estándar

$$I_n(t) = \int_0^t \tau^n e^{2\gamma\tau} d\tau, \quad n=0,1,2. \quad (3.12)$$

Después de calcular explícitamente estas integrales y de sustituir el valor resultante de  $\Gamma(\ddot{a}, t)$  en la ecuación (3.9), se obtiene una expresión para (3.3). Calculando las integrales resultantes en esta última, obtenemos que el desplazamiento cuadrático medio está dado por

$$\langle \delta\beta_i^2(t) \rangle = G \left[ \lambda_{\kappa\epsilon}^{(0)} A_0(t) + \lambda_{\kappa\epsilon}^{(1)} A_1(t) + \lambda_{\kappa\epsilon}^{(2)} A_2(t) \right] \delta_{\kappa\epsilon}. \quad (3.13)$$

En este caso,

$$A_0(t) = \frac{1}{2\gamma^3} \left[ e^{\gamma t} (1 - e^{-3\gamma t}) + 3(e^{-\gamma t} - 1) \right], \quad (3.14a)$$

$$A_1(t) = \frac{1}{4\gamma^4} \left[ 7 + e^{-2\gamma t} - 5e^{-\gamma t} - 3e^{\gamma t} + 2\gamma t (e^{\gamma t} - 1) \right], \quad (3.14b)$$

$$A_2(t) = \frac{1}{4\gamma^5} \left[ 9e^{-\gamma t} - e^{-2\gamma t} + 7e^{\gamma t} + 2\gamma t (\gamma t - 3)(e^{\gamma t} - 1) \right]. \quad (3.14c)$$

En la siguiente sección usaremos la expresión anterior (3.13)

para calcular explícitamente el coeficiente de difusión, D, para la partícula browniana.

### 3.2 COEFICIENTE DE DIFUSION

Sustituyendo la ecuación (3.13) en (3.2) se obtiene

$$D = \frac{G}{2} \lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ \lambda_{\kappa\ell}^{(0)} \frac{e^{\gamma t}}{2\mu^3 t} + \lambda_{\kappa\ell}^{(1)} \left[ \frac{(2\mu t - 3)e^{\gamma t}}{4\mu^4 t} - \frac{1}{2\mu^3} \right] + \lambda_{\kappa\ell}^{(2)} \left[ \frac{(7 - 6\mu t + 2\mu^2 t^2)e^{\gamma t} - 2\mu^2 t^2}{4\mu^5 t} + \frac{3}{2\mu^4} \right] \right\} \delta_{\kappa\ell} . \quad (3.15)$$

Nótese que al tomar el límite indicado en esta ecuación, se obtienen términos divergentes de la forma

$$t , \quad (3.16a)$$

$$e^{\gamma t} , \quad (3.16b)$$

$$te^{\gamma t} , \quad (3.16c)$$

$$\frac{1}{t} e^{\gamma t} , \quad (3.16d)$$

lo cual sugiere que el coeficiente de difusión no puede ser calculado de esta manera.

Por otro lado, sabemos que el efecto de disipación de energía que tiene lugar durante el movimiento de un fluido, se debe

a la fricción interna o viscosidad, la cual induce un calentamiento del fluido. Puede demostrarse<sup>(23)</sup> que para nuestro modelo, la variación temporal de la temperatura del fluido, para tiempos largos (a nivel microscópico), está gobernada por la siguiente ecuación de calentamiento

$$T(t) = \text{cte. } e^{-\gamma t} . \quad (3.17)$$

Si suponemos que para el fluido en consideración la disipación viscosa es despreciable, podemos eliminar formalmente el efecto del calentamiento introduciendo una nueva escala de tiempo por medio de la transformación

$$t' = \frac{1}{\gamma} ( 1 - e^{-\gamma t} ), \quad (3.18)$$

en donde  $t' \rightarrow 1/\gamma$  cuando  $t \rightarrow \infty$ . Claramente, esto no implica que el sistema esté en un estado de equilibrio, pues la presencia de  $a_{ij}$ , el tensor razón de corte, lleva al sistema a un estado fuera de equilibrio no estacionario. Limitado únicamente por las condiciones de las ecuaciones (1.10), es decir, las ecuaciones de movimiento reptante.

En esta nueva escala temporal y después de tomar el límite, el coeficiente de difusión (3.15) queda como

$$D = \frac{\kappa_B T}{2m\gamma^2} \left[ \left( \frac{3}{\gamma} - 1 \right) a_{i\kappa} a_{i\kappa} - 2a_{i\kappa} \delta_{i\kappa} \right] . \quad (3.19)$$

Nótese que esta expresión depende explícitamente del tensor razón de corte así como también contiene los efectos de la presencia

cia de la pared a través del coeficiente de fricción,  $\gamma$ , dado por (1.34). Para el caso particular de un fluido sin fronteras sabemos que el coeficiente de fricción está dado por

$$\gamma = 6\pi\mu cm^{-1}, \quad (3.20)$$

de manera que el coeficiente de difusión,  $D_\infty$ , para una partícula browniana esférica moviéndose en un fluido sin fronteras en flujo cortante uniforme, es

$$D_\infty = \frac{m k_B T}{2(6\pi\mu c)^2} \left[ \left( \frac{m}{2\pi\mu c} - 1 \right) a_{ik} a_{ik} - 2a_{ik} \delta_{ik} \right]. \quad (3.21)$$

Para el caso de interés, de la expresión (1.34) se tiene que

$$\gamma = \left( \frac{1}{l - \kappa c} \right) 6\pi\mu c m^{-1}, \quad (3.22)$$

con lo que el coeficiente de difusión,  $D$ , resulta ser

$$D = \frac{m k_B T}{2(6\pi\mu c)^2} \left( 1 - \frac{\kappa c}{l} \right)^2 \left\{ \left[ \frac{m}{2\pi\mu c} \left( 1 - \frac{\kappa c}{l} \right) - 1 \right] a_{ik} a_{ik} - 2a_{ik} \delta_{ik} \right\}. \quad (3.23)$$

Finalmente, las correcciones al coeficiente de difusión de una partícula browniana esférica moviéndose a través de un fluido viscoso en flujo cortante uniforme en la vecindad de un plano sólido infinito, son

$$\frac{D}{D_\infty} = \left( 1 - \frac{\kappa c}{l} \right)^2 \left\{ \frac{\left[ \frac{m}{2\pi\mu c} \left( 1 - \frac{\kappa c}{l} \right) - 1 \right] a_{ik} a_{ik} - 2a_{ik} \delta_{ik}}{\left( \frac{m}{2\pi\mu c} - 1 \right) a_{ik} a_{ik} - 2a_{ik} \delta_{ik}} \right\}, \quad (3.24)$$

en donde,  $a_{ik}$  es el tensor razón de corte dado por (2.2) y los demás parámetros están definidos después de la ecuación (1.30). Obsérvese la dependencia de la ecuación anterior con respecto a los parámetros  $k$  y  $l$ , que representan, respectivamente, la influencia de la pared y la distancia de la partícula a ésta.

Para obtener la gráfica de la expresión anterior vamos a utilizar un tipo particular de flujo cortante uniforme, a saber: flujo cortante plano dado por

$$a_{ik} = a \delta_{ix} \delta_{ky} , \quad (3.25)$$

en donde  $a = ( a_{ik} a_{ik} )^{1/2}$  es la magnitud del tensor razón de corte. Escogemos un sistema de referencia en el que las líneas de corriente van en la dirección del eje  $x$ , los gradientes de velocidad apuntan en la dirección del eje  $y$ , y la pared se encuentra paralelamente al plano  $xz$ , fig.1. Además, debido a que no tenemos datos experimentales sobre este trabajo, usaremos los siguientes valores típicos <sup>(24,25)</sup> para los parámetros que aparecen en la ecuación (3.24):

$$c = 1 \mu\text{m}$$

$$l = \text{de } 1 \mu\text{m a } 200 \mu\text{m}$$

$$U \cong 50 \mu\text{m/seg}$$

$$\mu = 0.01 \text{ gr/cm-sec (solución acuosa a } 20^\circ\text{C}^{(26)})$$

$$k = 9/16 \text{ (plano sólido infinito}^{(13)})$$

$$m \cong 1 \text{ gr (esferas de polyvinyl tolueno latex)}$$

$$a \cong \text{de } 2 \text{ a } 30 \text{ seg}^{-1} \text{ (condición típica de microtubo)}$$

Cabe mencionar que estos 'valores típicos' se utilizan corrientemente en una técnica experimental conocida como "la técnica de microtubo", técnica usada entre otras cosas<sup>(6,25)</sup>, para observar los movimientos e interacciones de partículas individuales y de agragados. La gráfica correspondiente se muestra en la figura 2.

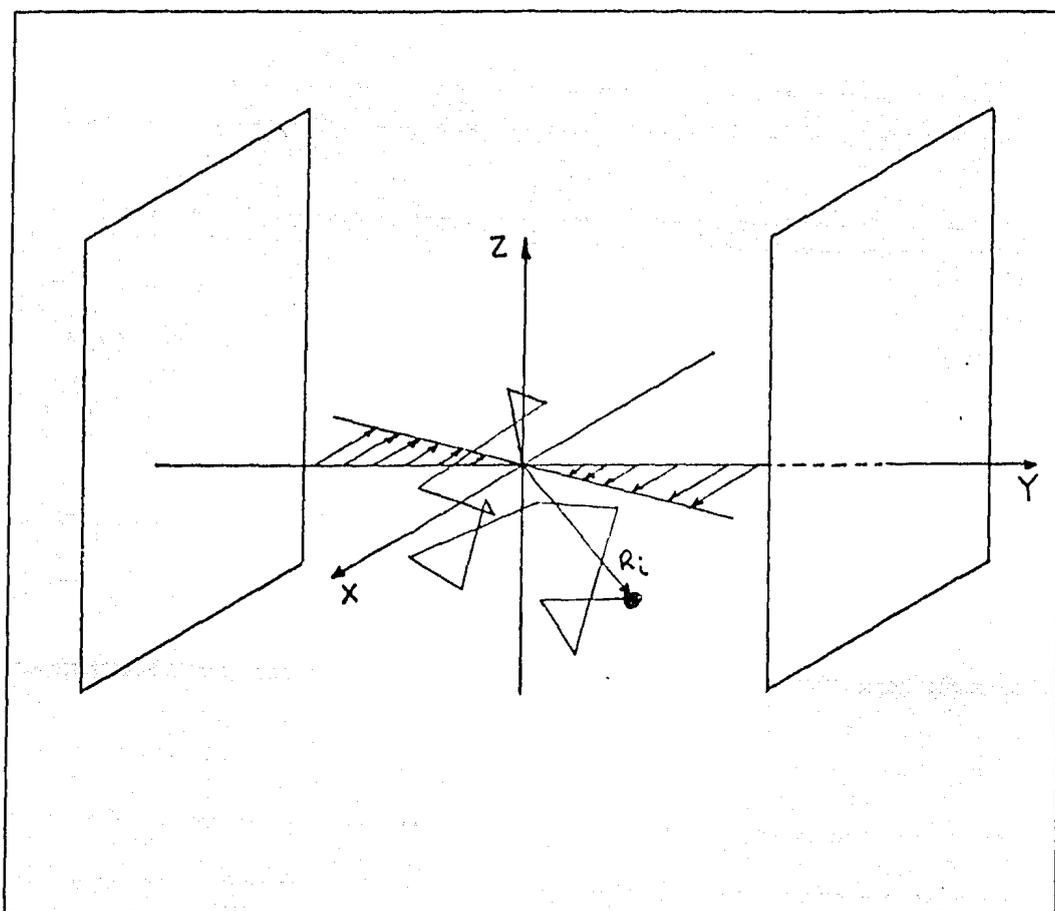


Fig.1 El sistema.

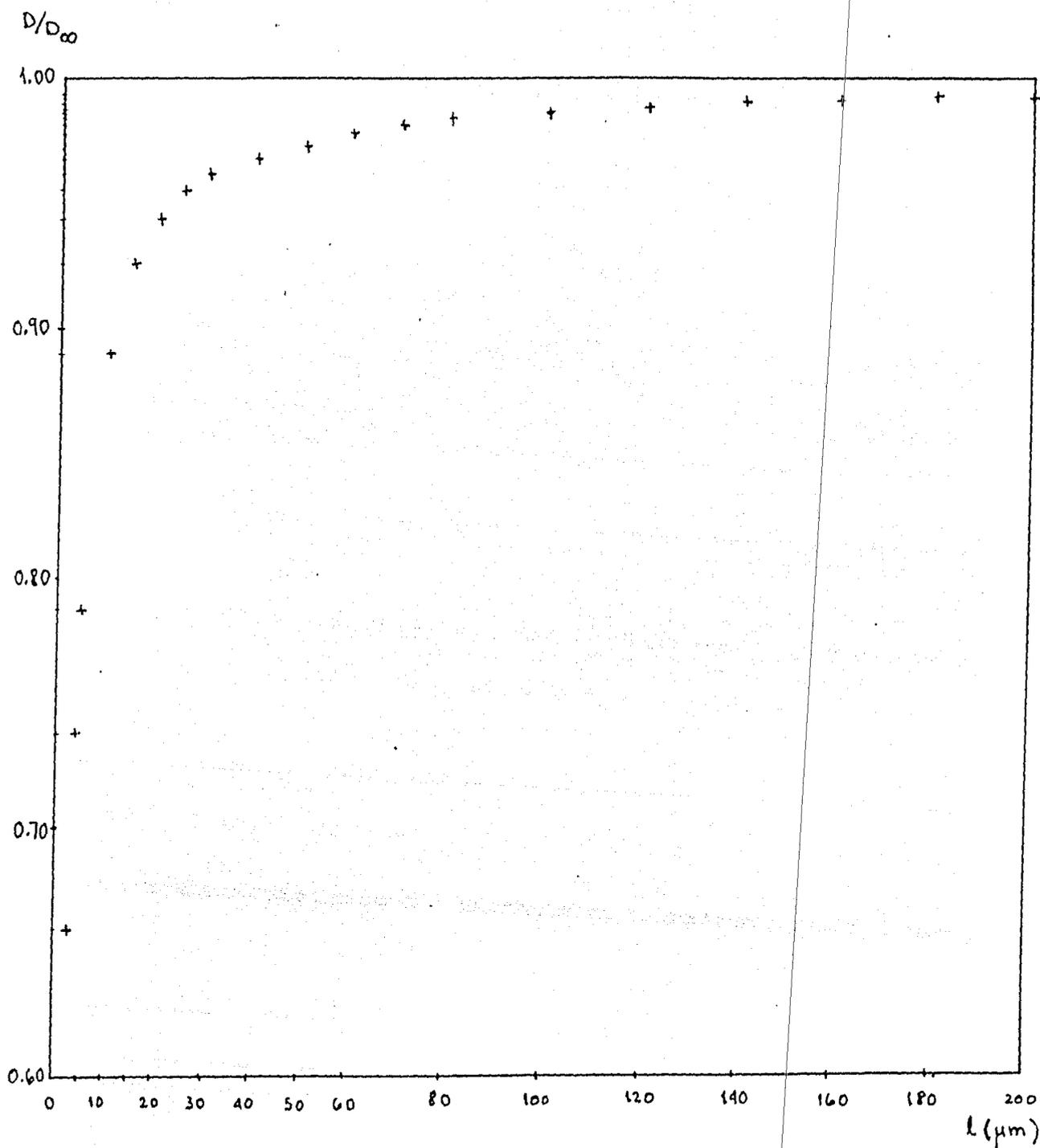


Fig.2 Gráfica de las correcciones al coeficiente de difusión  $D/D_{\infty}$  como función de la separación entre la partícula y la pared.

## CAPITULO IV

### DISCUSION Y CONCLUSIONES

Como puede notarse en la gráfica anterior, la presencia de la pared afecta significativamente al coeficiente de difusión de una partícula browniana de forma esférica que se mueve a través de un fluido viscoso en flujo cortante uniforme. Asimismo, se aprecia también, en el comportamiento de la gráfica en el extremo derecho, que cuando la partícula se encuentra muy alejada de la pared, el coeficiente de difusión de ésta,  $D$ , tiende al coeficiente de difusión de dicha partícula moviéndose en un medio sin paredes,  $D_{\infty}$ . En el otro extremo, cuando la partícula se mueve en la vecindad de la pared, se observa que para una separación de la pared de tan solo cinco veces el radio de la partícula, el coeficiente de difusión se ve disminuido hasta en un 20% del valor que tendría en un medio sin paredes. Es pues notable la importancia que tiene la influencia de las paredes en el movimiento de partículas en un fluido viscoso, sobre todo en una de sus propiedades de transporte del sistema (en este caso particular, el coeficiente de difusión).

Por otro lado, también se observó que para variaciones del flujo, es decir, para variaciones en la magnitud del tensor razón de corte,  $a_{ik}$ , la forma de la gráfica permaneció prácticamente igual. Esto puede deberse por una parte, a las restricciones que se impusieron sobre este tensor a través de las ecuaciones de movimiento reptante del fluido (1.10). Por otra parte, es un reflejo de la hipótesis de no calentamiento introducida

en la sección 2.3. Es decir, tanto las ecuaciones (1.10) como la hipótesis de que la disipación de energía por viscosidad sea despreciable, implican un valor pequeño de  $a_{ik}$ . Consecuentemente, la influencia de  $a_{ik}$  sobre el comportamiento del sistema no debe ser sustancial, algo que se ha visto reflejado en el comportamiento de  $D$  como función de  $a_{ik}$ .

El modelo empleado en este trabajo es sencillo, en el sentido de que explota al máximo la simetría, tanto de la partícula como de la pared. Esto nos permite trabajar con ecuaciones mucho más sencillas. Además, considera un régimen de flujo tan simple como lo es el flujo cortante uniforme. Sin embargo, nos ha permitido obtener resultados significativos y físicamente plausibles sobre una propiedad de transporte del sistema, el coeficiente de difusión. De hecho, el tratamiento de la influencia de la pared sobre el movimiento de la partícula, es equivalente a un problema en ausencia de fronteras modificado por un coeficiente de fricción equivalente, que se construye a partir de la fórmula de Brenner<sup>(9)</sup>. El método usual<sup>(27)</sup> para describir la influencia de paredes, plantea el problema en términos de una función de distribución de velocidades de la partícula con condiciones a la frontera específicas. Este tratamiento considera un problema de valores iniciales y transforma la situación original en una equivalente pero más simple.

Por otra parte, debemos mencionar que estos resultados sólo son válidos en una escala de tiempo para la cual, la disipación viscosa (es decir, el efecto de calentamiento en el fluido considerado), sea despreciable. Esto, constituye por supuesto una limitación del modelo. No obstante, existen fluidos que presen-

tan, entre otras, esta característica.

Desafortunadamente no se encontraron en la literatura, trabajos que reporten resultados experimentales con los cuales se puedan comparar los resultados obtenidos en este análisis. Aun así, las predicciones de este modelo sencillo sobre el coeficiente de difusión, tienen un significado físico importante: la presencia de paredes afecta significativamente a una de las propiedades de transporte del sistema.

Si bien, por simplicidad, se trabajó en este modelo con una partícula de simetría esférica, se puede en principio, realizar este mismo análisis para cualquier tipo de partícula. Básicamente, esto se verá reflejado en la forma matemática de la fórmula de Brenner, ec. (1.29), y a diferencia de este trabajo en el que el efecto de la pared y la forma de la partícula están contenidos en un parámetro escalar,  $\gamma$ , se tendrá una expresión algo más complicada, lo que probablemente haría difícil encontrar la solución a las ecuaciones de Langevin correspondientes.

Una pregunta interesante para una futura extensión de este trabajo, es la siguiente: ¿cómo se modificaría esta técnica de solución si ahora el fluido fuera no newtoniano? En principio, la fórmula de Brenner parece que ya no tendría aplicación, puesto que la Ley de Stokes ya no se verificaría. Esto nos llevaría a buscar otra forma de corregir la fuerza de Stokes o bien, una fuerza de arrastre correspondiente. Por otro lado, las ecuaciones del movimiento del fluido no estarían dadas por las ecuaciones (1.10), que son lineales, lo que precisamente se explota en este método. Esto hace pensar que el problema sería mucho más complicado y quizás sin solución.

APENDICE A

Singularidad de la matriz A definida por (2.15a)

El determinante de A ,

$$\underline{A} = \begin{pmatrix} \underline{0} & \underline{1} \\ \gamma \underline{a} & -\gamma \underline{1} \end{pmatrix} , \quad (\text{A.1})$$

se puede reescribir como

$$\left\| \begin{array}{cc} \underline{0} & \underline{1} \\ \gamma \underline{a} & -\gamma \underline{1} \end{array} \right\| = \left\| \begin{pmatrix} \underline{0} & \underline{1} \\ \gamma \underline{a} & -\gamma \underline{a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{1} & \underline{x} \\ \underline{0} & \underline{1} \end{pmatrix} \right\| = \left\| \begin{array}{cc} \underline{0} & \underline{1} \\ \gamma \underline{a} & \gamma \underline{ax} - \gamma \underline{1} \end{array} \right\| \quad (\text{A.2})$$

si usamos el método de expansión en cofactores<sup>(28)</sup> que dice que para las matrices X y Y arbitrarias

$$\left\| \begin{array}{cc} \underline{1} & \underline{x} \\ \underline{0} & \underline{1} \end{array} \right\| = \left\| \begin{array}{cc} \underline{1} & \underline{0} \\ \underline{Y} & \underline{1} \end{array} \right\| = \underline{1} , \quad (\text{A.3})$$

pero (A.2) es igual a

$$\left\| \begin{array}{cc} \underline{0} & \underline{1} \\ \gamma \underline{a} & \gamma \underline{ax} - \gamma \underline{1} \end{array} \right\| = \left\| \begin{array}{cc} \underline{0} & \underline{1} \\ \gamma \underline{a} & \underline{0} \end{array} \right\| , \quad (\text{A.4})$$

en donde la última igualdad se sigue de escoger  $\underline{x} = \underline{a}^{-1} \cdot \underline{1}$ . Pero como

$$\left\| \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ \gamma a & 0 \end{array} \right\| = \left\| \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \gamma a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & x \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\| = \left\| \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ \gamma a & \gamma a x \end{array} \right\| = 0, \quad (\text{A.5})$$

concluimos que

$$\text{Det } \underline{A} = 0. \quad (\text{A.6})$$

## APENDICE B

### MOMENTOS Y CORRELACIONES PARA EL SISTEMA(2.6)

Para el caso particular de flujo cortante plano en donde  $\vec{v} = ay\hat{e}_x$ , las ecuaciones de Langevin (2.6) tienen la forma

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} = \gamma ay + X, \quad (\text{B.1a})$$

$$\ddot{y} + \gamma \dot{y} = Y \quad (\text{B.1b})$$

cuyas soluciones son

$$x(t) = \frac{\dot{x}(0)}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t d\tau [1 - e^{-\gamma(t-\tau)}] [\gamma ay(\tau) + X(\tau)], \quad (\text{B.2a})$$

$$y(t) = \frac{\dot{y}(0)}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t d\tau [1 - e^{-\gamma(t-\tau)}] Y(\tau), \quad (\text{B.2b})$$

$$\dot{x}(t) = \dot{x}(0) e^{-\gamma t} + \int_0^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} [\gamma y(\tau) \gamma a + X(\tau)], \quad (\text{B.2c})$$

$$\dot{y}(t) = \dot{y}(0)e^{-\gamma t} + \int_0^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} Y(\tau) \quad (\text{B.2d})$$

Para este sistema tenemos los siguientes momentos y correlaciones. Para la posición

$$\langle x(t) \rangle = \frac{\dot{x}(0)}{\gamma} \left[ e^{-\gamma t} (\gamma t + 1) + (\gamma t - 1) \right], \quad (\text{B.3a})$$

$$\langle y(t) \rangle = \frac{\dot{y}(0)}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}), \quad (\text{B.3b})$$

los momentos  $\langle \dot{x}(t) \rangle$  y  $\langle \dot{y}(t) \rangle$  se pueden obtener si derivamos con respecto a  $t$  las ecuaciones anteriores, respectivamente. Para el desplazamiento cuadrático medio

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle = & \frac{k_B T}{m\gamma^2} \left[ 2\gamma t (1 - e^{-2\gamma t}) - 3(1 - e^{-\gamma t})^2 \right] + \\ & + a^2 \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' [1 - e^{-\gamma(t-\tau)}] [1 - e^{-\gamma(t-\tau')}] \langle y(\tau) y(\tau') \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.4a})$$

$$\langle y^2(t) \rangle = \frac{2k_B T}{m\gamma^2} (\gamma t - 1 + e^{-\gamma t}), \quad (\text{B.4b})$$

para la correlación en la posición se tiene

$$\langle x(t) y(t') \rangle = \begin{cases} \frac{a k_B T}{m\gamma^2} \left\{ e^{-\gamma t} \left[ 2t' - t - \frac{3}{\gamma} + \left(t + \frac{1}{\gamma}\right) e^{\gamma t'} \right] + \frac{3}{\gamma} - t + \right. \\ \left. + e^{-\gamma t'} \left[ t - \frac{1}{\gamma} - \frac{2}{\gamma} e^{2\gamma t'} \right] + 2t' (\gamma t - 1) \right\} & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t'. \end{cases} \quad (\text{B.5a})$$

$$\langle y(t)y(t') \rangle = \begin{cases} \frac{k_B T}{m\gamma^2} [2\gamma t - 1 + e^{-\gamma t'} + e^{-\gamma t} - e^{-\gamma(t-t')}] & \text{si } t > t' \\ 0 & \text{si } t \leq t' \end{cases} \quad (\text{B.5b})$$

$$\langle x(t)x(t') \rangle = \begin{cases} \frac{k_B T}{m\gamma^2} \left\{ e^{-\gamma t'} [\gamma(t'-t) + 3] + e^{-\gamma t} [\gamma(t-t') + 3] + \right. \\ \left. + [\gamma(t+t') + 3][1 - e^{-\gamma(t+t')}] \right\} + \\ + a^2 \int_0^t d\tau \int_0^{t'} d\tau' [1 - e^{-\gamma(t-\tau)}][1 - e^{-\gamma(t'-\tau')}] \langle y(\tau)y(\tau') \rangle & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t' \end{cases} \quad (\text{B.5c})$$

Para las velocidades tenemos las siguientes expresiones

$$\langle \dot{y}(t)\dot{y}(t') \rangle = \begin{cases} \frac{k_B T}{m} e^{-\gamma(t-t')} & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t' \end{cases} \quad (\text{B.6a})$$

$$\langle \dot{x}(t)\dot{x}(t') \rangle = \begin{cases} \frac{k_B T}{m\gamma} \left\{ \gamma [\gamma(t'-t') - (\gamma^2 + a^2)tt' - \frac{3}{2\gamma} a^2(t+t') - \frac{5}{2\gamma^2} a^2] e^{-\gamma(t+t')} + \right. \\ + \frac{a^2}{2} (t'-t - \frac{3}{\gamma}) e^{-\gamma(t-t')} + [t'(2a^2 - \gamma^2) + \frac{4}{\gamma} a^2 + \gamma] e^{-\gamma t'} + \\ \left. + 2a^2 t' - \frac{4a^2}{\gamma} + \gamma + [t(2a^2 - \gamma^2) + \frac{4a^2}{\gamma} - \gamma] e^{-\gamma t} \right\} & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t' \end{cases} \quad (\text{B.6b})$$

$$\langle \dot{x}(t) \dot{y}(t') \rangle = \begin{cases} \frac{2k_B T}{m\gamma} \left\{ \frac{3}{2} e^{-\gamma(t-t')} + [\gamma(t-t') - 2] e^{-\gamma(t-t')} \right. \\ \left. - e^{-\gamma t'} + 2 \right\} & \text{si } t > t' \\ 0 & \text{si } t \leq t' \end{cases} \quad (\text{B.6c})$$

Para las componentes de la posición y las componentes de la fuerza aleatoria se tiene

$$\langle x(t) Y(t') \rangle = \begin{cases} \frac{2ak_B T}{m} \left\{ (t-t') [1 + e^{-\gamma(t-t')}] + \frac{2}{\gamma} [e^{-\gamma(t-t')} - 1] \right\} & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t' \end{cases} \quad (\text{B.7a})$$

$$\langle x(t) X(t') \rangle = \begin{cases} \frac{2k_B T}{m} [1 - e^{-\gamma(t-t')}] & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t' \end{cases} \quad (\text{B.7b})$$

$$\langle y(t) Y(t') \rangle = \begin{cases} \frac{2k_B T}{m} [1 - e^{-\gamma(t-t')}] & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t' \end{cases} \quad (\text{B.7c})$$

$$\langle y(t) X(t') \rangle = 0 \quad (\text{B.7d})$$

Las funciones de correlación entre las componentes de la velocidad y la fuerza aleatoria son

$$\langle \dot{x}(t) X(t') \rangle = \begin{cases} \frac{2k_B T}{m} \mu e^{-\mu(t-t')} & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t'. \end{cases} \quad (\text{B.8a})$$

$$\langle \dot{x}(t) Y(t') \rangle = \begin{cases} \frac{2k_B T}{m} a \left\{ 1 - [1 + \mu(t-t')] e^{-\mu(t-t')} \right\} & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t'. \end{cases} \quad (\text{B.8b})$$

$$\langle \dot{y}(t) Y(t') \rangle = \begin{cases} \frac{2k_B T}{m} \mu e^{-\mu(t-t')} & \text{si } t > t', \\ 0 & \text{si } t \leq t'. \end{cases} \quad (\text{B.8c})$$

$$\langle \dot{y}(t) X(t') \rangle = 0 \quad (\text{B.8d})$$

## REFERENCIAS

1. Birkhoff, G. 1950 Hydrodynamics. (Princeton Univ. Press)
2. Brenner, H. 1962 J. Fluid Mech. 12: 35
3. Goldsmith, H.L. & Mason, S.G. 1962 J. Coll. Int. Sci. 57:312
4. Saffman, P.G. 1976 J. Fluid Mech. 73:593
5. Vadas, E.B. et al 1976 J. Coll. Int. Sci. 57:308
6. Brenner, H. & Gaydos, L.J. 1977 J. Coll. Int. Sci. 58:312
7. Soo, S.L. 1967 Fluid Dynamics of Multiphase Systems (Blais.)
8. Ven, T.G.M. van de 1977 J. Coll. Int. Sci. 62:352
9. Brenner, H. 1964 J. Fluid Mech. 18:144
10. Happel, J. & Brenner, H. 1968 Low Reynolds Number Hydrodynamics (Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J.)
11. Williams, W.E. 1966 J. Fluid Mech. 24-II:285
12. Lorentz, H.A. 1906 Abhandlungen Theoretische Physik 1:23
13. Oseen, C.W. 1927 Nueure Methoden und Ergebnisse in der Hydrodynamik (leipzig, Akademische Verlagsgschaft)
14. Goertzel, G. & Tralli, N. 1960 Some Mathematical Methods of Physics (McGraw-Hill, New York) Cap. 12  
Morse, P.M. & Feshbach, H. 1953 Methods of Theoretical Physics (McGraw-Hill, New York) Cap. 7
15. Currie, I.G. 1974 Fundamentals of Fluid Mechanics (McGraw-Hill, New York) Cap.1
16. Chandrasekhar, S. 1943 Rev. Mod. Phys. 15:1
17. Stratonovich, I. & Stratonovich, R.L. 1963 Topics in the Theory of Random Noise, Vol.I (R.A. Silverman Transl. Gordon and Breach, New York)
18. Wang, M.Ch. & Uhlenbeck, G.E. 1945 Rev. Mod. Phys. 17:323

19. Haken, H. 1975 Rev. Mod. Phys. 47-I:110
20. Kampen, N.G. van 1983 Stochastic Processes in Physics and Chemistry (north Holland, Amsterdam)
21. San Miguel, M. & Sancho, J.M. 1979 Physica 99A:357
22. Sadovnikov, B.I. & Inozemtseva, N.G. 1978 Physica 94A:615
23. Ortega, M.B. 1984 Solución Aproximada de la Ecuación de Boltzman para Flujo de Couette. Tesis (Licenciatura) Fac. de Ciencias, U.N.A.M.
24. Foister, R.T. & Ven, T.G.M. van de 1980 J. Fluid Mech. 96-I:105
25. Vadas, E.B. et al 1973 J. Coll. Int. Sci. 43:630
26. Landau, L.D. & Lifshitz, E.M. 1959 Fluid Mechanics (Pergamon Press, Oxford)
27. Ven, T.G.M. van de 1977 J. Coll. Int. Sci. 62-II:352
28. Flinkeiner, D.T. 1960 Introduction to Matrices and Linear Transformations (Freeman, San Francisco) Cap.5