1. Ecuaciones de continuidad generalizadas

La ecuación de continuidad genérica deducida ayer es

$$\partial_t(n < \chi >) + \partial_i(n < v_i\chi >) - n < \partial_t\chi > -n < v_i\partial_i\chi > -\frac{nF_i}{m} < \frac{\partial\chi}{\partial v_i} >= 0, \tag{1}$$

siendo χ una cantidad conservada cualquiera en una colisión elástica entre dos partículas. Los promedios están realizados con respecto a las velocidades, y todas las cantidades que están escritas pueden depender de t y de las coordenadas x_i. Pero cabe recordar lo siguiente, estamos trabajando en el formalismo hamiltoniano, y por lo tanto t, x_i y v_i *se derivan en forma independiente.*

1.1. Continuidad del "1"

Tomemos $\chi = 1$. Entonces la ecuación anterior especializada para este caso es simplemente

$$\partial_t n + \partial_i(n < v_i >) = 0.$$

Si denotamos $u_i =< v_i >$ tenemos

$$\partial_t n + \partial_i(nu_i) = 0. \tag{2}$$

Si multiplicamos esta ecuación por la carga e y definimos $\rho = en$ obtenemos la famosa ecuación de continuidad del electromagnetismo

$$\partial_t\rho + \partial_i(\rho u_i) = 0.$$

Si multiplicamos por la masa queda la ecuación análoga de conservación de masa de mecánica de fluídos. El sentido físico de esta ecuación es transparente.

1.2. Continuidad del momento lineal

Tomemos ahora $\chi_j = v_j - u_j$ siendo $u_j =< v_j >$, como en la sección anterior. Obviamente χ_j se conserva en una colisión y además tenemos la ventaja que $< \chi_j >= 0$, lo último ayuda a simplificar los cálculos. Teniendo en cuenta que $v_j = \chi_j + u_j$ la ecuación de continuidad (1) para este caso viene dada por

$$\partial_t(n < \chi_j >) + \partial_i(n < (\chi_i + u_i)\chi_j >) - n < \partial_t\chi_j > -n < (\chi_i + u_i)\partial_i\chi_j > -\frac{nF_i}{m} < \frac{\partial\chi_j}{\partial v_i} >= 0.$$

El *primer término* se anula porque, como recién señalamos, $< \chi_j >= 0$. El *segundo término* puede elaborarse de la siguiente manera

$$\partial_i(n < (\chi_i + u_i)\chi_j >) = \partial_i(n < \chi_i\chi_j >) + \partial_i(n < u_i\chi_j >).$$

Pero u_j ya es un promedio por definición y por lo tanto podemos sacarlo fuera del $<>$, con lo cual la última expresión es

$$\partial_i(n < (\chi_i + u_i)\chi_j >) = \partial_i(n < \chi_i\chi_j >) + \partial_i(nu_i < \chi_j >) = \partial_i(n < \chi_i\chi_j >)$$

en el último paso tuvimos de nuevo en cuenta que $< \chi_j >= 0$. Si introducimos el tensor de presiones $P_{ij} = mn < \chi_i\chi_j >$ la última expresión queda

$$\partial_i(n < (\chi_i + u_i)\chi_j >) = \frac{1}{m}\partial_i P_{ij},$$

o sea que viene dada por la "divergencia"del tensor de presiones. Para elaborar el *tercer término* es importante que recordar que estamos trabajando en un formalismo hamiltoniano (la ecuación de Liouville involucra corchetes de Poisson por ejemplo) y por lo tanto t, v_i y x_i son variables ïndependientes". Esto no quiere decir que v_i no dependa de x_i o de t, pero en este formalismo las derivamos independientemente. Entonces el tercer término queda

$$-n < \partial_t \chi_j >= -n < \partial_t v_j > +n < \partial_t u_j >= n\partial_t u_j,$$

donde pusimos $\partial_t v_j = 0$. Esto no implica que v_j no pueda variar en el tiempo, sino que estamos en el formalismo hamiltoniano. El *cuarto término* puede escribirse como

$$-n < (\chi_i + u_i)\partial_i \chi_j >= n < (\chi_i + u_i)\partial_i u_j >= n < v_i > \partial_i u_j = n u_i \partial_i u_j,$$

donde de nuevo usamos que v_i y x_i son variables independientes y que u_j ya es un promedio y sale afuera de $<>$. Además usamos que $< v_i >= u_j$. El *quinto término* es simplemente

$$-\frac{nF_i}{m} < \frac{\partial \chi_j}{\partial v_i} >= -\frac{nF_i}{m}\delta_{ij}.$$

Si colectamos los cinco términos obtenidos nuestra ecuación de continuidad sería

$$n\partial_t u_j + n u_i \partial_i u_j + \frac{1}{m}\partial_i P_{ij} - \frac{nF_j}{m} = 0.$$

Esta es la ecuación buscada, pero suele expresarse introduciendo la derivada material (o derivada total con respecto al tiempo)

$$D_t = \partial_t + u_i \partial_i,$$

con lo cual toma la forma

$$nD_t u_i = \frac{nF_j}{m} - \frac{1}{m}\partial_i P_{ij}, \tag{3}$$

la cual es esencialmente la ecuación de Euler que se ve en mecánica de fluídos. La derivada total con respecto al tiempo de la velocidad (aceleración) de un elemento del fluído viene dada por las fuerzas externas y por derivadas parciales del tensor de presiones del mismo fluído.

1.3. Continuidad de la energía

Tomamos ahora la energía cinética

$$\chi = \frac{m}{2}|v-u|^2.$$

Es un poco laborioso, pero no es difćil chequear que esta cantidad se conserva en las colisiones entre dos partículas. Entonces la ecuación de continuidad queda

$$\frac{1}{2}\partial_t(nm < |v-u|^2 >) + \frac{1}{2}\partial_i(nm < v_i|v-u|^2 >) - \frac{1}{2}nm < \partial_t|v-u|^2 >$$

$$-\frac{1}{2}nm < v_i\partial_i|v-u|^2 > -\frac{F_i}{2} < \frac{\partial|v-u|^2}{\partial v_i} >= 0$$

El *primer término* puede interpretarse en términos de una temperatura local $T(x)$, dado que es una energía cinética media local. Este término puede escribirse como

$$\frac{1}{2}\partial_t(nm < |v-u|^2 >) = \frac{1}{3}\partial_t(nkT).$$

El *segundo término* de esta ecuación también tiene un significado físico bastante transparente. Lo podemos escribir como

$$\frac{1}{2}\partial_i(nm < v_i|v-u|^2 >) = \frac{1}{2}\partial_i(nm < (v-u)_i|v-u|^2 >) + \partial_i(nm < u_i|v-u|^2 >)$$

pero como u_i es por definición un promedio lo podemos sacar afuera del $<>$ del segundo término para obtener

$$\frac{1}{2}\partial_i(nm < v_i|v-u|^2 >) = \frac{1}{2}\partial_i(nm < (v-u)_i|v-u|^2 >) + \partial_i(nmu_i < |v-u|^2 >)$$

Es natural interpretar al segundo miembro en términos de la temperatura local $T(x)$, dado que es el valor medio de la energía cinética en un punto dado, y es natural intepretar al primero como un flujo de energía o densidad de corriente calorífica q_i, por lo tanto podemos escribir al segundo término como

$$\frac{1}{2}\partial_i(nm < v_i|v-u|^2 >) = \partial_i(q_i + \frac{3}{2}nkT(x)).$$

El *cuarto término* puede elaborarse escribiendo

$$-\frac{1}{2}nm < v_i\partial_i|v-u|^2 >= -\frac{1}{2}nm < v_i\partial_i(v-u)_j(v-u)_j >,$$

pero como estamos en un formalismo hamiltoniano en la cual las velocidades y las posiciones son variables independientes cuando derivamos con respecto a x_j la velocidad v_i se interpreta como constante, entonces tenemos

$$-\frac{1}{2}nm < v_i\partial_i|v-u|^2 >= nm < v_i(v-u)_j\frac{\partial u_j}{\partial x^i} > .$$

Pero además u_j ya es un valor medio, y lo podemos sacar afuera del promedio

$$-\frac{1}{2}nm < v_i\partial_i|v-u|^2 >= nm < v_i(v-u)_j > \frac{\partial u_j}{\partial x^i}$$

$$= nm\Big[< (v-u)_i(v-u)_j > + u_i < (v-u)_j > \Big]\frac{\partial u_j}{\partial x^i}$$

Pero el segundo término del lado izquierdo vale cero ya que vimos que $< (v-u)_j >= 0$ en la sección anterior. Entonces finalmente tenemos

$$-\frac{1}{2}nm < v_i\partial_i|v-u|^2 >= nm < (v-u)_i(v-u)_j > \frac{\partial u_j}{\partial x^i}$$

Definamos ahora los tensores simétricos

$$P_{ij} = nm < (v-u)_i(v-u)_j >, \qquad 2D_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x^i} + \frac{\partial u_i}{\partial x^j}$$

el primero es el tensor de presiones y el segundo la variación del tensor de deformaciones. Con estas definiciones el cuarto término quedaría entonces

$$-\frac{1}{2}nm < v_i\partial_i|v-u|^2 >= P_{ij}D_{ij}$$

El tercer y el quinto término son nulos. Esto puede verse explícitamente ya que el tercero da

$$\frac{1}{2}nm < \partial_t|v-u|^2 >= -nm < (v-u)_i\partial_t u_i >= -nm < (v-u)_i > \partial_t u_i = 0$$

donde recordamos que u_i es un promedio y que $< (v-u)_i >= 0$. El quinto término a su vez es

$$\frac{F_i}{2} < \frac{\partial|v-u|^2}{\partial v_i} >= F_i < (v-u)_i >= 0$$

Entonces si colectamos los términos no nulos se obtiene

$$\frac{3}{2}\partial_t(nkT) + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{3}{2}\frac{\partial(nkTu_i)}{\partial x_i} + P_{ij}D_{ij} = 0.$$

Esto ya casi estaría terminado, pero para que quede la expresión que suele aparecer en los textos hagamos un último truco. Desarrollemos el primer y tercer término para obtener

$$\frac{3}{2}kT\Big[\partial_t n + \frac{3}{2}\frac{\partial(nu_i)}{\partial x_i}\Big] + \frac{3}{2}nk\partial_t T + \frac{3}{2}nku_i\partial_i T + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + P_{ij}D_{ij} = 0.$$

Ahora bien, la cantidad entre corchetes es cero por la ecuación de continuidad de la masa deducida anteriormente ($\chi = 1$). Los dos términos que le siguen son proporcionales a la derivada material de la temperatura, es decir que finalmente nos queda

$$\frac{3}{2} nkD_t T = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} - P_{ij} D_{ij}. \tag{4}$$

Esta es la fórmula usual en los libros de texto.

Para finalizar es importante destacar que tanto q_i como $< P_{ij} >$ no quedan determinados por estas ecuaciones de continuidad. Se pueden determinar fenomenológicamente o calcularse mediante las ecuaciones de Boltzmann teniendo en cuenta el espectro de las excitaciones del sistema, como en los demás ejercicios de la guía.