

Física Teórica 3 – primer cuatrimestre de 2024

Transporte y ecuación de Boltzmann

LA GUÍA 4 COMENTADA*

Función de distribución, densidades y corrientes

El primer paso es introducir la función de distribución para una partícula y definir densidades. La función de distribución $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ determina el número medio de partículas en el elemento de volumen $d^3r d^3p$ del espacio de $\mathbf{r}\mathbf{p}$ de una partícula, donde $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$,

$$dN(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d^3p. \quad (1)$$

Si se integra en todo el espacio $\mathbf{r}\mathbf{p}$, se obtiene el número total de partículas,

$$N = \int d^3r d^3p f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (2)$$

Este no es un número medio. La ecuación anterior es simplemente la expresión de que las probabilidades suman uno. Si se integra sólo sobre el impulso, se obtiene el número medio de partículas en el elemento de volumen d^3r ,

$$dN(\mathbf{r}, t) = \left[\int d^3p f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \right] d^3r. \quad (3)$$

Por lo tanto, la densidad media de partículas es

$$n(\mathbf{r}, t) = \frac{dN(\mathbf{r}, t)}{d^3r} = \int d^3p f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (4)$$

En lo que sigue no insistiremos con el calificativo *medio*, que se dará por entendido.

Supongamos que, asociada a cada partícula, hay una cantidad aditiva que es función de la posición, del impulso y del tiempo; digamos, $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. Es decir, una partícula en la posición \mathbf{r} , con impulso \mathbf{p} y a tiempo t posee un valor $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ de cierta magnitud física aditiva. Convendrá llamar a esta magnitud física con un símbolo distinto; por ejemplo, G . La función γ puede ser, por caso, el número de partículas (que para una partícula es igual a uno), la masa, la carga eléctrica, el impulso lineal, la energía cinética, la energía potencial, etc. El valor total de la magnitud G en el elemento $d^3r d^3p$ del espacio $\mathbf{r}\mathbf{p}$ es igual al número de partículas en ese elemento por el valor de G que posee cada partícula,

$$dG(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) dN(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d^3p. \quad (5)$$

Integrando sobre el impulso, se obtiene el valor total de G contenido en el elemento de volumen d^3r , irrespectivamente del impulso de las partículas,

$$dG(\mathbf{r}, t) = \left[\int d^3p \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \right] d^3r. \quad (6)$$

*zanellaj@df.uba.ar

Así, la densidad volumétrica de la magnitud G en el punto \mathbf{r} y en el instante t es

$$g(\mathbf{r}, t) = \frac{dG(\mathbf{r}, t)}{d^3r} = \int d^3p \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (7)$$

Ejemplos de estas densidades son la densidad de partículas, la densidad de impulso lineal y la densidad de energía cinética:

$$\begin{cases} n(\mathbf{r}, t) = \int d^3p f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \\ \boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \\ \epsilon(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \frac{p^2}{2m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \end{cases} \quad (8)$$

Ahora vamos a introducir valores medios por partícula, lo que es adecuado para definir cantidades no aditivas, como la velocidad. Si una partícula tiene velocidad \mathbf{v}_1 y otra partícula tiene velocidad \mathbf{v}_2 , no decimos que la velocidad total es $\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2$, pero sí decimos que la velocidad media por partícula es $\frac{1}{2}(\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2)$.

El número de partículas que hay en el elemento de volumen d^3r está dado por la Ec. (3). Puesto que en ese elemento de volumen el valor total de la magnitud física G es

$$dG(\mathbf{r}, t) = \left[\int d^3p \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \right] d^3r, \quad (9)$$

el valor medio por partícula de la magnitud G será entonces

$$\bar{G}(\mathbf{r}, t) = \frac{dG(\mathbf{r}, t)}{dN(\mathbf{r}, t)} = \frac{\int d^3p \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{n(\mathbf{r}, t)} = \frac{g(\mathbf{r}, t)}{n(\mathbf{r}, t)}. \quad (10)$$

Hay magnitudes físicas que se caracterizan mejor por sus valores medios por partícula que por su densidad. Por ejemplo, la densidad de impulso lineal es

$$\boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (11)$$

El valor medio del impulso por partícula es

$$\bar{\boldsymbol{\pi}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}, t)}{n(\mathbf{r}, t)} = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int d^3p \mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (12)$$

Si cada partícula tiene en promedio un impulso $\bar{\boldsymbol{\pi}}$, tiene en promedio una velocidad

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m} \bar{\boldsymbol{\pi}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (13)$$

Esta es una función muy importante: es la velocidad macroscópica del fluido como función de la posición y del tiempo.

A cada densidad corresponde una densidad de corriente. Consideremos el elemento de volumen d^3r . La densidad de partículas en ese elemento que tienen un impulso lineal en el elemento de volumen d^3p es

$$dn(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d^3p. \quad (14)$$

Si las partículas tienen asociado un valor $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ de la magnitud G , la densidad de la magnitud G debida a las partículas que tienen impulsos en el elemento de volumen d^3p es

$$dg(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)dn(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d^3p. \quad (15)$$

La densidad de corriente de una dada magnitud es igual a la densidad de esa magnitud por la velocidad de las partículas que la transportan. Así, las partículas en el elemento de volumen d^3p contribuyen a la densidad de corriente de la magnitud G en una cantidad

$$dj_G(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{\mathbf{p}}{m} dg(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{\mathbf{p}}{m} \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d^3p. \quad (16)$$

Integrando sobre el impulso, obtenemos la densidad total de corriente de la magnitud G ,

$$\mathbf{j}_G(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (17)$$

Las densidades de corriente que nos van a importar principalmente son la densidad corriente de partículas, la densidad de corriente de impulso y la densidad de corriente de energía cinética. La densidad de corriente de partículas es

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (18)$$

Aquí la cantidad $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ que posee cada partícula es igual a uno. En el censo de las partículas, cada partícula cuenta como una partícula. La densidad de corriente de energía cinética es

$$\mathbf{j}_\epsilon(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (19)$$

Las magnitudes escalares tienen densidades de corrientes vectoriales. Las magnitudes vectoriales dan lugar a corrientes tensoriales. Por ejemplo, en el caso del impulso lineal, tenemos una densidad de corriente por cada componente del impulso: una partícula que atraviesa un elemento de superficie transporta impulso en las tres direcciones. De esta forma, la densidad de corriente de la componente i del impulso es

$$j_i(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} p_i f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (20)$$

La información contenida en esta ecuación se representa mejor de manera tensorial, definiendo

un tensor cuyas componentes cartesianas son

$$\Theta_{ij}(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{p} \frac{p_i p_j}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (21)$$

Θ_{ij} es la componente j de la densidad de corriente de la componente i del impulso. Este tensor es simétrico. Para independizarnos de las coordenadas cartesianas, podemos usar la notación de diadas, y definir el tensor sin referencia a ninguna base en particular,

$$\Theta(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (22)$$

El hecho de que las corrientes \mathbf{j} y \mathbf{j}_e sean vectores (circunstancia esta que en realidad no demostramos) y de que Θ sea un tensor es consecuencia de que la función de distribución es un escalar. La demostración se deja como ejercicio.

La ecuación de transporte de Boltzmann

La función de distribución satisface una ecuación de transporte, cuya forma general, para un fluido de partículas con interacciones de corto alcance, es

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}}. \quad (23)$$

Aquí $\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ es la fuerza externa que actúa sobre las partículas; \mathbf{F} puede ser, por ejemplo, la fuerza de Lorentz debida a un campo externo. La forma de la ecuación de transporte es general: es la expresión diferencial de la conservación de la probabilidad en el espacio $\mathbf{r}\mathbf{p}$ de una partícula. Las aproximaciones aparecen al escribir el término de colisiones. En la ecuación de transporte de Boltzmann, el término de colisiones se aproxima por

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = & \int d^3\mathbf{p}'_1 d^3\mathbf{p}'_2 d^3\mathbf{p}_2 \delta^3(\mathbf{p} + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2) \delta(p^2 + p_2^2 - p'^2_1 - p'^2_2) \\ & \times |T_{fi}(\mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2)|^2 \left[f(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_2, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_1, t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \right]. \end{aligned} \quad (24)$$

Todas las funciones f están evaluadas en el punto \mathbf{r} y en el instante t . Los choques se consideran eventos puntuales. Dentro de la integral, T_{fi} posee ciertas propiedades de simetría fundamentales. En esencia, T_{fi} contiene información sobre la geometría de las colisiones binarias, que son las únicas que se tienen en cuenta.

El término de colisiones es un término de ganancia-pérdida. Partículas con impulsos \mathbf{p}'_1 y \mathbf{p}'_2 chocan y una de ellas adquiere impulso \mathbf{p} , o más propiamente, en el elemento de volumen $d^3\mathbf{p}$ alrededor de \mathbf{p} . La frecuencia con la que ocurren esos choques se asume proporcional al producto de las densidades $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_1, t)$ y $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_2, t)$, como si la probabilidad de encontrar dos partículas en esos puntos del espacio $\mathbf{r}\mathbf{p}$ fuera simplemente el producto de las probabilidades. Del mismo modo, una partícula con impulso \mathbf{p} choca con una partícula con impulso \mathbf{p}_2 y terminan con impulsos \mathbf{p}'_1 y \mathbf{p}'_2 . La frecuencia de estos choques

también se asume proporcional al producto de las densidades $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ y $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2, t)$, como si la probabilidad de encontrar una partícula en el elemento de volumen $d^3r d^3p$ fuera independiente de la presencia o no de otra partícula en el elemento $d^3r d^3p_2$. Esta factorización de la probabilidad conjunta se conoce como hipótesis del caos molecular, y es uno de los puntos más sutiles y más falsamente inocentes de la ecuación de Boltzmann.

Leyes de conservación

Si una cantidad $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, asociada a cada partícula, se conserva en las colisiones binarias, es decir, si $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_1) + \chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_2) = \chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2)$, entonces es posible deducir leyes de conservación para las soluciones de la ecuación de Boltzmann. Aquí resultan fundamentales las propiedades de simetría de la función T_{fi} dentro del término de colisiones (24). La forma de estas leyes es la siguiente (Huang, §5.3):

$$\int d^3p \chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla + \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \right] f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0. \quad (25)$$

Debería ser evidente que la demostración de la Ec. (25) se reduce a verificar que, para el término de colisiones de la ecuación de Boltzmann,

$$\int d^3p \chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0. \quad (26)$$

Las leyes de conservación que se deducen de la expresión (25) son leyes de conservación macroscópicas. Hay tres leyes de conservación fundamentales, que están asociadas, respectivamente, a la conservación microscópica del número de partículas, del impulso lineal y de la energía. Cada uno de estos casos corresponde a tomar $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 1$, $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{p}$ y $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = p^2/2m$. Demostraremos que estas leyes de conservación se escriben como

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \\ \frac{\partial \boldsymbol{\pi}}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{\Theta} = n \langle \mathbf{F} \rangle, \\ \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_\epsilon = n \left\langle \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \mathbf{F} \right\rangle, \end{cases} \quad (27)$$

donde

$$\mathbf{j} = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f, \quad \Theta_{ij} = \int d^3p \frac{p_i p_j}{m} f, \quad \epsilon = \int d^3p \frac{p^2}{2m} f, \quad \mathbf{j}_\epsilon = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} f. \quad (28)$$

Además, hemos adecuado un poco la notación para el valor medio por partícula,

$$\langle g \rangle(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int d^3p g(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (29)$$

Veamos caso por caso. Asumiremos que la fuerza externa es tal que $\nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = 0$; en particular, deberían demostrar que esta condición incluye a la fuerza de Lorentz.

Conservación del número de partículas

La ley de conservación más elemental es la del número de partículas. La función $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 1$ lleva la cuenta del número de partículas que corresponde a una partícula; a saber, uno. Antes de la colisión hay dos partículas; después de la colisión, también hay dos partículas. Cuando $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 1$, la ley de conservación que se deduce de la Ec. (25) es

$$\int d^3p \left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla + \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \right] f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0. \quad (30)$$

El objetivo es calcular las integrales explícitamente, para dejar escrito el resultado en términos de las densidades y corrientes. El primer término es

$$\int d^3p \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \int d^3p f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (31)$$

donde n es la densidad de partículas. El segundo término en la Ec. (30) es

$$\int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \nabla \cdot \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot [n(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)], \quad (32)$$

donde \mathbf{u} es la velocidad media de las partículas,

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \left\langle \frac{\mathbf{p}}{m} \right\rangle (\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (33)$$

Finalmente, el último término en la Ec. (30) es

$$\int d^3p \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = - \int d^3p [\nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)] f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0, \quad (34)$$

porque, por hipótesis, $\nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = 0$. Reuniendo todos estos resultados, obtenemos la siguiente ley de conservación:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (35)$$

aunque es más útil escrita como

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0. \quad (36)$$

Esta es la ecuación de continuidad.

Conservación del impulso lineal

Si $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = p_i$, la Ec. (25) se lee como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3p p_i f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \nabla \cdot \int d^3p p_i \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \int d^3p p_i \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0. \quad (37)$$

La integral en el primer término define la densidad de impulso $\boldsymbol{\pi}$,

$$\boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{p} \mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = mn(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t). \quad (38)$$

La integral del segundo término en la Ec. (37) es el tensor de esfuerzos, definido como

$$\Theta_{ij}(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{p} \frac{p_i p_j}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (39)$$

Este tensor da el flujo de la componente i del impulso en la dirección j . Por último, la integral en el tercer término de la Ec. (37) se puede reescribir como

$$\int d^3\mathbf{p} p_i F_j(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial p_j} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = - \int d^3\mathbf{p} [\delta_{ij} F_j(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + p_i \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)] f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (40)$$

Por hipótesis, $\nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = 0$, de modo que la expresión anterior se reduce a

$$- \delta_{ij} n \langle F_j \rangle, \quad (41)$$

donde $\langle F \rangle$ es el valor medio de la fuerza por partícula. Finalmente, la Ec. (37) se lee como

$$\frac{\partial}{\partial t} (mn\mathbf{u}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\Theta} = n \langle \mathbf{F} \rangle. \quad (42)$$

O, en términos de la densidad del impulso,

$$\frac{\partial \boldsymbol{\pi}}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{\Theta} = n \langle \mathbf{F} \rangle. \quad (43)$$

Esta es la ley de conservación macroscópica del impulso lineal.

Conservación de la energía

Si $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = p^2/2m$, omitiendo algunos pasos, la ecuación de conservación (25) implica

$$\frac{\partial \epsilon(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_\epsilon(\mathbf{r}, t) = - \int d^3\mathbf{p} \frac{p^2}{2m} \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (44)$$

Para evaluar el último término, integramos por partes, usando de nuevo que $\nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = 0$,

$$\int d^3\mathbf{p} \frac{p^2}{2m} \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = - \int d^3\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = -n(\mathbf{r}, t) \left\langle \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \mathbf{F} \right\rangle(\mathbf{r}, t). \quad (45)$$

Este término está relacionado con el trabajo por unidad de tiempo que hace la fuerza externa. El balance de energía queda escrito entonces como

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_\epsilon = n \left\langle \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \mathbf{F} \right\rangle, \quad (46)$$

lo que no carece de sentido.

Tal como las hemos visto hasta aquí, las ecuaciones de conservación macroscópicas son consecuencia de la ecuación de transporte de Boltzmann, a través de las propiedades de

simetría de la función T_{fi} (un resultado que no demostramos, pero que pueden consultar en la sección 5.3 del libro de Huang). Sin embargo, uno debería ver a las ecuaciones de conservación macroscópicas como una confirmación de que la ecuación de transporte de Boltzmann es consistente con las leyes de conservación microscópicas. Si hubiéramos escrito otra ecuación de transporte, de la cual no se dedujeran las leyes de conservación macroscópicas, eso hubiera sido más una indicación de lo inadecuado de la ecuación de transporte que de la violación de las leyes de conservación. Dicho en otras palabras, las leyes de conservación pueden mirarse en el otro sentido: sea cual fuere el término de colisiones en la ecuación de transporte

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}}, \quad (47)$$

debe ser tal que

$$\int d^3\mathbf{p} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0, \quad \int d^3\mathbf{p} \mathbf{p} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0, \quad \int d^3\mathbf{p} p^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0, \quad (48)$$

para que se satisfagan, así, las leyes de conservación macroscópicas. Desde este punto de vista, las ecuaciones de conservación son anteriores a la ecuación de transporte. La forma específica del término de colisiones dependerá del modelo. Un modelo posible es el de las colisiones binarias y el caos molecular, que lleva a la ecuación de transporte de Boltzmann y que, en efecto, tiene un término de colisiones que satisface las ecuaciones anteriores.

La distribución de Maxwell–Boltzmann

Una solución muy importante de la ecuación de Boltzmann corresponde a la distribución de equilibrio, en la que f no depende de la posición ni del tiempo y en la que no hay fuerzas externas. Así, el primer miembro de la ecuación de Boltzmann es idénticamente nulo,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = 0. \quad (49)$$

Para que f sea solución de la ecuación de Boltzmann, también debe anularse el término de colisiones; es decir, debe ser

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= \int d^3\mathbf{p}'_1 d^3\mathbf{p}'_2 d^3\mathbf{p}_2 \delta^3(\mathbf{p} + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2) \delta(p^2 + p_2^2 - p'^2_1 - p'^2_2) \\ &\quad \times |T_{fi}|^2 (f'_2 f'_1 - f_2 f) = 0. \end{aligned} \quad (50)$$

La forma más sencilla de anular esta expresión es elegir f de modo que las deltas fueren la anulación de la diferencia $f'_2 f'_1 - f_2 f$. Es fácil verificar que si f es de la forma

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f(\mathbf{p}) = a e^{-b|\mathbf{p}-\mathbf{c}|^2}, \quad (51)$$

entonces ocurre lo anterior. En efecto,

$$f'_2 f'_1 - f_2 f = a^2 \left\{ \exp \left[-b \left(|\mathbf{p}'_2 - \mathbf{c}|^2 + |\mathbf{p}'_1 - \mathbf{c}|^2 \right) \right] - \exp \left[-b \left(|\mathbf{p}_2 - \mathbf{c}|^2 + |\mathbf{p} - \mathbf{c}|^2 \right) \right] \right\} \quad (52)$$

$$= a^2 e^{-2b\mathbf{c}^2} \left(\exp \left\{ b \left[2\mathbf{c} \cdot (\mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2) - (p_1'^2 + p_2'^2) \right] \right\} - \exp \left\{ b \left[2\mathbf{c} \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{p}_2) - (p^2 + p_2^2) \right] \right\} \right).$$

Pero las deltas de Dirac en el integrando de la Ec. (50), que están ahí porque los choques son elásticos y conservan el impulso lineal, fuerzan las condiciones

$$\mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2 = \mathbf{p} + \mathbf{p}_2, \quad p_1'^2 + p_2'^2 = p^2 + p_2^2. \quad (53)$$

Entonces

$$\delta^3(\mathbf{p} + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2) \delta(p^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2) \left(\exp \left\{ b \left[2\mathbf{c} \cdot (\mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2) - (p_1'^2 + p_2'^2) \right] \right\} - \exp \left\{ b \left[2\mathbf{c} \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{p}_2) - (p^2 + p_2^2) \right] \right\} \right) = 0. \quad (54)$$

Al considerar el término de colisiones de la Ec. (50), hubiera bastado con que se anulara la integral triple. Ocurre algo mucho más fuerte: lo que se anula es el integrando punto a punto. Este es un caso particular de balance detallado.

En resumen, tenemos una familia de soluciones de la ecuación de Boltzmann:

$$f(\mathbf{p}) = a e^{-b|\mathbf{p}-\mathbf{c}|^2}. \quad (55)$$

La pregunta ahora es qué significa físicamente cada uno de los parámetros que aparecen en esta distribución. Para analizar esta cuestión, calculemos la densidad de partículas, la velocidad media por partícula y la densidad de energía cinética.

En primer lugar

$$n = \int d^3\mathbf{p} f(\mathbf{p}) = a \int d^3\mathbf{p} e^{-b|\mathbf{p}-\mathbf{c}|^2}. \quad (56)$$

Como la integral es en todo el espacio de impulsos, podemos hacer el cambio de variables $\mathbf{p} - \mathbf{c} \rightarrow \mathbf{p}$, con lo que queda

$$n = a \int d^3\mathbf{p} e^{-b\mathbf{p}^2} = a \left(\frac{\pi}{b} \right)^{3/2}. \quad (57)$$

Esto da una primera relación entre los parámetros a y b y las densidades macroscópicas. Por otro lado, la velocidad media por partícula, usando el mismo cambio de variables, es

$$\mathbf{u} = \frac{1}{n} \int d^3\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{p}) = \frac{a}{nm} \int d^3\mathbf{p} (\mathbf{p} + \mathbf{c}) e^{-b\mathbf{p}^2}. \quad (58)$$

La integral gaussiana del producto de un número impar de componentes del impulso, cuando la gaussiana está centrada en el origen, es cero. De modo que, mediante la Ec. (57),

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{c}}{nm} a \int d^3\mathbf{p} e^{-b\mathbf{p}^2} = \frac{\mathbf{c}}{m}. \quad (59)$$

Esto implica

$$\mathbf{c} = m\mathbf{u}. \quad (60)$$

Tenemos entonces una interpretación directa del parámetro c . Por último, calculemos la densidad de energía cinética,

$$\epsilon = \int d^3p \frac{p^2}{2m} f(\mathbf{p}) = \frac{a}{2m} \int d^3p (\mathbf{p} + \mathbf{c}) \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{c}) e^{-b p^2} = \frac{a}{2m} \int d^3p (p^2 + c^2) e^{-b p^2}. \quad (61)$$

Hay que calcular la integral

$$I_2 = \int d^3p p^2 e^{-b p^2}. \quad (62)$$

En general, podemos calcular sin mucho esfuerzo toda una familia de integrales:

$$I_s = \int d^3p p^s e^{-b p^2}. \quad (63)$$

Escribiendo la integral en esféricas,

$$I_s = 4\pi \int_0^\infty dp p^{s+2} e^{-b p^2} = \frac{4\pi}{b^{(s+3)/2}} \int_0^\infty dx x^{s+2} e^{-x^2}. \quad (64)$$

Con el cambio de variables $y = x^2$, queda

$$I_s = \frac{2\pi}{b^{(s+3)/2}} \int_0^\infty dy y^{(s+1)/2} e^{-y}. \quad (65)$$

Recordando la definición de la función Γ ,

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty dt t^{x-1} e^{-t}, \quad (66)$$

finalmente resulta

$$I_s = \frac{2\pi}{b^{(s+3)/2}} \Gamma\left(\frac{s+3}{2}\right). \quad (67)$$

Así,

$$I_2 = \frac{2\pi}{b^{5/2}} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right). \quad (68)$$

Hay un valor de la función Γ de argumento fraccionario que, si no se recuerda, es muy fácil de calcular:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}. \quad (69)$$

En verdad,

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^\infty dt t^{-1/2} e^{-t} = 2 \int_0^\infty dz e^{-z^2} = \sqrt{\pi}. \quad (70)$$

A partir de este resultado, y de la propiedad de recurrencia $\Gamma(x) = (x-1)\Gamma(x-1)$, pueden calcularse todos los valores de la función Γ de argumento $\frac{1}{2}n$, con n impar. Por ejemplo,

$$\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3}{2}\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}. \quad (71)$$

En definitiva,

$$I_2 = \int d^3p p^2 e^{-bp^2} = \frac{3\pi^{3/2}}{2b^{5/2}}, \quad (72)$$

y

$$\epsilon = \frac{1}{2m} a \left(\frac{\pi}{b}\right)^{3/2} \left(\frac{3}{2b} + c^2\right) = \frac{3n}{4mb} + \frac{mnu^2}{2}. \quad (73)$$

El último término podría haberse anticipado.

Aún no tenemos una interpretación para a y b . Supongamos que el fluido esté en reposo, de modo que $u = 0$. Entonces la densidad de energía cinética es

$$\epsilon = \frac{3n}{4mb}. \quad (74)$$

Para que esto sea consistente con la mecánica estadística de un gas ideal monoatómico a temperatura T , cuya densidad de energía es $\frac{3}{2}nkT$, debe ser

$$b = \frac{1}{2mkT}. \quad (75)$$

Lo único que resta hacer es volver a la Ec. (57) y dejar escrito a en términos de los observables macroscópicos:

$$a = \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}}. \quad (76)$$

Así hemos demostrado que la distribución de Maxwell-Boltzmann es solución de la ecuación de transporte de Boltzmann en ausencia de fuerzas externas y que, en términos de los observables macroscópicos, se escribe como

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f_0(\mathbf{p}) = \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}} e^{-|\mathbf{p}-m\mathbf{u}|^2/2mkT}. \quad (77)$$

A partir de aquí, cuando hablemos de una distribución de Maxwell-Boltzmann, usaremos el subíndice 0. La distribución f_0 tiene asociada una densidad de partículas n , una velocidad media \mathbf{u} y una densidad de energía cinética

$$\epsilon = \frac{1}{2}mnu^2 + \frac{3}{2}nkT. \quad (78)$$

Ninguna de estas cantidades depende de la posición o del tiempo. El fluido se desplaza como un todo. En un sistema de referencia que se moviera a velocidad \mathbf{u} , veríamos un fluido en reposo, macroscópicamente homogéneo y estático.

Las corrientes para la distribución de Maxwell–Boltzmann

Sabemos que la densidad de corriente de partículas será $\mathbf{j} = n\mathbf{u}$. Interesa calcular ahora las otras corrientes. El tensor de esfuerzos es

$$\Theta_{ij} = \int d^3p \frac{p_i p_j}{m} f_0(\mathbf{p}). \quad (79)$$

Estos cálculos son típicos. La estrategia general, que ya hemos aplicado antes, es centrar la gaussiana, de modo que luego del cambio de variables queda la siguiente integral:

$$\Theta_{ij} = \frac{1}{m} \int d^3p (p_i + mu_i)(p_j + mu_j) \bar{f}_0(\mathbf{p}), \quad (80)$$

donde $\bar{f}_0(\mathbf{p})$ es la gaussiana centrada,

$$\bar{f}_0(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi mkT)^{3/2}} e^{-p^2/2mkT}. \quad (81)$$

Por simetría,

$$\Theta_{ij} = \frac{1}{m} \int d^3p (p_i p_j + m^2 u_i u_j) \bar{f}_0(\mathbf{p}). \quad (82)$$

Ya hemos visto que

$$\int d^3p f_0(\mathbf{p}) = \int d^3p \bar{f}_0(\mathbf{p}) = n, \quad (83)$$

de forma que

$$\Theta_{ij} = mn u_i u_j + \frac{1}{m} \int d^3p p_i p_j \bar{f}_0(\mathbf{p}). \quad (84)$$

La última integral sólo es distinta de cero cuando $i = j$, y en ese caso no depende del valor de i . Da lo mismo integrar p_x^2 que p_y^2 o que p_z^2 . Entonces, podemos afirmar que

$$\int d^3p p_i p_j \bar{f}_0(\mathbf{p}) = \frac{1}{3} \delta_{ij} \int d^3p p^2 \bar{f}_0(\mathbf{p}). \quad (85)$$

Con el resultado (72) a la vista,

$$\int d^3p p^2 \bar{f}_0(\mathbf{p}) = 3mnkT. \quad (86)$$

En definitiva,

$$\int d^3p p_i p_j \bar{f}_0(\mathbf{p}) = mnkT \delta_{ij}, \quad (87)$$

y

$$\Theta_{ij} = nkT \delta_{ij} + mn u_i u_j. \quad (88)$$

Si la velocidad del fluido fuera cero, el tensor de esfuerzos sería diagonal. En el producto nkT reconocemos la presión de un gas ideal.

Por otro lado, la densidad de corriente de energía cinética es

$$\mathbf{j}_\epsilon = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} f_0(\mathbf{p}). \quad (89)$$

Luego de centrar la gaussiana y de omitir los términos que se anulan por simetría, queda

$$\mathbf{j}_\epsilon = \int d^3p \left(\frac{p^2}{2m} \mathbf{u} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{u} \frac{\mathbf{p}}{m} + \frac{1}{2} m u^2 \mathbf{u} \right) \bar{f}_0(p). \quad (90)$$

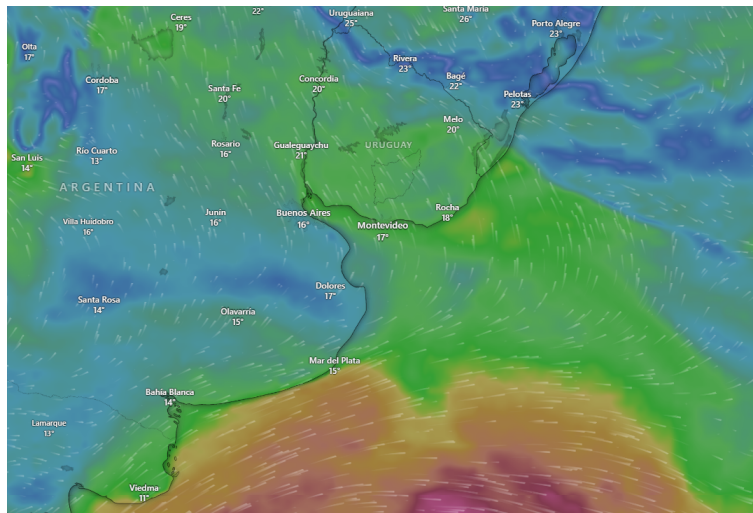
Por suerte no necesitamos hacer ninguna integral nueva. Usando los resultados (83) y (87),

$$\mathbf{j}_\epsilon = \frac{5}{2} n k T \mathbf{u} + \frac{1}{2} m u^2 n \mathbf{u}. \quad (91)$$

Si $\mathbf{u} = 0$, la densidad de corriente de energía cinética es cero. Resulta un poco desconcertante a primera vista que la densidad de corriente de energía cinética no sea $\epsilon \mathbf{u}$. La diferencia es igual a la presión, $n k T$, por la velocidad.

Distribución de Maxwell-Boltzmann local

Estamos acostumbrados a los mapas de temperatura. Podemos ver en tiempo real cómo cambia la temperatura en la ciudad, o en un punto de la ciudad. Aunque la atmósfera sea turbulenta, no solemos perder el aplomo al hablar de su distribución de temperatura.



Incluso habrán resuelto la ecuación del calor, que gobierna en algunos modelos la evolución del campo de temperatura. El caso de la temperatura es paradigmático, porque es una cantidad que hemos aprendido a asociar a sistemas en equilibrio termodinámico. El mero hecho de hablar de que la temperatura cambia con la posición y con el tiempo implica que no hay equilibrio y que, en rigor, no podemos hablar de temperatura en el sentido termodinámico del término. Pero de todas maneras, llevamos un termómetro de un punto al otro del aula y el termómetro indica una temperatura, que depende de la posición y del tiempo. Esto sugiere que en muchas situaciones de no equilibrio sigue siendo adecuada la

descripción del fluido, al menos de manera aproximada, por una distribución localmente de equilibrio, en donde los parámetros n , \mathbf{u} y T sean funciones de la posición y del tiempo. Es decir, uno esperaría que fuera posible describir un fluido moderadamente fuera del equilibrio con una distribución de la forma

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{n(\mathbf{r}, t)}{[2\pi mkT(\mathbf{r}, t)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{|\mathbf{p} - m\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2}{2mkT(\mathbf{r}, t)}\right]. \quad (92)$$

Cuando antes calculamos las densidades y la velocidad media, en ningún momento fue necesario suponer que los parámetros n , \mathbf{u} y T fuesen constantes, porque sólo hicimos integrales en el impulso. La distribución anterior tiene una densidad de partículas $n(\mathbf{r}, t)$, una velocidad media por partícula $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ y una densidad de energía cinética

$$\epsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2}mn(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{3}{2}n(\mathbf{r}, t)kT(\mathbf{r}, t). \quad (93)$$

La pregunta natural es si una distribución de Maxwell-Boltzmann local puede ser solución de la ecuación de Boltzmann. Hemos visto que si la distribución es una gaussiana en el impulso, el término de colisiones es cero. Entonces, si la distribución de Maxwell-Boltzmann local fuera una solución de la ecuación de Boltzmann, habría que verificar que se anula el primer miembro de la Ec. (23). Sin fuerzas externas,[†] debería ser

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f_0 = 0. \quad (94)$$

Esta es una ecuación diferencial para las funciones n , \mathbf{u} y T , y depende explícitamente del impulso. De manera esquemática, tenemos una ecuación diferencial de la forma

$$D[n(\mathbf{r}, t), \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), T(\mathbf{r}, t), \mathbf{p}] = 0. \quad (95)$$

Es fácil convencerse (¡ejercicio!) de que, salvo en el caso trivial, las soluciones de esta ecuación no pueden ser funciones sólo de \mathbf{r} y de t . También deben depender explícitamente de \mathbf{p} . Pero, por definición, toda la dependencia del impulso de la distribución de Maxwell-Boltzmann local debe limitarse, de una manera muy específica, al exponente de la gaussiana. Por lo tanto, la distribución de Maxwell-Boltzmann local no puede ser, en general, una solución de la ecuación de Boltzmann, a menos que se trate de la distribución de equilibrio estricto.

Sin embargo, según lo que observamos antes, en muchas situaciones podemos hablar de la temperatura de un gas como función de la posición y del tiempo. Para ciertos problemas, la distribución de Maxwell-Boltzmann local será una buena aproximación. Más generalmente, una distribución de equilibrio local puede ser adecuada, m. m., incluso en situaciones tan extremas como la explosión de una supernova. Estas consideraciones nos llevan a introducir la aproximación de equilibrio local.

[†]Cuando hay fuerzas externas, es posible, por ejemplo, tener una solución de equilibrio local con una densidad variable, pero sigue siendo un caso trivial y, cuestión más relevante, la temperatura es uniforme.

Aproximación de equilibrio local

Para los sistemas que vamos a tratar, la aproximación de equilibrio local corresponde a asumir que la función de distribución del gas es una distribución de Maxwell–Boltzmann local, f_0 , más una corrección δf , con $|\delta f| \ll f_0$,

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \\ &= \frac{n_0(\mathbf{r}, t)}{[2\pi m k T(\mathbf{r}, t)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{|\mathbf{p} - m\mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t)|^2}{2mkT(\mathbf{r}, t)}\right] + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \end{aligned} \quad (96)$$

Ahora bien, sea lo que fuere $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, existen infinitas maneras de escribirla como la suma de una distribución de Maxwell–Boltzmann local más una corrección, del mismo modo en que hay infinitas maneras de escribir la función χ^2 como una gaussiana más una “corrección”:

$$\chi^2 = e^{-\alpha x^2} + \delta f = e^{-\alpha x^2} + (\chi^2 - e^{-\alpha x^2}). \quad (97)$$

Para cada valor de α , tenemos una descomposición. Una forma de fijar f_0 consiste en elegir las funciones $n_0(\mathbf{r}, t)$ y $\mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t)$ de modo que éstas sean exactamente iguales a la densidad de partículas y a la velocidad media por partícula. Es decir, imponer las condiciones

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{p} f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= n_0(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t), \\ \int d^3\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m} f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= n_0(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (98)$$

donde

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad n(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (99)$$

En otras palabras, imponemos a δf las condiciones

$$\delta n = \int d^3\mathbf{p} \delta f = 0, \quad \delta \pi = \int d^3\mathbf{p} \mathbf{p} \delta f = 0. \quad (100)$$

La distribución de Maxwell–Boltzmann local depende de tres funciones arbitrarias. Eso significa que necesitamos una tercera condición. Esta condición es que la densidad de energía cinética,

$$\epsilon(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{p} \frac{p^2}{2m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad (101)$$

se escriba en términos de T de la misma manera en la que se escribe para un gas en equilibrio. Es decir, dados n , \mathbf{u} y ϵ , definiremos T de modo tal que

$$\epsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2}mn(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{3}{2}n(\mathbf{r}, t)kT(\mathbf{r}, t). \quad (102)$$

Puesto que, según hemos visto antes,

$$\int d^3p \frac{p^2}{2m} f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, T) = \frac{1}{2} m n(\mathbf{r}, t) u(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{3}{2} n(\mathbf{r}, t) kT(\mathbf{r}, t), \quad (103)$$

la tercera condición sobre δf es, previsiblemente,

$$\delta \epsilon = \int d^3p \frac{p^2}{2m} \delta f = 0. \quad (104)$$

Recapitulemos: propusimos una solución para la ecuación de Boltzmann de la forma

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{n(\mathbf{r}, t)}{[2\pi m kT(\mathbf{r}, t)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{|\mathbf{p} - m\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2}{2mkT(\mathbf{r}, t)}\right] + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad (105)$$

en donde δf está sujeta a tres condiciones suplementarias,

$$\int d^3p \delta f = 0, \quad \int d^3p \mathbf{p} \delta f = 0, \quad \int d^3p \frac{p^2}{2m} \delta f = 0. \quad (106)$$

Estas condiciones tienen el efecto de fijar sin ambigüedad la descomposición $f = f_0 + \delta f$, donde f_0 es una distribución de Maxwell–Boltzmann local. Las funciones n y \mathbf{u} dan cuenta exacta de la densidad de partículas y de la velocidad media por partícula. La “temperatura” T guarda con ϵ , n y \mathbf{u} la misma relación que vale para un gas ideal en equilibrio.

El objetivo ahora no es tanto resolver la ecuación de Boltzmann para $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, sino encontrar las ecuaciones diferenciales que satisfacen las funciones n , \mathbf{u} y T . Esas ecuaciones están ligadas a las leyes de conservación. Esto involucrará el cálculo de las densidades de corriente de partículas, energía e impulso. Veremos que esas corrientes estarán relacionadas con los gradientes de las funciones n , \mathbf{u} y T . Es así como se calculan la viscosidad, la conductividad térmica y otros coeficientes de transporte.

Debido a la dificultad que presenta la ecuación de transporte de Boltzmann, aún bajo la aproximación de equilibrio local, existen varios métodos de solución aproximados, algunos de gran sofisticación. En la siguiente sección veremos uno de los más simples.

Aproximación de tiempo de relajación

Supondremos que vale la aproximación de equilibrio local, $f = f_0 + \delta f$, donde $|\delta f| \ll f_0$. Ahora veremos un método aproximado para encontrar δf y escribir las ecuaciones diferenciales que deben satisfacer las funciones n , \mathbf{u} y T .

La parte realmente problemática de la ecuación de Boltzmann es el término de colisiones. No sólo es no lineal, sino que además hace que la ecuación de Boltzmann sea integro-diferencial. El integrando en el término de colisiones es cuadrático en f ,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{col}} = \int d^3p'_1 d^3p'_2 d^3p_2 \delta^3(\mathbf{p} + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2) \delta(p^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2) |T_{fi}|^2 (f'_2 f'_1 - f_2 f). \quad (107)$$

Antes demostramos que cualquier distribución gaussiana en el impulso reemplazada en el término de colisiones da cero. Hemos definido $f = f_0 + \delta f$, así que la combinación de funciones f que aparece en el término de colisiones (107) puede escribirse como

$$f'_2 f'_1 - f_2 f = (f'_{02} f'_{01} - f_{02} f_0) + \delta f'_2 f'_{01} + f'_{02} \delta f'_1 - \delta f_2 f_0 - f_{02} \delta f + \delta f'_1 \delta f'_2 - \delta f_2 \delta f. \quad (108)$$

Según lo que acabamos de decir, el término entre paréntesis no contribuye a la integral de colisiones, porque f_0 es gaussiana en el impulso. De esta forma, puede estimarse que $(\partial f / \partial t)_{\text{col}} \sim \delta f$. Esto motiva la aventurada aproximación de tiempo de relajación:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} \approx -\frac{\delta f}{\tau}, \quad (109)$$

donde τ es un tiempo microscópico característico, mucho menor que la escala de evolución macroscópica del sistema. Típicamente, τ es el tiempo medio entre colisiones y puede depender de la posición y del tiempo. Por lo común, τ es función de n y T . La aproximación no es después de todo tan aventurada, puesto que una de las contribuciones en el término de colisiones es

$$- \left[\int d^3 p'_1 d^3 p'_2 d^3 p_2 \delta^3(\mathbf{p} + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2) \delta(p^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2) |\mathbb{T}_{fi}|^2 f_2 \right] \delta f. \quad (110)$$

Para entender por qué se llama aproximación de tiempo de relajación, supongamos que

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f_0(\mathbf{p}) + \delta f(t), \quad (111)$$

donde f_0 es la distribución de Maxwell–Boltzmann de equilibrio. Entonces, la ecuación de Boltzmann sin fuerzas externas, en la aproximación de tiempo de relajación se lee como

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} = -\frac{\delta f}{\tau}. \quad (112)$$

Esto implica que la perturbación decae con un tiempo característico de orden τ .

En definitiva, la ecuación de Boltzmann en la aproximación de equilibrio local y tiempo de relajación, sin fuerzas externas, es

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f = -\frac{\delta f}{\tau}. \quad (113)$$

Las condiciones (106) pueden ser vistas ahora desde otra perspectiva, que les asigna un significado más profundo. Recordemos que cualquier término de colisiones compatible con las ecuaciones de conservación macroscópicas debe satisfacer las ecuaciones (48),

$$\int d^3 p \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0, \quad \int d^3 p \mathbf{p} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0, \quad \int d^3 p p^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0. \quad (114)$$

Si el término de colisiones es $-\delta f / \tau$, entonces las condiciones (106) no son sólo convenientes, sino necesarias.

El objetivo es escribir δf en términos de las mismas funciones n , \mathbf{u} y T que figuran en f_0 . Esto es más sencillo de lo que podría parecer. La Ec. (113) puede leerse como una ecuación para δf . Escribiendo $f = f_0 + \delta f$, encontramos

$$\delta f = -\tau \left[\frac{\partial}{\partial t}(f_0 + \delta f) + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla(f_0 + \delta f) \right]. \quad (115)$$

Antes que nada, esto permite inferir que δf es de orden τ . De manera que

$$\delta f = -\tau \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f_0 \right) + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (116)$$

No suele ser necesario calcular δf de manera explícita, debido a que lo que importa son las corrientes y densidades; es decir, integrales de δf sobre el impulso. Puesto que f_0 depende de tres funciones del espacio y del tiempo, sería muy penoso si fuera necesario calcular δf explícitamente en términos de las derivadas y gradientes de esas funciones. Cuando uno está interesado en calcular integrales en el impulso, al reemplazar la expresión (116) en estas integrales, suele ocurrir que las derivadas pueden sacarse fuera, evitando tener que calcular los muchos términos de las derivadas de una función que depende de \mathbf{r} y t a través de la composición de muchas otras funciones. Tampoco verán nunca que el método sea llevado a órdenes más altos de τ , aunque no hay ninguna dificultad especial en escribir δf hasta un orden arbitrario, simplemente por recursión.

Para ilustrar el método, vamos a considerar que el régimen es estacionario, lo que significa que ninguna de las funciones n , \mathbf{u} y T depende del tiempo. Lo primero que hay que hacer es ver qué restricciones imponen las condiciones (106) a través de la expresión explícita de δf dada por la Ec. (116). Recordemos que esas condiciones son

$$\int d^3p \delta f = 0, \quad \int d^3p \mathbf{p} \delta f = 0, \quad \int d^3p p^2 \delta f = 0. \quad (117)$$

En régimen estacionario, la expresión (116) se reduce a

$$\delta f = -\frac{\tau}{m} \mathbf{p} \cdot \nabla f_0 + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (118)$$

La primera condición (117) se lee como

$$\int d^3p \left[-\tau \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f_0 + \mathcal{O}(\tau^2) \right] = 0. \quad (119)$$

Escribamos

$$\int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f_0 = \nabla \cdot \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f_0. \quad (120)$$

Hemos visto que para una distribución de Maxwell–Boltzmann local

$$\int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f_0 = n\mathbf{u}. \quad (121)$$

Entonces, volviendo a la Ec. (119), se debe cumplir lo siguiente:

$$\nabla \cdot (\mathbf{n}\mathbf{u}) = \mathcal{O}(\tau). \quad (122)$$

Esto no aporta información nueva y, en realidad, tenemos un resultado más fuerte. En régimen estacionario, la conservación del número de partículas, Ec. (36), implica

$$\nabla \cdot (\mathbf{n}\mathbf{u}) = 0. \quad (123)$$

Esto no contradice la Ec. (122), que sólo impone un límite superior al orden de magnitud del miembro de la izquierda.

La segunda condición (117) se escribe como

$$\int d^3\mathbf{p} \, p_i \delta f = \int d^3\mathbf{p} \left[-\frac{\tau}{m} p_i p_j \partial_j f_0 + \mathcal{O}(\tau^2) \right] = 0. \quad (124)$$

Tenemos que

$$\int d^3\mathbf{p} \, \frac{p_i p_j}{m} \partial_j f_0 = \partial_j \int d^3\mathbf{p} \, \frac{p_i p_j}{m} f_0. \quad (125)$$

Esta integral es el tensor de esfuerzos asociado a la distribución f_0 . Llamémoslo $\Theta^{(0)}$; luego

$$\partial_j \int d^3\mathbf{p} \, \frac{p_i p_j}{m} f_0 = \partial_j \Theta_{ij}^{(0)}. \quad (126)$$

$\Theta^{(0)}$ es el tensor de esfuerzos calculado a más bajo orden en τ . Volviendo a la Ec. (124),

$$\nabla \cdot \Theta^{(0)} = \mathcal{O}(\tau). \quad (127)$$

Es necesario que mantengamos un registro de los órdenes en τ a la derecha de cada ecuación. Usando el resultado (88) para escribir $\Theta^{(0)}$ de manera explícita, queda

$$\partial_i (nkT) + m \partial_j (n u_i u_j) = \mathcal{O}(\tau). \quad (128)$$

Por último, la tercera condición (117),

$$\int d^3\mathbf{p} \, \frac{p^2}{2m} \delta f = 0, \quad (129)$$

implica, a su vez,

$$\int d^3\mathbf{p} \, p^2 \mathbf{p} \cdot \nabla f_0 = \nabla \cdot \int d^3\mathbf{p} \, p^2 \mathbf{p} f_0 = \mathcal{O}(\tau). \quad (130)$$

La integral que aparece en esta expresión es, a menos de un factor constante, la densidad de corriente de energía cinética asociada a la distribución f_0 ,

$$\mathbf{j}_e^{(0)} = \int d^3\mathbf{p} \, \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} f_0. \quad (131)$$

La Ec. (130) significa, por lo tanto, que

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_e^{(0)} = \mathcal{O}(\tau). \quad (132)$$

Explícitamente, usando el resultado (91) para $\mathbf{j}_e^{(0)}$,

$$\nabla \cdot \left(\frac{5}{2}kT + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 \right) n\mathbf{u} = \mathcal{O}(\tau). \quad (133)$$

Resumiendo: si incluimos la ley exacta de conservación del número de partículas, en régimen estacionario, las aproximaciones de equilibrio local y de tiempo de relajación implican tres ecuaciones para las funciones n , \mathbf{u} y T , a saber:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (n\mathbf{u}) &= 0, \\ \partial_i(nkT) + m\partial_j(nu_i u_j) &= \mathcal{O}(\tau), \\ \nabla \cdot \left(\frac{5}{2}kT + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 \right) n\mathbf{u} &= \mathcal{O}(\tau). \end{aligned} \quad (134)$$

Veremos que, usando unas ecuaciones en otras, estas expresiones pueden llevarse a una forma más simple. La segunda ecuación, por ejemplo, puede reescribirse mediante la primera:

$$\begin{aligned} \partial_i(nkT) + m\partial_j(nu_i u_j) &= \partial_i(nkT) + mn u_j \partial_j u_i + m u_i \partial_j (n u_j) \\ &= \partial_i(nkT) + mn u_j \partial_j u_i + m u_i \nabla \cdot (n\mathbf{u}) \\ &= \partial_i(nkT) + mn(\mathbf{u} \cdot \nabla)u_i. \end{aligned} \quad (135)$$

Así, vectorialmente, la segunda Ec. (134) queda escrita como

$$\nabla(nkT) + mn(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \mathcal{O}(\tau). \quad (136)$$

Algo parecido puede hacerse con la tercera Ec. (134). Puesto que $\nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0$,

$$\nabla \cdot \left(\frac{5}{2}kT + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 \right) n\mathbf{u} = n(\mathbf{u} \cdot \nabla) \left(\frac{5}{2}kT + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 \right). \quad (137)$$

Entonces se obtiene

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{5}{2}kT + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 \right) = \mathcal{O}(\tau). \quad (138)$$

Aunque resulte exasperante, esto aún puede simplificarse. El último término es

$$\frac{m}{2}\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}^2 = m u_i u_j \partial_i u_j = m u_j \mathbf{u} \cdot \nabla u_j. \quad (139)$$

Usando la Ec. (136),

$$\frac{m}{2}\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}^2 = -\frac{1}{n}\mathbf{u} \cdot \nabla(nkT) + \mathcal{O}(\tau) = -\frac{1}{n}\partial_i(nu_i kT) + kT \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathcal{O}(\tau). \quad (140)$$

Por último, si se usa la ecuación de continuidad para reescribir el primer término,

$$\frac{m}{2} \mathbf{u} \cdot \nabla u^2 = -\mathbf{u} \cdot \nabla(kT) + kT \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathcal{O}(\tau). \quad (141)$$

Volviendo a la Ec. (138), queda

$$\frac{3}{2} \mathbf{u} \cdot \nabla T + T \nabla \cdot \mathbf{u} = \mathcal{O}(\tau). \quad (142)$$

Con esto, la versión simplificada de las Ecs. (134) es

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (n\mathbf{u}) &= 0, \\ \nabla(nkT) + mn(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} &= \mathcal{O}(\tau), \\ \frac{3}{2} \mathbf{u} \cdot \nabla T + T \nabla \cdot \mathbf{u} &= \mathcal{O}(\tau). \end{aligned} \quad (143)$$

La mayor simplificación es haber eliminado n de la tercera ecuación y haber conseguido que la última Ec. (143) sea lineal en \mathbf{u} .

La aproximación de orden cero de las ecuaciones de transporte corresponde a escribir

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \\ \nabla(nkT) + mn(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = 0, \\ \frac{3}{2} \mathbf{u} \cdot \nabla T + T \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{array} \right. \quad (144)$$

Estas ecuaciones son equivalentes a pedir la validez de las ecuaciones de conservación para el número de partículas, para el impulso y para la densidad de energía que resultan de las densidades y corrientes asociadas sólo a la distribución de Maxwell–Boltzmann local, y, como tales, son sólo aproximadas.

Las corrientes a primer orden en τ

Hemos propuesto la descomposición $f = f_0 + \delta f$. Hemos hecho la aproximación de tiempo de relajación y hemos escrito δf en términos de f_0 hasta orden τ . Cuando el problema es estacionario

$$\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = -\tau \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (145)$$

Debido a la primera condición (106), la densidad de corriente de partículas es

$$\mathbf{j} = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f_0 = n\mathbf{u}, \quad (146)$$

y las funciones n y \mathbf{u} satisfacen exactamente la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0. \quad (147)$$

Puesto que π es proporcional a \mathbf{j} , la densidad de impulso lineal también está dada de manera exacta sólo por la contribución de f_0 ,

$$\boldsymbol{\pi} = \int d^3\mathbf{p} \mathbf{p} f = \int d^3\mathbf{p} \mathbf{p} f_0 = mn\mathbf{u}. \quad (148)$$

Pero, a diferencia de la densidad de corriente de partículas, que está determinada exactamente por f_0 , el tensor de esfuerzos tiene contribuciones tanto de f_0 como de δf ,

$$\boldsymbol{\Theta} = \int d^3\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}\mathbf{p}}{m} (f_0 + \delta f) = \boldsymbol{\Theta}^{(0)} + \delta\boldsymbol{\Theta}, \quad (149)$$

donde

$$\delta\boldsymbol{\Theta} = \int d^3\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}\mathbf{p}}{m} \delta f. \quad (150)$$

El asunto es calcular esta corrección a más bajo orden en τ .

A partir de la expresión (145),

$$\delta\Theta_{ij} = -\frac{\tau}{m} \partial_i \int d^3\mathbf{p} \frac{p_i p_j}{m} p_l f_0 + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (151)$$

El problema se reduce entonces a evaluar la integral

$$\mathcal{J}_{ijl} = \int d^3\mathbf{p} p_i p_j p_l f_0. \quad (152)$$

Luego de hacer el cambio de variables que centra la gaussiana, descartando los términos que se anulan trivialmente por simetría, obtenemos

$$\mathcal{J}_{ijl} = \int d^3\mathbf{p} (m^3 u_i u_j u_l + m u_i p_j p_l + m p_i u_j p_l + m p_i p_j u_l) \bar{f}_0. \quad (153)$$

Pero la integral de \bar{f}_0 es igual a n y, además, según la Ec. (87),

$$\int d^3\mathbf{p} p_i p_j \bar{f}_0 = nmkT\delta_{ij}. \quad (154)$$

Por lo tanto,

$$\mathcal{J}_{ijl} = m^3 u_i u_j u_l n + m^2 nkT (\delta_{jl} u_i + \delta_{il} u_j + \delta_{ij} u_l). \quad (155)$$

Finalmente,

$$\delta\Theta_{ij} = -\tau \left[\partial_j (nkT u_i) + \partial_i (nkT u_j) + \nabla \cdot (nkT \mathbf{u}) \delta_{ij} + m \partial_l (u_i u_j u_l n) \right] + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (156)$$

Esto puede simplificarse. La segunda Ec. (143) implica

$$\begin{aligned}\partial_j(nkTu_i) + \partial_i(nkTu_j) &= -mn \left[u_i (\mathbf{u} \cdot \nabla) u_j + u_j (\mathbf{u} \cdot \nabla) u_i \right] + nkT (\partial_i u_j + \partial_j u_i) + \mathcal{O}(\tau) \\ &= -mnu \cdot \nabla(u_i u_j) + nkT (\partial_i u_j + \partial_j u_i) + \mathcal{O}(\tau).\end{aligned}\tag{157}$$

Por otro lado, usando la ecuación de continuidad, el último término en la Ec. (156) es

$$\partial_l(u_i u_j u_l n) = n\mathbf{u} \cdot \nabla(u_i u_j).\tag{158}$$

La ecuación de continuidad también implica

$$\nabla \cdot (nkT\mathbf{u}) = n\mathbf{u} \cdot \nabla(kT).\tag{159}$$

Entonces, volviendo a la Ec. (156), queda

$$\delta\Theta_{ij} = -\tau n \left[\mathbf{u} \cdot \nabla(kT)\delta_{ij} + kT (\partial_i u_j + \partial_j u_i) \right] + \mathcal{O}(\tau^2).\tag{160}$$

A su vez, la tercera Ec. (143), permite eliminar ∇T en favor de $\nabla \cdot \mathbf{u}$, con la única ventaja reconocida de que así es más fácil comparar con las fórmulas del libro de Huang:

$$\delta\Theta_{ij} = \tau nkT \left[\frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})\delta_{ij} - (\partial_i u_j + \partial_j u_i) \right] + \mathcal{O}(\tau^2).\tag{161}$$

El factor que acompaña al término $(-\partial_i u_j - \partial_j u_i)$ es la viscosidad,

$$\eta = \tau nkT.\tag{162}$$

Si $\mathbf{u} = 0$, la corrección $\delta\Theta$ al tensor de esfuerzos es nula hasta orden τ . Introduciendo el tensor identidad, \mathbf{I} , y el tensor Λ con componentes

$$\Lambda_{ij} = \partial_i u_j + \partial_j u_i,\tag{163}$$

(la notación es levemente diferente a la de Huang) queda

$$\delta\Theta = \tau nkT \left[\frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} - \Lambda \right] + \mathcal{O}(\tau^2).\tag{164}$$

Calculemos ahora la corrección a la corriente de energía cinética. Esto va a requerir bastante más trabajo. Por definición,

$$\mathbf{j}_\epsilon = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} f = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} f_0 + \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} \delta f.\tag{165}$$

El primer término corresponde a la distribución de Maxwell–Boltzmann local, Ec. (91),

$$\mathbf{j}_\epsilon^{(0)} = \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} f_0 = \frac{5}{2}nkT\mathbf{u} + \frac{1}{2}mnu^2\mathbf{u}.\tag{166}$$

En la aproximación de tiempo de relajación, el último término de la expresión (165), escrito en componentes, es

$$[\delta j_\epsilon]_i = -\frac{\tau}{m} \partial_l \int d^3p \frac{p_i}{m} \frac{p^2}{2m} p_l f_0 + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (167)$$

Vamos a calcular una integral un poco más complicada que la que necesitamos:

$$\mathcal{J}_{ijhl} = \int d^3p p_i p_j p_h p_l f_0. \quad (168)$$

Centrando la gaussiana y luego de descartar los términos que tienen un número impar de componentes de \mathbf{p} ,

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{ijhl} = \int d^3p \left[m^2 \left(u_i u_j p_h p_l + u_i u_h p_j p_l + u_i u_l p_j p_h + u_j u_h p_i p_l + u_j u_l p_i p_h + u_h u_l p_i p_j \right) \right. \\ \left. + m^4 u_i u_j u_h u_l + p_i p_j p_h p_l \right] \bar{f}_0. \end{aligned} \quad (169)$$

La única integral nueva es la que corresponde al último término,

$$I = \int d^3p p_i p_j p_h p_l \bar{f}_0. \quad (170)$$

Por simetría, esta integral es distinta de cero sólo si hay dos pares de índices iguales,

$$I = (\delta_{ij} \delta_{hl} + \delta_{ih} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jh} - 3\delta_{ij} \delta_{ih} \delta_{il}) I_0 + \delta_{ij} \delta_{ih} \delta_{il} I_1, \quad (171)$$

donde

$$I_0 = \int d^3p p_1^2 p_3^2 \bar{f}_0, \quad I_1 = \int d^3p p_3^4 \bar{f}_0. \quad (172)$$

En la Ec. (171), separamos los casos “dos pares de índices iguales, pero distintos entre sí” y “los cuatro índices iguales”. En la Ec. (172), arbitrariamente elegimos los índices para hacer más simples las integrales angulares en coordenadas esféricas. Por simetría, lo único que importa es que, en un caso, haya dos pares de índices iguales pero distintos entre sí y, en el otro caso, cuatro índices iguales. La primera integral es

$$I_0 = \left(\int d\Omega \cos^2\varphi \sin^2\theta \cos^2\theta \right) \int_0^\infty dp p^6 \bar{f}_0. \quad (173)$$

La integral angular es

$$\int d\Omega \cos^2\varphi \sin^2\theta \cos^2\theta = \pi \int_{-1}^1 dx (x^2 - x^4) = \frac{4\pi}{15}. \quad (174)$$

Por otro lado, para la integral en p , tenemos [ver la Ec. (67)]

$$\int_0^\infty dp p^6 \bar{f}_0 = \frac{15(mkT)^2}{4\pi} n. \quad (175)$$

Finalmente,

$$I_0 = (mkT)^2 n. \quad (176)$$

La integral I_1 se calcula de manera parecida:

$$I_1 = \int d^3p p_3^4 \bar{f}_0 = \left(\int d\Omega \cos^4\theta \right) \int_0^\infty dp p^6 \bar{f}_0 = 3(mkT)^2 n. \quad (177)$$

Así, luego de una cancelación inesperada,

$$I = (\delta_{ij}\delta_{hl} + \delta_{ih}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jh}) n(mkT)^2. \quad (178)$$

Volviendo a la Ec. (169), resulta

$$\begin{aligned} J_{ijhl} = & m^3 \left(u_i u_j \delta_{hl} + u_i u_h \delta_{jl} + u_i u_l \delta_{jh} + u_j u_h \delta_{il} + u_j u_l \delta_{ih} + u_h u_l \delta_{ij} \right) nkT \\ & + (\delta_{ij}\delta_{hl} + \delta_{ih}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jh}) n(mkT)^2 + m^4 u_i u_j u_h u_l n. \end{aligned} \quad (179)$$

Para calcular $[\delta j_\epsilon]_i$ en la Ec. (167), debemos contraer los índices j y h ,

$$J_{il} = J_{ijjl} = m^3 \left(7u_i u_l + u^2 \delta_{il} \right) nkT + 5\delta_{il} n(mkT)^2 + m^4 u^2 u_i u_l n. \quad (180)$$

Al final de todo queda

$$\begin{aligned} [\delta j_\epsilon]_i = & -\frac{\tau}{2m^3} \partial_l J_{il} + \mathcal{O}(\tau^2) \\ = & -\frac{\tau}{2} \partial_l \left[(7kT + mu^2) n u_i u_l \right] - \frac{\tau}{2m} \partial_i \left[mu^2 nkT + 5n(kT)^2 \right] + \mathcal{O}(\tau^2). \end{aligned} \quad (181)$$

Podemos usar la ecuación de continuidad para simplificar el primer término,

$$\partial_l \left[(7kT + mu^2) n u_i u_l \right] = n \mathbf{u} \cdot \nabla \left[(7kT + mu^2) u_i \right]. \quad (182)$$

Luego,

$$\delta j_\epsilon = -\frac{\tau}{2} n (\mathbf{u} \cdot \nabla) \left[(7kT + mu^2) \mathbf{u} \right] - \frac{\tau}{2m} \nabla_i \left[mu^2 nkT + 5n(kT)^2 \right] + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (183)$$

Mediante las ecuaciones (134), esto puede simplificarse aún más. Los pasos intermedios no son muy interesantes. El resultado final es

$$\delta j_\epsilon = -\tau \left[n (\mathbf{u} \cdot \nabla) (kT \mathbf{u}) + \frac{1}{m} (nkT) \nabla \left(\frac{5}{2} kT + \frac{1}{2} mu^2 \right) \right] + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (184)$$

Si hubiéramos asumido que $\mathbf{u} = 0$, los cálculos habrían sido mucho más sencillos. El enunciado de la guía sólo pide calcular δj_ϵ en ese caso,

$$\delta j_\epsilon = -\left(\frac{5\tau n k^2 T}{2m} \right) \nabla T + \mathcal{O}(\tau^2), \quad \mathbf{u} = 0. \quad (185)$$

En la Ec. (166) está el resultado de orden cero,

$$\mathbf{j}_\epsilon^{(0)} = \frac{5}{2}nkT \mathbf{u} + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 n\mathbf{u}, \quad (186)$$

que se anula cuando $\mathbf{u} = 0$; de manera que hasta orden τ resulta

$$\mathbf{j}_\epsilon = \mathbf{j}_\epsilon^{(0)} + \delta\mathbf{j}_\epsilon = - \left(\frac{5\tau nk^2 T}{2m} \right) \nabla T, \quad \mathbf{u} = 0. \quad (187)$$

El coeficiente que multiplica al gradiente de $-T$ es la conductividad térmica,

$$\kappa = \frac{5\tau nk^2 T}{2m}. \quad (188)$$

Resumen de lo sucedido

Buscamos una solución de la ecuación de Maxwell–Boltzmann de la forma

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \\ &= \frac{n(\mathbf{r}, t)}{[2\pi mkT(\mathbf{r}, t)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{|\mathbf{p} - m\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2}{2mkT(\mathbf{r}, t)}\right] + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \end{aligned} \quad (189)$$

Bajo la aproximación de tiempo de relajación, la ecuación de transporte de Boltzmann, sin fueras externas, se escribe como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f = -\frac{\delta f}{\tau}. \quad (190)$$

En régimen estacionario,

$$\delta f = -\tau \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f_0 + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (191)$$

Sobre δf impusimos tres condiciones,

$$\int d^3p \delta f = 0, \quad \int d^3p \mathbf{p} \delta f = 0, \quad \int d^3p p^2 \delta f = 0. \quad (192)$$

En general, debido a que el término de colisiones es proporcional δf , estas condiciones garantizan las leyes de conservación del número de partículas, del impulso y de la energía, respectivamente. Cuando δf está dada por la Ec. (191), las condiciones (192) pueden leerse como las ecuaciones de conservación a más bajo orden (aunque sabemos que la primera de ellas es exacta):

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{j}^{(0)} = 0, \\ \nabla \cdot \Theta^{(0)} = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{j}_\epsilon^{(0)} = 0, \end{cases} \quad (193)$$

donde

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j}^{(0)} &= \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} f_0 = n\mathbf{u}, \\
 \Theta_{ij}^{(0)} &= \int d^3p \frac{p_i p_j}{m} f_0 = nkT\delta_{ij} + mn u_i u_j, \\
 \mathbf{j}_\epsilon^{(0)} &= \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} f_0 = \frac{5}{2}nkT\mathbf{u} + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 n\mathbf{u}.
 \end{aligned} \tag{194}$$

Al reemplazar estas expresiones en las Ecs. (193), llegamos a las ecuaciones de orden cero

$$\begin{cases} \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \\ \nabla(nkT) + mn(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = 0, \\ \frac{3}{2}\mathbf{u} \cdot \nabla T + T \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases} \tag{195}$$

Por otro lado, cuando calculamos las correcciones a las corrientes, obtuvimos

$$\begin{aligned}
 \delta\mathbf{j} &= \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \delta f = 0, \\
 \delta\Theta_{ij} &= \int d^3p \frac{p_i p_j}{m} \delta f = -\tau n \left[\mathbf{u} \cdot \nabla (kT) \delta_{ij} + kT (\partial_i u_j + \partial_j u_i) \right] + \mathcal{O}(\tau^2), \\
 \delta\mathbf{j}_\epsilon &= \int d^3p \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{p^2}{2m} \delta f = -\tau \left[n(\mathbf{u} \cdot \nabla)(kT\mathbf{u}) + \frac{1}{m}(nkT)\nabla\left(\frac{5}{2}kT + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2\right) \right] + \mathcal{O}(\tau^2).
 \end{aligned} \tag{196}$$

Las ecuaciones de conservación hasta orden τ son las que resultan de desarrollar explícitamente hasta ese orden las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \mathbf{j} &= \nabla \cdot [\mathbf{j}^{(0)} + \delta\mathbf{j}] = 0, \\
 \nabla \cdot \Theta &= \nabla \cdot [\Theta^{(0)} + \delta\Theta] = 0, \\
 \nabla \cdot \mathbf{j}_\epsilon &= \nabla \cdot [\mathbf{j}_\epsilon^{(0)} + \delta\mathbf{j}_\epsilon] = 0.
 \end{aligned} \tag{197}$$

Escritas por extenso, estas son las ecuaciones macroscópicas que deben satisfacer las funciones n , \mathbf{u} y T . La única que es sencilla de tratar es la primera, que se lee como

$$\nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \tag{198}$$

y que, según dijimos harto, es exacta. Las otras dos ecuaciones son

$$\begin{aligned} \nabla(nkT) + mn(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla \cdot \left\{ \tau nkT \left[\frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} - \boldsymbol{\Lambda} \right] \right\} &= \mathcal{O}(\tau^2), \\ \frac{3}{2}\mathbf{u} \cdot \nabla T + T \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \left\{ \tau n \left[(\mathbf{u} \cdot \nabla)(kT\mathbf{u}) + \frac{kT}{m} \nabla \left(\frac{5}{2}kT + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 \right) \right] \right\} &= \mathcal{O}(\tau^2), \end{aligned} \quad (199)$$

donde $\Lambda_{ij} = \partial_i u_j + \partial_j u_i$. Esto quiere decir que en el orden siguiente de la aproximación, las Ecs. (195) deben reemplazarse por estas otras:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \\ \nabla(nkT) + mn(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla \cdot \left\{ \tau nkT \left[\frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} - \boldsymbol{\Lambda} \right] \right\} = 0, \\ \frac{3}{2}\mathbf{u} \cdot \nabla T + T \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \left\{ \tau n \left[(\mathbf{u} \cdot \nabla)(kT\mathbf{u}) + \frac{kT}{m} \nabla \left(\frac{5}{2}kT + \frac{1}{2}m\mathbf{u}^2 \right) \right] \right\} = 0. \end{array} \right. \quad (200)$$

Un detalle esencial es que no hemos supuesto que τ sea constante. Por el contrario, τ es habitualmente una función de n y T . Las últimas dos ecuaciones dan muchísimo trabajo, salvo cuando se asume que $\mathbf{u} = 0$. Bajo tal supuesto, la ecuación de conservación para el número de partículas se satisface automáticamente. Las otras dos ecuaciones se reducen a

$$\begin{aligned} \nabla(nT) &= 0, \\ \nabla \cdot (\tau n T \nabla T) &= 0. \end{aligned} \quad (201)$$

En el siguiente problema, se resuelven estas ecuaciones para una situación muy sencilla. Para las ecuaciones generales, pueden consultar el capítulo 5 del libro de Huang; son las pavorosas ecuaciones 5.96–5.98, junto con la larga lista de definiciones que las preceden.

■ Problema 3

La situación general es la siguiente: un gas está en reposo, en régimen estacionario, sin fuerzas externas y con una temperatura y una densidad levemente inhomogéneas. Usando la aproximación de equilibrio local y de tiempo de relajación, encontrar las ecuaciones que determinan la densidad de partículas y la temperatura. Deberá proponer una forma explícita para τ , basándose en el modelo más simple de colisiones que pueda imaginar. En particular, considere la situación en la que el gas está entre dos placas infinitas paralelas separadas una distancia L . La temperatura de una de las placas es T_0 y la de la otra placa es T_1 . Sobre la primera placa la densidad es n_0 . Encontrar T y n como funciones de la posición. Comparar con la solución que resulta de la simple interpolación lineal.

■ **Solución.** En cuanto a las ecuaciones que determinan n y T , las hemos escrito más arriba. Las repetimos para tenerlas más a la vista,

$$\nabla(nT) = 0, \quad (202)$$

$$\nabla \cdot (\tau n T \nabla T) = 0.$$

Necesitamos una expresión para el tiempo de relajación τ . La aproximación más simple parte de la siguiente premisa: para que una partícula del gas choque contra otra, deberá recorrer una distancia tal que en el volumen que barra haya, en promedio, una partícula. Llamemos σ al área efectiva para el choque entre dos partículas, entonces, lo que estamos proponiendo es que

$$\bar{v}\tau\sigma = \frac{1}{n}. \quad (203)$$

Aquí \bar{v} es la magnitud típica de la velocidad de las partículas. Como la energía media por partícula es

$$\langle \epsilon \rangle = \left\langle \frac{1}{2}mv^2 \right\rangle = \frac{3}{2}kT, \quad (204)$$

el valor típico de v tiene que ser del orden de

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{kT}{m}}. \quad (205)$$

Luego,

$$\tau n = \frac{\sqrt{m}}{\sigma\sqrt{kT}}. \quad (206)$$

Con esto, la segunda Ec. (202) se lee como

$$\nabla \cdot (\sqrt{T} \nabla T) = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla^2 T^{3/2} = 0. \quad (207)$$

Finalmente, las dos ecuaciones son

$$\begin{aligned} \nabla(nT) &= 0, \\ \nabla^2 T^{3/2} &= 0. \end{aligned} \quad (208)$$

En el caso de las dos placas infinitas paralelas, a temperaturas T_0 y T_1 , buscamos una solución que sólo dependa de la coordenada normal a las placas. Supongamos que la placa a temperatura T_0 esté en el plano $x = 0$, y que la segunda placa esté en el plano $x = L$. Proponemos soluciones de la forma

$$n(\mathbf{r}) = n(x), \quad T(\mathbf{r}) = T(x). \quad (209)$$

Debe ser entonces

$$n(x)T(x) = n_0T_0, \quad (210)$$

donde n_0 es la densidad sobre la primera placa. Por otro lado,

$$\frac{d^2}{dx^2}T^{3/2}(x) = 0, \quad (211)$$

con lo que resulta

$$T^{3/2}(x) = T_0^{3/2} + \frac{x}{L} (T_1^{3/2} - T_0^{3/2}). \quad (212)$$

Equivalentemente,

$$T(x) = \left\{ 1 + \frac{x}{L} \left[\left(\frac{T_1}{T_0} \right)^{3/2} - 1 \right] \right\}^{2/3} T_0. \quad (213)$$

La densidad de partículas es

$$n(x) = \left\{ 1 + \frac{x}{L} \left[\left(\frac{T_1}{T_0} \right)^{3/2} - 1 \right] \right\}^{-2/3} n_0. \quad (214)$$

Conviene adimensionalizar el problema, introduciendo una temperatura adimensional t , una densidad adimensional ν y una longitud adimensional s ,

$$t = \frac{T}{T_0}, \quad \nu = \frac{n}{n_0}, \quad s = \frac{x}{L}. \quad (215)$$

Entonces,

$$t(s) = \left[1 + s \left(t_1^{3/2} - 1 \right) \right]^{2/3}, \quad (216)$$

$$\nu(s) = \left[1 + s \left(t_1^{3/2} - 1 \right) \right]^{-2/3}.$$

Para ver cómo se compara este perfil de temperaturas con el que se obtiene mediante la simple interpolación lineal, escribamos

$$t_1 = 1 + \Delta t. \quad (217)$$

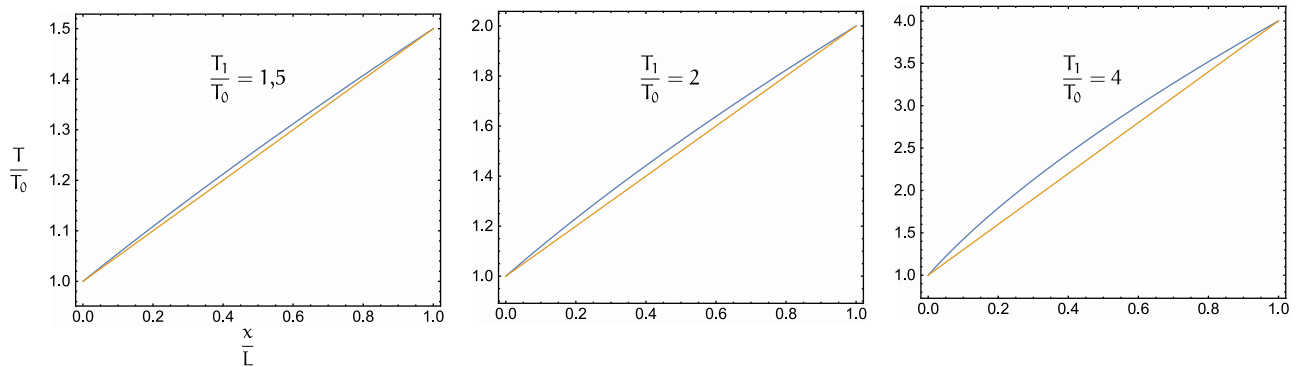
Por lo tanto,

$$t(s) = \left\{ 1 + s \left[(1 + \Delta t)^{3/2} - 1 \right] \right\}^{2/3}. \quad (218)$$

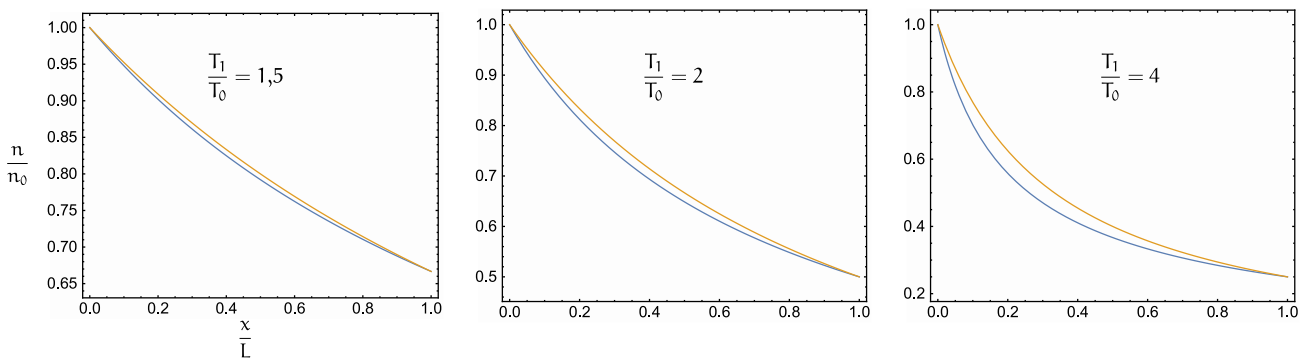
Expandiendo hasta orden Δt^2 , resulta

$$t(s) \simeq \left\{ 1 + s \left[\frac{3}{2} \Delta t + \frac{3}{8} \Delta t^2 \right] \right\}^{2/3} \simeq 1 + s \Delta t + \frac{1}{4} (s - s^2) \Delta t^2. \quad (219)$$

La siguiente figura muestra la solución *exacta* para la temperatura y la interpolación lineal para varios valores del cociente $t_1 = T_1/T_0$. Aun para valores relativamente grandes, la solución exacta se aparta poco de la interpolación lineal.



Correspondientes a estos perfiles de temperatura, están los siguientes perfiles de densidad.



Problemas propuestos

- Aplicar la aproximación de equilibrio local y de tiempo de relajación hasta primer orden para un gas bidimensional.
- Aplicar la aproximación de equilibrio local y de tiempo de relajación hasta primer orden para un gas unidimensional.
- Encontrar el equivalente de las Ecs. (200) cuando el régimen no es estacionario y hay fuerzas externas, siempre bajo la hipótesis de que $\nabla_p \cdot \mathbf{F} = 0$. Pueden hacer una cosa por vez.