

# Nuestra Facultad

## TESIS DOCTORALES

### MECÁNICA ESTADÍSTICA DE FLUIDOS FUERA DEL EQUILIBRIO EN LA MESOESCALA

Esta Tesis se enmarca dentro de uno de los campos básicos de la Física como es el estudio de las propiedades dinámicas y estadísticas de fluidos clásicos simples.

Un fluido simple se caracteriza por estar constituido por partículas (ya sean átomos o moléculas) que a distancias cortas se repelen y que a distancias largas experimentan fuerzas cohesivas débiles. Pero incluso dentro de los fluidos simples existen diferencias debidas a que la naturaleza se estructura en niveles jerárquicos, y que cada nivel tiene su escala típica para tiempos, longitudes y energías, que varían desde lo submicroscópico hasta lo supergaláctico.

Así, a “escalas grandes” el fluido tiene un aspecto continuo mientras que a medida que nuestra escala de observación se reduce empieza a manifestarse el hecho de que el fluido está compuesto de partículas. Por ejemplo, cerca de las paredes del contenedor, las moléculas de fluido tienden a ordenarse en capas.

Nuestra Tesis intenta dar una explicación a estos fenómenos, para lo cual utiliza los siguientes ingredientes: la *Mecánica Estadística*, como la parte de la Física que estudia cómo se relacionan las distintas escalas de observación; el comportamiento dinámico de los fluidos simples *fuera del equilibrio*; y la elección del nivel de descripción *mesoscópico*, pues nos interesa conocer cuántas moléculas hay en una región del espacio y qué velocidad y energía promedio tienen, conformando una descripción hidrodinámica del fluido simple.

Los resultados más relevantes de la Tesis son:

- La introducción del nivel de descripción propio de los campos de densidad de energía y densidad, estableciendo las correspondientes ecuaciones dinámicas, que tienen utilidad en los fenómenos del transporte de partículas y energía en la nanoescala.

- Para el nivel de descripción cinético hemos obtenido la ecuación para el funcional de Boltzmann explícita. La parte reversible de dicha ecuación es exacta, mientras que en su parte irreversible, bajo la aproximación de equilibrio local, se recuperan las ecuaciones de la hidrodinámica isoterma con la estructura del fluido incorporada.
- Por último, hemos derivado, a partir de las ecuaciones de Hamilton, la dinámica de variables hidrodinámicas discretas, que se pueden entender como las ecuaciones de Navier-Stokes en una red arbitraria.

En resumen, la Tesis es una generalización que estudia la hidrodinámica en la mesoescala, manteniendo la información sobre los aspectos particulados del fluido.

Para concluir, hemos obtenido ecuaciones dinámicas que sean de utilidad, en el sentido de que todas las cantidades que aparecen estén explícitamente formuladas, aunque esto nos ha obligado a realizar aproximaciones que deben ser contrastadas. En especial, la aproximación Markoviana, que presupone que las variables seleccionadas evolucionan en una escala temporal “lenta” respecto las demás, y la aproximación local para el cálculo de los coeficientes de transporte. La bondad de estas aproximaciones debería comprobarse a través de simulaciones de dinámica molecular en sistemas físicos concretos, para lo cual serían necesarios resultados analíticos explícitos, o bien obtener expresiones discretas de las ecuaciones continuas obtenidas. Ambas son líneas abiertas de investigación para el futuro.

Jesús González Anero  
jesusanero@gmail.com