

~~T 10/104~~
T 10/104

UNIVERSIDAD DE GRANADA
12 SR. 1999
COMISION DE DOCTORADO



UNIVERSIDAD DE GRANADA
Facultad de Ciencias
Fecha 22/4/99
ENTRADA NUM. 1419

UNIVERSIDAD DE GRANADA

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA

BIBLIOTECA UNIVERSITARIA
GRANADA
N.º Documento b18380618
N.º Copia i16433099

*Análisis de Ecuaciones en Derivadas Parciales
en Teoría Cinética y Cuántica*

José Luis López Fernández

José Luis López Fernández

La presente memoria, titulada "Análisis de Ecuaciones en Derivadas Parciales en Teoría Cinética y Cuántica", ha sido realizada por José Luis López Fernández bajo la dirección del Profesor Dr. Juan S. Soler Vizcaíno, del Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Granada, para optar al título de Doctor en Ciencias Matemáticas por la Universidad de Granada.

V. B. Director,

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Soler', with a horizontal line underneath.

Juan S. Soler Vizcaíno

Para Juana, Juan y tío Enrique; *in memoriam*

A mis padres

Agradecimientos

Desearía comenzar expresando mi más sincero agradecimiento a todas aquellas personas, anónimas muchas de ellas, que son copartícipes, bien por el apoyo recibido por su parte bien por el tiempo desinteresado que han invertido en mí, de este trabajo.

Asímismo quiero agradecer al Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Granada por su acogida y por poner a mi disposición todos los medios necesarios para confeccionar esta memoria.

Es también mi voluntad mostrar mi gratitud para con mi familia y mis amigos, sin cuya comprensión y estímulo difícilmente habría podido encontrar el estado emocional adecuado para llevar a buen puerto mi labor investigadora. Y especialmente para con María del Mar, por todos los "no puedo" que ha recibido durante todo este tiempo, acompañados de excusas que sin entender aceptaba.

Estoy también profundamente agradecido a los profesores Luis López Bonilla y Pierre Degond por haberme acogido en la Universidad Carlos III de Madrid y en la Universidad Paul Sabatier de Toulouse, respectivamente, y por su amabilidad y dedicación durante mis estancias.

Agradezco también a todas aquellas personas que me han prestado su valiosa colaboración científica, por el enriquecimiento matemático que me ha reportado todo lo que he podido aprender de ellas: Anton Arnold, Pierre Degond, Peter A. Markowich, Pierre-François Peyrard, Frédéric Poupaud y Christian Schmeiser.

Aún le debo a Juan Soler el que siento es el más arraigado de mis agradecimientos, pero eso será el día que encuentre las palabras oportunas que permitan conjugar tanta humanidad y tanta ciencia, tanta bondad y tanto entusiasmo, tanta confianza en mí y tanta fe en el trabajo. Si existen.

Índice

| | |
|---|-----------|
| Capítulo 1. Introducción | 5 |
| 1.1 Teoría de transporte cinético | 5 |
| 1.1.1 Generalidades | 5 |
| 1.1.2 Modelos de transporte de rayos cósmicos | 6 |
| 1.1.3 Resultados | 8 |
| 1.2 Teoría de transporte cuántico | 10 |
| 1.2.1 Generalidades | 10 |
| 1.2.2 Modelos de transporte de partículas cuánticas | 13 |
| 1.2.3 Resultados | 20 |
| | |
| Capítulo 2. Un modelo de colisiones onda-partícula: dinámica macroscópica | 25 |
| 2.1 Introducción | 25 |
| 2.2 El operador de colisión | 30 |
| 2.3 Grupo de escala hidrodinámico: el límite compresible | 36 |
| 2.4 Grupo de escala difusivo: el límite incompresible | 57 |
| 2.5 Apéndice A: Demostración de los Lemas 1.3.2 y 1.4.2 | 68 |
| 2.6 Apéndice B | 72 |
| | |
| Capítulo 3. Un modelo de colisiones onda-partícula: existencia de soluciones | 75 |
| 3.1 Introducción | 75 |
| 3.2 Propiedades del operador de colisión | 79 |
| 3.3 El resultado de existencia | 82 |
| 3.4 Propagación de momentos y leyes de conservación | 88 |

| | |
|--|-----|
| Capítulo 4. Un modelo cuántico disipativo de tipo Fokker–Planck | 93 |
| 4.1 Introducción | 93 |
| 4.2 Modelos de Wigner–Fokker–Planck | 97 |
| 4.2.1 Algunos aspectos sobre la derivación de modelos cuánticos de tipo Fokker–Planck | 97 |
| 4.2.2 La ecuación para la matriz de densidad en forma de Lindblad | 100 |
| 4.2.3 Estados de equilibrio | 104 |
| 4.2.4 Propagación de momentos | 105 |
| 4.3 Existencia de soluciones locales en tiempo | 108 |
| 4.3.1 La solución fundamental y el concepto de solución integral . | 110 |
| 4.3.2 Estimaciones <i>a priori</i> | 115 |
| 4.3.3 Sucesión de soluciones aproximadas y paso al límite | 124 |
| 4.4 Unicidad y estabilidad | 127 |
| 4.5 Comportamiento asintótico cuando $t \rightarrow \infty$ | 129 |
| 4.5.1 Cambio de escala y estimaciones <i>a priori</i> | 129 |
| 4.5.2 Compacidad en L^1 | 136 |
| Capítulo 5. Comportamiento asintótico de Schrödinger–Poisson y Wigner–Poisson | 141 |
| 5.1 Introducción | 141 |
| 5.2 Cambio de escala | 148 |
| 5.3 La densidad y el potencial asintóticos | 151 |
| 5.4 Compacidad débil de la sucesión de funciones de onda | 160 |
| 5.5 Comportamiento asintótico de un sistema de Schrödinger–Poisson . | 162 |
| 5.6 Comportamiento asintótico de la ecuación de Wigner–Poisson . . . | 164 |
| Capítulo 6. Transformadas de Wigner en espacio–tiempo y límite de altas frecuencias | 167 |
| 6.1 Transformadas de Wigner en espacio–tiempo | 173 |
| 6.2 La ecuación límite | 182 |
| 6.3 Comportamiento asintótico para estados cuánticos mixtos | 194 |
| Capítulo 7. Apéndice | 197 |

Capítulo 1

Introducción

El contenido y los objetivos de este trabajo pueden agruparse en dos bloques temáticos bien diferenciados: por un lado, nos proponemos analizar el comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes de las soluciones a los modelos de transporte mecano-cuánticos de Schrödinger/Hartree-Poisson y Wigner-Poisson en tres dimensiones, así como el de las soluciones a un modelo cuántico de carácter disipativo con núcleo de colisión de tipo Fokker-Planck al que hemos denominado sistema de Wigner-Fokker-Planck, y del que también analizaremos las propiedades de existencia, unicidad y regularidad de sus soluciones. Por otro lado, iniciamos el estudio matemático de un modelo cinético cuasi-lineal para plasmas astrofísicos en el que prevalecen las colisiones de tipo onda-partícula. En particular, se construyen la teoría macroscópica -que describe los regímenes compresible e incompresible de la dinámica de fluidos asociada- y la teoría matemática de existencia de soluciones al modelo propuesto.

1.1 Teoría de transporte cinético

1.1.1 Generalidades

La Teoría Cinética describe procesos de transporte en los que desempeñan un papel relevante las colisiones entre las partículas. Es bien sabido que, en ausencia de fuerzas que actúen sobre las partículas durante su movimiento entre dos colisiones consecutivas, la evolución de su función de distribución $f(x, \xi, t)$ está representada por la ecuación de Liouville

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f = 0, \quad (1.1)$$

donde x es la variable de posición, ξ la variable de momento y t la variable de tiempo. Por tanto, f es constante sobre las trayectorias $y = x + \xi t$ del sistema. Por otro lado, si tenemos en cuenta la acción de un campo de fuerzas externo $F(x, \xi, t)$ sobre el sistema, la evolución de f viene descrita por la ecuación

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f + \frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi f = 0, \quad (1.2)$$

donde m denota la masa de las partículas. Finalmente han de evaluarse los efectos de las colisiones sobre la evolución temporal de f , según su naturaleza y su relevancia a lo largo del fenómeno de transporte. Generalmente la consideración de colisiones incorporará un término no lineal a la ecuación de Liouville. Uno de los ejemplos clásicos lo constituye la ecuación de Boltzmann de la teoría cinética de gases, que introduce un núcleo de colisión cuadrático.

1.1.2 Modelos de transporte de rayos cósmicos

En los capítulos segundo y tercero se aborda el estudio de un modelo cinético cuasi-lineal que rige el transporte de rayos cósmicos y flujos cometarios en un plasma astrofísico. Este modelo viene descrito por la siguiente ecuación cinética con núcleo de colisión $Q(f)$ de tipo onda-partícula:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f + \frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi f = \tau^{-1} Q(f), \quad (1.3)$$

$$f(x, \xi, t = 0) = f_0(x, \xi), \quad (1.4)$$

donde f es la función de distribución de las partículas, F la fuerza externa aplicada sobre el sistema, $\tau^{-1} = \tau^{-1}(x, t)$ representa a la frecuencia de colisión, que depende del estado local del plasma, y donde $Q(f)$ es un operador de colisión simplificado de tipo onda-partícula definido por

$$Q(f)(x, \xi, t) = \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} f(x, u_f(x, t) + |\xi - u_f(x, t)|\omega, t) d\omega - f(x, \xi, t), \quad (1.5)$$

siendo \mathcal{S}^{d-1} la esfera de radio unidad en \mathbb{R}^{d-1} y d la dimensión espacial del problema. En esta expresión $u_f(x, t)$, responsable del carácter no lineal de la ecuación (1.3), es la velocidad media asociada a la función de distribución f , definida por

$$u_f(x, t) = \left(\int_{\mathbb{R}^d} f(x, \xi, t) \xi d\xi \right) \left(\int_{\mathbb{R}^d} f(x, \xi, t) d\xi \right)^{-1}. \quad (1.6)$$

Este modelo cinético suministra una ecuación de transporte para un gas de partículas energéticas cargadas (rayos cósmicos) que se dispersan en base a las irregularidades turbulentas que se originan en los campos magnéticos embebidos en el plasma ambiente en el que se propagan. Esta ecuación proporciona una buena aproximación al modelado del transporte y aceleración de partículas en plasmas espaciales (en particular en lo que se refiere al transporte de rayos cósmicos en el medio interestelar o interplanetario), para lo cual sólo se requiere que el operador de colisión considerado contribuya a la relajación de la función de distribución hacia su parte isotrópica y que las velocidades aleatorias de las partículas sean mucho mayores que la velocidad intrínseca del fluido, que se considera no relativista. La motivación, los precedentes y los fundamentos físicos de este modelo pueden encontrarse en los trabajos de D. L. De Zeeuw, J. Earl, T. I. Gombosi, J. R. Jokipii, G. Morfill, K. J. Powell y L. L. Williams [43], [52], [100], [101] y [102]. Asimismo, la primera aproximación matemática relacionada con la aplicación de este modelo a la dinámica de gases a través del desarrollo clásico de Hilbert se debe a P. Degond y P. F. Peyrard [33].

Para este problema investigamos, en primer lugar, la dinámica macroscópica (en el sentido de los regímenes propios de la dinámica de fluidos) inducida por el operador de colisión Q . Para ello utilizamos primero el desarrollo asintótico clásico de Chapman-Enskog en el marco de un grupo de escala hidrodinámico. El modelo macroscópico que se obtiene aún conserva una variable cinética, la energía de las partículas en el sistema en reposo del fluido, aunque guarda algún parecido con la ecuación compresible de Navier-Stokes de la dinámica de gases. En segundo lugar analizamos un grupo de escala de tipo difusivo bajo la hipótesis de perturbaciones pequeñas respecto de un equilibrio global. En este caso, el modelo macroscópico asociado acopla la ecuación usual de Navier-Stokes incompresible con una ecuación de difusión para la función de distribución de energía de las partículas, ligadas ambas por una versión extendida de la ecuación de Boussinesq. Tanto en la aproximación hidrodinámica como en la difusiva los sistemas de momentos que se obtienen no son cerrados, de modo que los términos de conductividad térmica resultantes incluyen características de alta energía de las correspondientes funciones de distribución, abriendo así las puertas hacia nuevos modelos de turbulencia. Además, en ambos casos analizamos el efecto producido por un término de fuerza de Lorentz bajo la perspectiva del modelado físico de plasmas. Los cálculos que conducen a las demostraciones de estos resultados constituyen el objetivo principal del capítulo 2, aunque algunos de ellos quedarán relegados a un apéndice al final del capítulo para conseguir una mayor claridad en la presentación de los mismos.

1.1.3 Resultados

El modelado matemático de fenómenos de transporte a través de ecuaciones en derivadas parciales constituye una de las tendencias actuales más en boga de la Matemática Aplicada y la Física Teórica. Este interés creciente por la formulación y el análisis de modelos matemáticos para problemas físicos de muy diversa índole alcanza su mayor justificación en la cada vez más estrecha conexión existente entre ciencia y tecnología, ya sea en el ámbito de la informática, la astrofísica, la microelectrónica o las telecomunicaciones.

Los contenidos del Capítulo 2 responden a esta perspectiva. En particular, se justifica la validez macroscópica del modelo cinético para fluidos cósmicos bajo estudio a través de una descripción exhaustiva del operador de colisión asociado, a la vez que se lleva a cabo formalmente el análisis de los límites de escala hidrodinámico y de difusión. En el régimen hidrodinámico se demuestra que la existencia de una solución aproximada $f_\epsilon = g_\epsilon + \epsilon f_\epsilon^1 + \epsilon^2 f_\epsilon^2$ de orden ϵ^2 para la ecuación cinética reescalada

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f_\epsilon &= \frac{\tau^{-1}}{\epsilon} Q(f_\epsilon), \\ f_\epsilon(x, \xi, 0) &= f_0(x, \xi), \end{aligned}$$

equivale a que

$$g_\epsilon(x, \frac{|\xi - u_\epsilon|^2}{2}, t) = \frac{1}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} f_\epsilon(x, u_{f_\epsilon} + |\xi - u_{f_\epsilon}| \omega, t) d\omega + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

y

$$u_\epsilon(x, t) = \rho_\epsilon(x, t)^{-1} \int_{\mathbb{R}^d} f_\epsilon(x, \xi, t) \xi d\xi + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

satisfagan el siguiente sistema de ecuaciones, con $v = |\xi - u_\epsilon|^2/2$:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial g_\epsilon}{\partial t} + (u_\epsilon \cdot \nabla_x) g_\epsilon - \frac{2}{d} v \frac{\partial g_\epsilon}{\partial v} (\nabla_x \cdot u_\epsilon) \\ &= \epsilon \frac{2}{d} v^{1-\frac{d}{2}} (\nabla_x + \frac{1}{m\rho_\epsilon} \nabla_x p_\epsilon \frac{\partial}{\partial v}) \cdot \left(\tau v^{\frac{d}{2}} (\nabla_x + \frac{1}{m\rho_\epsilon} \nabla_x p_\epsilon \frac{\partial}{\partial v}) g_\epsilon \right) \\ & \quad + \epsilon \frac{4\tau}{d(d+2)} v^{1-\frac{d}{2}} \frac{\partial}{\partial v} (v^{\frac{d+2}{2}} \frac{\partial g_\epsilon}{\partial v}) (\sigma(u_\epsilon) : \nabla_x u_\epsilon), \\ & m \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_\epsilon u_\epsilon) + \nabla_x \cdot (\rho_\epsilon u_\epsilon u_\epsilon) \right) + \nabla_x p_\epsilon = \epsilon \nabla_x \cdot (\mu_\epsilon \sigma(u_\epsilon)), \end{aligned}$$

donde ρ_ϵ es la densidad de masa del sistema escalado, u_{f_ϵ} la velocidad media asociada a la función de distribución f_ϵ , $\sigma(u_\epsilon)$ el tensor de deformación, μ_ϵ la viscosidad y p_ϵ es la presión (ver Teorema 2.3.1). Además, analizamos el efecto que produce sobre la dinámica del sistema la acción de una fuerza de Lorentz (ver Teorema 2.3.4) y probamos que el sistema de momentos deducido de las ecuaciones para g_ϵ y u_ϵ no es cerrado (ver Proposición 2.3.3), lo cual hace que el modelo sea particularmente interesante por la posible aparición de fenómenos de turbulencia.

Por su parte, para la aproximación difusiva

$$\epsilon \frac{\partial F_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) F_\epsilon = \frac{\tau^{-1}}{\epsilon} Q(F_\epsilon)$$

demostramos que si $F_\epsilon(x, \xi, t) = G(|\xi|^2/2) + \epsilon f_\epsilon(x, \xi, t)$, donde G es una distribución de equilibrio global y $f_\epsilon \rightarrow f$ en un espacio “adecuado” cuando $\epsilon \rightarrow 0$, entonces f ha de ser de la forma

$$f(x, \xi, t) = \Phi(x, \frac{|\xi|^2}{2}, t) - G'(\frac{|\xi|^2}{2})(\xi \cdot u(x, t)).$$

Además, Φ y u satisfacen respectivamente la ecuación de difusión

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) \Phi + \frac{2v}{d} G' r = \frac{2v}{d} \nabla_x \cdot (\tau \nabla_x \Phi)$$

y la ecuación de Navier–Stokes incompresible, que a su vez aparecen ligadas por la siguiente condición de Boussinesq generalizada para la energía interna e de Φ : $\nabla_x e = 0$. Finalmente, $r = r(x, t)$ es el multiplicador de Lagrange asociado a esta última ecuación (ver Teorema 2.4.1). Basándose en nuestra aproximación, Laure Saint-Raymond ha demostrado recientemente en [91] de forma rigurosa el paso al límite en el régimen de difusión, utilizando estimaciones de entropía relativa en torno a una maxwelliana absoluta.

El capítulo 3 está dedicado a establecer un resultado de existencia global de soluciones para el problema (1.3)-(1.4) con dato inicial $f_0 \geq 0$ perteneciente a $L^1(\mathbf{R}^{2d}) \cap L^\infty(\mathbf{R}^{2d})$ y con energía cinética finita. La demostración de este resultado se basa en un argumento de punto fijo que requiere de la utilización de los resultados de compacidad subyacentes a los bien conocidos “lemas de momentos”, establecidos por vez primera por F. Golse, B. Perthame y R. Sentis en [50] y posteriormente mejorados por los mismos autores y P. L. Lions en [49]. En este sentido, analizamos en primer lugar la correspondiente ecuación lineal (para una función de

velocidad dada $u(x, t)$ acotada) para más tarde obtener las estimaciones *a priori* y las propiedades de compacidad necesarias (¡para las cuales basta con controlar la función de velocidad u_f en $L^1_{loc}(\mathbb{R}^d)$!) que garanticen la existencia de una función límite de la sucesión de soluciones aproximadas que construimos. Es significativo que la cuasi-linealidad de este problema hace innecesaria la obtención de las clásicas estimaciones de entropía para la prueba de existencia. En particular, se demuestra la existencia de soluciones débiles $f \geq 0$ de (1.3)-(1.4) pertenecientes a $L^1(\mathbb{R}^{2d}) \cap L^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ bajo la hipótesis

$$\int_{\mathbb{R}^d} f_0(x - \xi t, \xi) d\xi \geq \gamma_{K,T} > 0,$$

para $x \in K$ un subconjunto compacto de \mathbb{R}^d y $t \in [0, T]$ con $T > 0$ (ver Teorema 3.1.3). Además, deducimos las principales leyes de conservación y las ecuaciones fundamentales para la propagación de momentos (ver Teoremas 1 y 2).

1.2 Teoría de transporte cuántico

1.2.1 Generalidades

La segunda parte de la memoria concierne básicamente a problemas propios de la Mecánica Cuántica y la Cinética Cuántica. En Mecánica Clásica, una vez que se especifica el estado del sistema el valor de cualquier observable queda completamente determinado. No ocurre así, sin embargo, en Mecánica Cuántica: en un estado dado los observables tienen solamente distribuciones de probabilidad de valores, que en algunas ocasiones, aunque no es lo usual, pueden concentrarse en un único punto. Por tanto, los observables cuánticos (es decir, operadores autoadjuntos definidos sobre un espacio de Hilbert) están sujetos a una interpretación probabilística.

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo describe la evolución de un conjunto de partículas cuánticas bajo la acción de un potencial. La función de onda ψ asociada a una partícula es una función de sus coordenadas espacial x y temporal t que describe las propiedades de un sistema físico. Si buscamos una ecuación en derivadas parciales que sea sistemáticamente satisfecha por la función de onda ψ , debemos dejarnos guiar por los siguientes principios:

- La ecuación debe ser lineal (desde un punto de vista de operadores) y homogénea para que se verifique el *principio de superposición*: si ψ_1 y ψ_2 son soluciones de la correspondiente ecuación de ondas para un sistema físico dado, cualquier combinación lineal de ellas $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ también ha de ser solución, donde α_1 y α_2 son constantes.
- Los resultados obtenidos a través de esta ecuación han de ser compatibles con los correspondientes a situaciones macroscópicas en el ámbito de la Mecánica Clásica, como se desprende del *principio de correspondencia*.
- Se admite que sólo será necesario el conocimiento de la función de onda en un instante de tiempo dado para determinar por completo la evolución del sistema. Por tanto, la ecuación que buscamos ha de ser de primer orden con respecto al tiempo; en caso contrario, habría que especificar un valor de algunas derivadas temporales de ψ para obtener una única solución.

Consideremos en primer lugar el movimiento no relativista en tres dimensiones de una partícula libre de masa m que tiene un momento p y una energía E bien definidos. En este caso, la evolución de la partícula está descrita por una onda plana

$$\psi_l(x, t) = Ae^{i(k \cdot x - \omega t)} = Ae^{i(p \cdot x - Et)/\hbar}, \quad (1.7)$$

caracterizada por el vector de onda $k = p/\hbar$ y la frecuencia angular $\omega = E/\hbar$, donde la constante A representa a la amplitud de la onda y \hbar es la constante de Planck. La frecuencia angular está relacionada con el vector de onda mediante la fórmula

$$\omega = \frac{\hbar|k|^2}{2m}, \quad (1.8)$$

que equivale a la siguiente relación clásica entre el momento y la energía de la partícula:

$$E = \frac{|p|^2}{2m}. \quad (1.9)$$

Derivando la expresión (1.7) para ψ_l con respecto al tiempo obtenemos que

$$\frac{\partial \psi_l}{\partial t} = -i\omega\psi_l = -i\frac{E}{\hbar}\psi_l = -i\frac{|p|^2}{2m\hbar}\psi_l. \quad (1.10)$$

Por otro lado, diferenciando (1.7) dos veces con respecto a x tenemos que

$$\Delta_x \psi_l = -|k|^2\psi_l = -\frac{|p|^2}{\hbar^2}\psi_l, \quad (1.11)$$

donde Δ_x representa al operador de Laplace actuando sobre la variable de posición. Por tanto, teniendo en cuenta (1.10) y (1.11) se puede comprobar fácilmente que la onda plana (1.7) verifica la ecuación en derivadas parciales

$$i\hbar \frac{\partial \psi_l}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x \psi_l, \quad (1.12)$$

que es la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el caso de una partícula libre.

En mecánica ondulatoria la energía total E y el momento p asociados a una partícula están representados, respectivamente, por los operadores diferenciales

$$\tilde{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \tilde{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla_x. \quad (1.13)$$

Entonces la ecuación (1.12) puede reescribirse de la forma

$$\tilde{E} \psi_l = \frac{1}{2m} \tilde{p}^2 \psi_l, \quad (1.14)$$

en clara analogía con la ecuación clásica (1.9). Observamos, por tanto, que el segundo miembro de la ecuación (1.14) representa al operador de energía cinética asociado a la partícula:

$$T = \frac{1}{2m} \tilde{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x.$$

Con el propósito de generalizar la ecuación de Schrödinger libre obtenida en (1.14), supongamos ahora que la partícula se mueve en un campo de fuerzas que procede de un potencial, $F(x, t) = -\nabla_x V(x, t)$. Como para el caso de una partícula clásica, la energía total E ha de venir dada por la suma de su energía cinética $|p|^2/2m$ y su energía potencial $V(x, t)$:

$$E = \frac{|p|^2}{2m} + V(x, t).$$

Como la energía potencial V no depende ni de p ni de E , en base a los argumentos establecidos en la discusión para el caso de una partícula libre estamos llamados a considerar los operadores \tilde{p} y \tilde{E} definidos en (1.13) y a plantear

$$\tilde{E} \psi = \left(\frac{1}{2m} \tilde{p}^2 + V \right) \psi,$$

con lo que se obtiene la siguiente generalización de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + V(x, t)\right) \psi(x, t), \quad (1.15)$$

que es la célebre ecuación de ondas de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula que se mueve en un potencial, ecuación que fue propuesta por E. Schrödinger en 1926. El operador que aparece entre paréntesis en el segundo miembro de (1.15) recibe el nombre de operador hamiltoniano asociado a la partícula cuántica:

$$H_{cuant} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + V,$$

por lo que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo puede reescribirse como

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_{cuant} \psi. \quad (1.16)$$

Por tanto, observamos que la ecuación (1.16) se puede obtener a partir de la ecuación clásica

$$E = H_{cl}(x, p, t) \stackrel{def}{=} \frac{|p|^2}{2m} + V(x, t)$$

mediante las transformaciones $E \mapsto \tilde{E}$, $p \mapsto \tilde{p}$ y aplicando los operadores \tilde{E} y $H_{cuant} = H_{cl}(x, \tilde{p}, t)$ a la función de onda $\psi(x, t)$ en ambos miembros de la ecuación.

1.2.2 Modelos de transporte de partículas cuánticas

• Sistema de Schrödinger–Poisson

La ecuación de Schrödinger–Poisson aparece cuando sometemos el movimiento de las partículas al campo coulombiano generado por su propia carga o, en términos matemáticos, cuando la ecuación de Schrödinger está acoplada, en una aproximación de campo medio, con la ecuación de Poisson

$$\Delta_x V = -\gamma n(\psi) \quad (1.17)$$

con “condición de contorno en infinito”

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x, t) = 0, \quad (1.18)$$

para la determinación del potencial modelado autoconsistentemente en todo el espacio:

$$V(x, t) = \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{n(y, t)}{|x - y|} dy. \quad (1.19)$$

En esta ecuación el parámetro γ representa el signo de la interacción, que puede ser de dos tipos: repulsiva o electrostática ($\gamma = 1$) y atractiva o gravitatoria ($\gamma = -1$), dependiendo del carácter de la fuerza coulombiana. Por otro lado, la expresión

$$n(\psi)(x, t) = |\psi(x, t)|^2$$

representa a la densidad de probabilidad de la distribución de partículas del sistema en la posición x y en el instante t , de acuerdo con el *postulado de Born*. Además, para cualquier instante t arbitrario la función de onda $\psi(x, t)$ puede elegirse de forma que satisfaga la condición de normalización

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad (1.20)$$

lo cual expresa simplemente el hecho de que la probabilidad de encontrar una partícula en algún punto del espacio de configuraciones en el instante t es 1. Es significativo el hecho de que existen funciones de onda que no pueden ser normalizadas de esta forma. Por ejemplo, la onda plana definida en (1.7) no es de cuadrado integrable, por lo que la integral que aparece en (1.20) diverge. Esto se debe a que una onda plana representa una situación física idealizada para el caso de una partícula libre con momento bien definido, lo cual indica, en virtud del *principio de incertidumbre* de Heisenberg, que está absolutamente deslocalizada. Nosotros sólo trataremos a partir de ahora con funciones de onda de cuadrado integrable que satisfagan (1.20).

Cada función de onda simple ψ_j (que representa a un estado cuántico puro) está asociada a una probabilidad de ocupación $\lambda_j \geq 0$, de forma que $\{\lambda_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ es una sucesión convergente de números reales no negativos tales que $\sum_{j \in \mathbb{N}} \lambda_j = 1$. En este caso, el vector infinito-dimensional $\psi(x, t) = (\psi_1(x, t), \psi_2(x, t), \dots)$, que es la función de onda correspondiente a un estado cuántico mixto, genera una densidad de posición total representada por

$$n(x, t) = \sum_{j \in \mathbb{N}} \lambda_j |\psi_j(x, t)|^2. \quad (1.21)$$

Observamos que el caso más simple, correspondiente a un estado cuántico puro, se reduce a la elección de la sucesión de probabilidades $\lambda_1 = 1, \lambda_j = 0 \forall j > 1$ y, por

tanto, en este caso la ecuación de Schrödinger vectorial se reduce a la ecuación de Schrödinger escalar (también llamada ecuación de Hartree).

El problema de valores iniciales no lineal de Schrödinger–Poisson con el que trataremos a lo largo de esta memoria, con condición inicial

$$\psi(x, 0) = \varphi(x), \quad (1.22)$$

vendrá determinado por la siguiente “condición de contorno en infinito”:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x, t) = 0. \quad (1.23)$$

Algunos resultados sobre el comportamiento asintótico cuando $t \rightarrow \infty$ de las soluciones de este sistema son analizados en los capítulos 5 y 6 en un contexto tridimensional y para el caso de una partícula simple. Concretamente, son demostrados en primer lugar, por simplicidad en la notación, para el caso de un estado cuántico puro y son posteriormente extendidos de forma directa al caso vectorial representado por un estado cuántico mixto.

• Sistema de Wigner–Poisson

El método de Wigner de la Mecánica Estadística Cuántica fue introducido por E. P. Wigner (ver [99]) en 1932 como una alternativa a la formulación estándar desarrollada en [98], con objeto de darle un tratamiento análogo al de la Mecánica Estadística Clásica; es decir, llevando a cabo integraciones sobre el espacio de fases posición–velocidad $\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3$ para una aproximación monopartícula del sistema de funciones complejas $f : \mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3 \mapsto \mathbb{C}$ en vez de calcular trazas de operadores lineales mecano–cuánticos definidos sobre un espacio de Hilbert. Este método consiste en definir una función de distribución $W = W(\psi)$ sobre el espacio de fases 6–dimensional, a la postre denominada función de distribución de Wigner asociada a la función de onda ψ , de la siguiente forma:

$$W(x, \xi, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_y^3} \bar{\psi}\left(x + \frac{\hbar}{2m}y, t\right) \psi\left(x - \frac{\hbar}{2m}y, t\right) e^{-iy \cdot \xi} dy, \quad (1.24)$$

donde el símbolo “ $\bar{\psi}$ ” denota a la función complejo conjugado. La función de distribución de Wigner toma siempre valores reales pero no es en general no negativa durante el proceso de evolución, por lo que no puede ser interpretada como una

auténtica función de probabilidad; de hecho, a menudo se la conoce con el nombre de distribución de cuasi-probabilidad de Wigner. Además, $W(x, \xi, t)$ resuelve el siguiente problema de valores iniciales:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W + \theta_{\hbar}[V]W = 0, \quad (1.25)$$

$$W(x, \xi, 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\varphi}(x + \frac{\hbar}{2m}y) \varphi(x - \frac{\hbar}{2m}y) e^{-iy \cdot \xi} dy, \quad (1.26)$$

donde hemos denotado por $\theta_{\hbar}[V]W$ al término pseudo-diferencial no local

$$\begin{aligned} (\theta_{\hbar}[V]W)(x, \xi, t) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{\hbar} \left(V(x + \frac{\hbar}{2m}y, t) - V(x - \frac{\hbar}{2m}y, t) \right) \\ &\quad \times W(x, \xi', t) e^{-i(\xi - \xi') \cdot y} d\xi' dy. \end{aligned} \quad (1.27)$$

De esta forma la ecuación de Wigner (1.25), también llamada ecuación de Liouville cuántica porque en el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$ se reduce a la ecuación de Liouville clásica (consultar los trabajos de P. A. Markowich y N. J. Mauser [78] y de P. L. Lions y T. Paul [73]), es una ecuación pseudo-diferencial lineal. Cabe destacar que la densidad de partículas puede recuperarse, por analogía con la teoría cinética clásica, a través del valor medio de la función de Wigner con respecto a la variable ξ del espacio de momentos, es decir,

$$n(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} W(x, \xi, t) d\xi. \quad (1.28)$$

Sin embargo, esta definición para la densidad de posición cuántica carece en principio de sentido ya que, por un lado, las funciones de Wigner no pertenecen generalmente a $L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$, mientras que por otro lado y tal como hemos señalado anteriormente, las funciones de Wigner no tienen por qué ser no negativas punto a punto, por lo que la densidad podría cambiar de signo durante la evolución. Para justificar la integración de (1.28) se introduce la siguiente sucesión regularizante de funciones positivas e integrables:

$$n(x, t) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3} W(x, \xi, t) e^{-\delta|\xi|^2/2} d\xi, \quad (1.29)$$

que converge en $L^1(\mathbb{R}_x^3)$.

En esta formulación, la función de distribución de Wigner W puede reescribirse en términos de la matriz de densidad asociada a la función de onda ψ de un sistema de partículas, definida por

$$\rho(x, y, t) = \bar{\psi}(x, t)\psi(y, t), \quad x, y \in \mathbb{R}^3, \quad t \geq 0, \quad (1.30)$$

de la forma

$$W(x, \xi, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \rho\left(x + \frac{\hbar}{2m}y, x - \frac{\hbar}{2m}y, t\right) e^{-iy \cdot \xi} dy. \quad (1.31)$$

La matriz de densidad de un sistema físico es una función de correlación espacial que describe completamente la dinámica de las excitaciones de un conjunto de partículas cuánticas. Derivando su expresión (1.30) con respecto al tiempo y utilizando la ecuación de Schrödinger (1.15) obtenemos la ecuación satisfecha por ρ , denominada ecuación de movimiento de Heisenberg o ecuación de von-Neumann:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = (H_x - H_y)\rho, \quad (1.32)$$

donde identificaremos el hamiltoniano $H = H_{cuant}$ siempre que no se preste a confusión y donde el subíndice correspondiente indica la variable sobre la cual este actúa. Un estado mixto de un sistema cuántico está unívocamente determinado, por tanto, por un operador $\tilde{\rho}$ positivo, autoadjunto, de clase traza ($\text{tr}|\tilde{\rho}| < \infty$) y de Hilbert-Schmidt, llamado operador matriz de densidad, que puede representarse como un operador integral en $L^2(\mathbb{R}^3)$ con núcleo dado por la función matriz de densidad ρ :

$$(\tilde{\rho}f)(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \rho(x, y, t)f(y, t) dy \quad (1.33)$$

para toda función $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$, donde hemos denotado por tr al operador usual de trazas. En particular,

$$\text{tr}\tilde{\rho} = \sum_{j \in \mathbb{N}} \lambda_j = \|\psi(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = 1.$$

El núcleo de este operador integral pertenece a $L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^3)$ y satisface las propiedades

$$\|\rho(\cdot, \cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^3)} = (\text{tr}|\tilde{\rho}|^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \rho(x, y, t) = \bar{\rho}(y, x, t).$$

Además, la matriz de densidad ρ admite un desarrollo diagonal en serie de Fourier dado por

$$\rho(x, y, t) = \sum_{j \in \mathbb{N}} \lambda_j \bar{\psi}_j(x, t) \psi_j(y, t)$$

que converge en $L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^3)$. En esta expresión la sucesión $\{\lambda_j\}_{j \in \mathbb{N}}$, que está formada por los valores propios del operador $\tilde{\rho}$, es de cuadrado sumable mientras que la sucesión de funciones propias $\{\psi_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ de $\tilde{\rho}$ constituye un sistema ortonormal completo en $L^2(\mathbb{R}^3)$. Por otro lado, como el operador $\tilde{\rho}$ es positivo y de clase traza, se deduce que $\lambda_j \geq 0 \forall j \in \mathbb{N}$ y que la sucesión $\{\lambda_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ es absolutamente sumable, respectivamente. Por tanto, la densidad de partículas definida por (1.28) se puede obtener formalmente mediante la identificación

$$n(x, t) = \rho(x, x, t). \quad (1.34)$$

Sin embargo, no es obvio que esta expresión tenga sentido y que pertenezca al espacio $L^1_+(\mathbb{R}^3)$ de funciones positivas e integrables. Observamos que la identidad (1.34) puede verse como la restricción de la matriz de densidad ρ a la diagonal de su dominio espacial; sin embargo, el subespacio $\{x = y\}$ de $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ es un conjunto de medida cero y, por tanto, este esquema no puede explicar el significado de la fórmula (1.34). Para entender con claridad este punto se introduce una función auxiliar definida por

$$\hat{\rho}(x, y, t) = \rho\left(x + \frac{y}{2}, x - \frac{y}{2}, t\right), \quad \text{c.p.d. } (x, y) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \quad t \geq 0. \quad (1.35)$$

Entonces, las propiedades de regularidad

$$\hat{\rho} \in L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^3) \cap C_0(\mathbb{R}_y^3; L^1(\mathbb{R}_x^3)) \cap C_0(\mathbb{R}_x^3; L^1(\mathbb{R}_y^3))$$

son satisfechas (ver [73]), y ahora la densidad de partículas asociada a la matriz de densidad se puede obtener como la restricción de $\hat{\rho}$ al subespacio $\{y = 0\}$ de $\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^3$. Entonces, utilizando las propiedades del operador matriz de densidad $\tilde{\rho}$ y a través de la definición (1.31) de la transformada de Wigner asociada a ρ , llegamos a la conclusión de que la función de Wigner $W(x, \xi, t)$ toma siempre valores reales, ya que $\tilde{\rho}$ es autoadjunto, y además $W(\cdot, \cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ con

$$\begin{aligned} \|W(\cdot, \cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \|\hat{\rho}(\cdot, \cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^3)} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \|\rho(\cdot, \cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^3)}, \end{aligned} \quad (1.36)$$

ya que $\tilde{\rho}$ es un operador de Hilbert-Schmidt.

El sistema no lineal de Wigner–Poisson, al igual que ocurriera para la ecuación de Schrödinger, es el que se obtiene a partir de la aproximación de campo medio o autoconsistente; es decir, el que resulta de acoplar la ecuación de Wigner usual (1.25) con la ecuación de Poisson (1.17) para la determinación del potencial. Una herramienta matemática importante en este contexto, cuya no negatividad además caracteriza la no negatividad de la matriz de densidad, es la llamada transformada de Husimi, que responde a la siguiente regularización gaussiana:

$$W_H(x, \xi, t) = W(x, \xi, t) *_x \Gamma_{\frac{\hbar}{m}}(x) *_\xi \Gamma_{\frac{\hbar}{m}}(\xi), \quad (1.37)$$

donde

$$\Gamma_\sigma(u) = \frac{1}{(\pi\sigma)^{3/2}} e^{-|u|^2/\sigma}. \quad (1.38)$$

Un modelo no lineal de transporte cuántico más sofisticado resulta de añadir un término de dispersión disipativo de tipo Fokker–Planck a la ecuación de Wigner usual (1.25), lo cual da lugar a la aproximación a la que hemos denominado sistema de Wigner–Poisson–Fokker–Planck:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial W_{FP}}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) W_{FP} + \theta_{\hbar} [V] W_{FP} \\ &= \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi W_{FP} + 2\gamma \operatorname{div}_\xi (\xi W_{FP}) + 2 \frac{D_{pq}}{m} \operatorname{div}_x (\nabla_\xi W_{FP}) + D_{qq} \Delta_x W_{FP}, \end{aligned} \quad (1.39)$$

$$W_{FP}(x, \xi, 0) = W_{FP}^I(x, \xi). \quad (1.40)$$

Aquí $\gamma, D_{pp}, D_{pq}, D_{qq}$ son constantes positivas relacionadas con las interacciones entre las partículas y el baño térmico (conjunto infinito de osciladores cuánticos acoplados en equilibrio térmico) que configuran el sistema mecano–cuántico abierto objeto de estudio, mientras que V representa nuevamente al potencial autoconsistente definido en (1.19), con

$$n(x, t) = \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_{FP}(x, \xi, t) d\xi. \quad (1.41)$$

La admisibilidad de una formulación en términos de la matriz de densidad para un mecanismo cuántico disipativo de tipo Fokker–Planck como el presentado será

discutida en toda su generalidad. Nosotros, sin embargo, abordamos el análisis matemático del problema sin fricción

$$\frac{\partial W_{FP}}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W_{FP} + \theta_h[V]W_{FP} = \sigma \Delta_\xi W_{FP}, \quad (1.42)$$

el cual representa la aproximación markoviana más simple del modelo general, aunque requiere una mayor complejidad matemática debido a la falta de regularización elíptica con respecto a la variable de posición (ya que sólo hay disipación en la dirección de la variable de momento ξ).

El análisis matemático y numérico a nivel de modelado de la difusión cuántica constituye uno de los problemas más interesantes en la investigación actual de fenómenos de transporte cinético-cuánticos. Algunos precedentes se encuentran en los trabajos de H. Lange, B. Toomire y P. F. Zweifel [69], H. Lange y P. F. Zweifel [70] y D. Häfner [57], en los cuales se introduce un hamiltoniano de carácter disipativo (o viscoso) en la formulación de Schrödinger y Wigner (-Poisson) del problema de transporte, aunque los modelos obtenidos no son físicamente realistas. En este sentido, el modelo de Wigner-Fokker-Planck que proponemos es pionero en el ámbito matemático de la Cinética Cuántica, a la vez que encuentra soporte físico en el modelo derivado por A. O. Caldeira y A. J. Leggett en [20]. Un análisis reciente sobre difusión en estados cuánticos ha sido realizado por L. Diósi, N. Gisin, J. Halliwell e I. C. Percival en [40].

1.2.3 Resultados

En los capítulos quinto y sexto proporcionamos una descripción cualitativa del comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes ($t \rightarrow \infty$) de las soluciones a los sistemas de Schrödinger-Poisson y Wigner-Poisson a través de la equivalencia esbozada anteriormente entre ambos problemas y rigurosamente demostrada por P. A. Markowich en [77]. En particular, utilizando el grupo de transformaciones de escala

$$\psi_\epsilon(x, t) = \epsilon^{-3/2} \psi(\epsilon^{-1}x, \epsilon^{-1}t)$$

y técnicas funcionales de compacidad y convergencia en determinadas topologías débiles, deducimos el comportamiento límite lineal de ambos sistemas en un régimen particular de dilataciones temporales descrito por las sucesiones $t^{3/2}\psi(tx, t)$ y $W(tx, t^{-1}\xi, t)$ para la función de onda y la función de Wigner, respectivamente. En particular, si el dato inicial $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ o bien $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ tal que el momento

de segundo orden de la densidad inicial $|\phi|^2$ está acotado, es decir $x\phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, entonces se demuestra que, para toda función $\Phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ y todo instante $t \geq 1$, existe una función real $\alpha(t) \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$ tal que

$$\alpha(t) \int_{\mathbb{R}^3} [\psi(x, t) - t^{-\frac{3}{2}} \psi_\infty(t^{-1}x)] t^{-\frac{3}{2}} \Phi(t^{-1}x) dx \leq C,$$

donde C sólo depende de φ y $\psi_\infty \in L^2(\mathbb{R}_x^3)$ resuelve la ecuación lineal

$$i\frac{3}{2}\psi_\infty + i(x \cdot \nabla_x)\psi_\infty + \frac{\gamma}{4\pi|x|}\psi_\infty = 0$$

en el sentido de las distribuciones (ver Teorema 5.1.2). De la misma forma, para la función de Wigner probamos que existe $\sigma(t) \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$ para la cual se verifica

$$\sigma(t) \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} [W(x, \xi, t) - W_\infty(t^{-1}x, t\xi, t)] \Phi(t^{-1}x, t\xi) d\xi dx \leq C,$$

donde $W_\infty \in L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ es una solución de la ecuación lineal

$$(\xi \cdot \nabla_\xi)W_\infty + (x \cdot \nabla_x)W_\infty = 0$$

en el sentido de las distribuciones (ver también Teorema 5.1.2).

Además, demostramos que el potencial reescalado $tV(tx, t)$ converge, cuando $t \rightarrow \infty$, hacia el potencial de Coulomb $K(x) = \gamma(4\pi|x|)^{-1}$ en $L_{loc}^p(\mathbb{R}^3)$ con $1 \leq p < 3$, lo cual se traduce finalmente en la propiedad

$$t\beta(t) \|V(tx, t) - V_\infty(tx)\|_{L^p(\Omega)} \leq C$$

para todo $t \geq 1$, Ω un conjunto compacto de \mathbb{R}^3 y β una función real tal que $\beta(t) \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$ (ver Teorema 5.1.1). Esto induce un comportamiento asintótico similar al del átomo de hidrógeno en las direcciones tx bajo dilataciones temporales de magnitud t . En esta situación perdemos la información proporcionada por la condición inicial.

En el Capítulo 6 introducimos una aproximación matemática de tipo Wigner no estándar que involucra transformaciones de Fourier con respecto al tiempo. A través de esta nueva formulación mecano-cuántica podemos conseguir una "ecuación límite" (cuando $t \rightarrow \infty$) no lineal en sentido global (donde las variables no aparecen temporalmente dilatadas) en la que se recupera la información contenida

en la condición inicial. Esta ecuación depende también de la frecuencia temporal de las oscilaciones del sistema y a través de ella podemos obtener información sobre las magnitudes macroscópicas típicas del modelo, en particular la densidad de posición de las partículas y el flujo de carga. La aproximación que llevamos a cabo consiste en analizar el límite $\epsilon \rightarrow 0$ de la sucesión de funciones de onda reescaladas $\psi_\epsilon(x, t) = \psi(x, \epsilon^{-1}t)$. La elección de este grupo de escala, aparentemente simple y el más natural para estudiar el comportamiento con respecto a tiempos grandes del sistema, exhibe una importante carencia de compacidad con respecto a la variable temporal debido al carácter oscilante de las soluciones reescaladas, por lo que el límite a estudiar se trata realmente de un límite de altas frecuencias. Este tipo de límites ha sido recientemente abordado en diferentes contextos y por medio de técnicas distintas por E. Ryzhik, G. Papanicolaou y J. B. Keller en [90] y por L. Miller en [81].

La introducción de una nueva transformada de Wigner espacio-temporal a través de una formulación en términos de matrices de densidad con correlaciones temporales será la herramienta fundamental para recuperar propiedades de compacidad de la sucesión de soluciones que nos permitan pasar al límite $\epsilon \rightarrow 0$ (o, equivalentemente, $t \rightarrow \infty$). A través de estas técnicas determinamos que el comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes de la función de Wigner usual y de algunos de sus momentos viene descrito, en el sentido que se especifica en el Capítulo 6, por las soluciones de

$$(\xi \cdot \nabla_x)W_\infty + \theta[V_\infty]W_\infty = 0,$$

$$W_\infty^I(x, \xi) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \bar{\varphi}(x + \frac{\eta}{2}) \varphi(x - \frac{\eta}{2}) e^{i\xi \cdot \eta} d\eta,$$

con

$$\begin{aligned} & \theta[V_\infty]W_\infty(x, \xi, t, \tau) \\ &= \frac{i}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_{\xi'}^3} \int_{\mathbb{R}_{\tau'}} \int_{-2t}^{2t} \left(V_\infty(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}) - V_\infty(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}) \right) \\ & \quad \times W_\infty(x, \xi', t, \tau') e^{i(\xi - \xi') \cdot \eta} e^{i(\tau - \tau')s} ds d\tau' d\xi' d\eta \end{aligned}$$

y

$$V_\infty(x, t) = \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}_y^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} \frac{1}{|x - y|} W_\infty(y, \xi, t, \tau) d\tau d\xi dy.$$

En estas ecuaciones $W_\infty(x, \xi, t, \tau)$ representa el límite (en un sentido débil) de las transformaciones de Wigner espacio-temporales introducidas en el Capítulo 6 (ver Teorema 6.2.6).

Finalmente, en el Capítulo 4 demostramos que el sistema de Wigner–Poisson–Fokker–Planck está bien planteado y es matemáticamente “consistente”, en el sentido en que procede de una ecuación de evolución para la matriz de densidad en la forma de Lindblad (ver [72]), lo cual garantiza su positividad. En concreto, estudiamos los problemas de existencia y unicidad de soluciones de la ecuación (1.42), así como el comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes de la misma.

En primer lugar demostramos la existencia, unicidad y estabilidad de soluciones locales (en tiempo)

$$W \in L^\infty((0, T); L^1 \cap L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$$

del problema de Wigner–Poisson–Fokker–Planck sin fricción bajo las siguientes condiciones de regularidad del dato inicial W^I :

$$W^I \in L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3) \cap L^p(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3), \quad (1.43)$$

$$\max \left\{ \left\| \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W^I(x - h\xi, \xi) d\xi \right\|_{L^{p_0}(\mathbb{R}_x^3)}, h \geq 0 \right\} < \infty, \quad (1.44)$$

donde $p_0 > 9/8$ y $6/p < 6/q + 1 - 9/2(1/p_0 - 1/r)$ para todo $3/2 < r \leq 2$ y $1 \leq p \leq q \leq \infty$ (ver Teorema 3.1.3). Por otro lado, en lo que respecta al análisis del comportamiento asintótico cuando $t \rightarrow \infty$ de las soluciones, si consideramos que $W^I \in L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ y las hipótesis (1.44) –para $p_0 > 36/31$ – y (1.43) son satisfechas, y además suponemos que para $p_0 > 9/8$ y algún $3/2 < r \leq 2$ se verifica

$$\|W\|_{L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))} \leq C \|W^I\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}, \quad (1.45)$$

$$M_{p_0} = \sup\{S_{p_0}(t), 0 \leq t < \infty\} < \infty, \quad (1.46)$$

$$M_r = \sup\{t^{9/2(1/p_0 - 1/r)} S_r(t), 0 \leq t < \infty\} < \infty, \quad (1.47)$$

entonces demostramos (ver Teorema 4.5.8) que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|W(\cdot, \cdot, t) - QG(\cdot, \cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} = 0,$$

donde Q es la carga total del sistema y G es la solución fundamental del operador cinético lineal de Fokker-Planck.

Asímismo hacemos hincapié en la relevancia física del modelo en el contexto de dispositivos microelectrónicos cuánticos y tecnología de semiconductores, campos en auge de la Matemática Aplicada en conexión con la Física, la Ingeniería y la Industria.

Capítulo 2

Un modelo cinético de colisiones de tipo onda-partícula: dinámica macroscópica

2.1 Introducción

El objetivo de este capítulo es describir la dinámica macroscópica de un modelo cinético en el que prevalecen las colisiones de tipo onda-partícula, el cual rige el transporte de rayos cósmicos en un plasma espacial magnetizado. Para ello se analizan las aproximaciones hidrodinámica y difusiva a la mecánica de fluidos asociada a través de métodos asintóticos clásicos como los desarrollos de Hilbert y Chapman-Enskog. La novedad de las ecuaciones resultantes a nivel macroscópico estriba en la aparición de términos dispersivos que involucran momentos de orden superior, tanto en el régimen compresible como en el incompresible, lo cual induce a pensar en nuevos modelos de turbulencia.

Las ecuaciones macroscópicas que rigen la evolución de una amplia variedad de fluidos (gases neutros, plasmas, semiconductores, etc.) pueden obtenerse a partir de las ecuaciones cinéticas subyacentes por medio de diversas técnicas. Entre las más empleadas, el método de momentos (consultar, por ejemplo, [68]) consiste en promediar la función de distribución de partículas con respecto a distintas potencias de la velocidad. Algunas relaciones sistemáticas de cierre para el correspondiente sistema de momentos han sido encontradas por H. Grad en [53] y, más recientemente, por D. C. Levermore en [71] y por I. Müller y T. Ruggieri en [83], utilizando funciones de prueba específicas como función de distribución. Una segunda aproximación a la descripción macroscópica del sistema está basada en el desarrollo en serie de la función de distribución en términos de determinadas funciones específicas, truncado a bajos órdenes. Esta aproximación ha sido investigada exhaustivamente en el ámbito del transporte de carga en semiconductores

(ver [87]), así como en física de plasmas (ver [43]) o descargas en gases (ver [67]).

El tercer método, en su doble vertiente de la aproximación hidrodinámica o difusiva, se basa en una técnica de perturbación singular clásica: la función de distribución se desarrolla en serie de potencias del número de Knudsen y el sistema resultante se resuelve recursivamente. Además, para la primera de tales aproximaciones se comprueba que el término de orden inferior de la función de distribución es una distribución local de equilibrio termodinámico, es decir, un elemento del núcleo del operador de colisión, cuyos parámetros (las variables termodinámicas) evolucionan según la correspondiente dinámica macroscópica. Esta aproximación fue establecida por D. Hilbert en [61], S. Chapman en [27] y D. Enskog en [44], y fue propuesta en un contexto matemático por H. Grad en [54], R. Caflish en [19] y otros muchos autores (en [25] puede encontrarse un listado de referencias recientes así como una introducción básica a la teoría cinética).

El método de Hilbert proporciona la conexión existente entre la ecuación de Boltzmann y las ecuaciones de Euler compresibles, mientras que el método de Chapman-Enskog da lugar a las correcciones difusivas de primer orden que aparecen en las ecuaciones de Navier-Stokes compresibles. En ambos casos es oportuno un cambio de escala hidrodinámico en la ecuación de Boltzmann, donde tanto el gradiente espacial como la derivada temporal de la función de distribución son del mismo orden de magnitud, "pequeños" (de orden ϵ) en comparación con la influencia del operador de colisión. Por un lado, la dinámica euleriana no depende de las características del operador de colisión, sino sólo de sus propiedades de conservación. Sin embargo, por otra parte, la dinámica de Navier-Stokes depende por completo del operador de colisión a través de las difusividades (viscosidad y conducción térmica). Estas diferencias aparecen comentadas con claridad en [6].

Por el contrario, la aproximación difusiva se basa en la actuación de un grupo de escala diferente sobre la ecuación cinética, para el cual los gradientes espaciales son de orden ϵ comparados con el operador de colisión, mientras que las contribuciones de las derivadas temporales son de orden ϵ^2 . Este grupo de escala se utiliza para estudiar la dinámica macroscópica difusiva de los procesos de transporte con aplicaciones, por ejemplo, al transporte de neutrones (ver [8]) o al transporte de carga en semiconductores (ver [51]). Recientemente, la relación entre los grupos de escala hidrodinámico y difusivo se ha puesto de manifiesto mediante la obtención de las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes a raíz de la aplicación de un grupo de escala difusivo a la ecuación de Boltzmann (ver [6] y [36]) bajo la hipótesis de "desviación pequeña" de las soluciones respecto de un equilibrio termodinámico global.

En esta dirección, nosotros investigaremos la dinámica macroscópica inducida por un operador de colisión modelo que describe la dispersión de rayos cósmicos frente a irregularidades del campo magnético ambiente en plasmas espaciales (consultar [43]). Estas irregularidades son provocadas frecuentemente por turbulencias electromagnéticas del plasma, las cuales generan un espectro aleatorio de ondas de forma que el operador de colisión resultante recibe usualmente el nombre de “operador de colisión onda-partícula”. La teoría cuasi-lineal de plasmas (consultar [95]) proporciona expresiones complejas de tales operadores. Aquí, sin embargo, siguiendo el análisis iniciado en [43], consideraremos un modelo de relajación simple que isotropiza la función de distribución en torno a una velocidad media dada u . De hecho, estudiaremos tanto el grupo de escala hidrodinámico (que es el caso investigado en [43]) como el difusivo (a partir de [6], [36]). En ambos casos mostraremos que el modelo obtenido apunta también hacia el modelado de turbulencias.

El problema que analizamos en este capítulo y en el próximo responde a la siguiente ecuación cinética:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f = \tau^{-1} Q(f), \quad (2.1)$$

$$f(x, \xi, t = 0) = f_0(x, \xi), \quad (2.2)$$

con

$$Q(f) = P_{u_f}(f) - f, \quad (2.3)$$

donde $\tau^{-1} = \tau^{-1}(x, t)$ representa a la frecuencia local de colisión del plasma y P_u es una proyección sobre el conjunto de funciones de distribución isotrópicas en torno a la velocidad $u \in \mathbb{R}^d$:

$$P_{u_f}(f)(x, \xi, t) = \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} f(x, u_f(x, t) + |\xi - u_f(x, t)|\omega, t) d\omega. \quad (2.4)$$

En esta fórmula, $|\mathcal{S}^{d-1}|$ es la medida de Lebesgue de la esfera unidad \mathcal{S}^{d-1} de \mathbb{R}^d y $\xi = u_f + |\xi - u_f|\omega$, con $\omega \in \mathcal{S}^{d-1}$, es la expresión de la velocidad en coordenadas esféricas centrada en u_f . Las densidades de masa, momento y energía asociadas a la función de distribución f vienen dadas por

$$\rho_f = \int_{\mathbb{R}^d_\xi} f d\xi, \quad m_f = \int_{\mathbb{R}^d_\xi} f \xi d\xi, \quad E_f = m \int_{\mathbb{R}^d_\xi} f \frac{|\xi|^2}{2} d\xi, \quad (2.5)$$

donde m es la masa de las partículas. Finalmente, la velocidad media y la energía interna específicas son

$$u_f = \frac{m_f}{\rho_f}, \quad e_f = \frac{E_f}{\rho_f} - m \frac{|u_f|^2}{2} = m \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f \frac{|\xi - u_f|^2}{2} d\xi. \quad (2.6)$$

En [43] se obtiene una “ecuación de transporte extendida” para rayos cósmicos por medio de un desarrollo en armónicos esféricos de este modelo, la cual rige la evolución de la parte isotrópica (en la variable de momento) de la función de distribución. Esta ecuación fue mejorada al incorporarle un campo magnético promedio en [100] y [101], y al acoplarle posteriormente la ecuación de conservación para el momento del fluido en [101]. Nosotros obtendremos esta “ecuación de transporte extendida” explotando la estructura matemática que subyace al desarrollo clásico de Chapman–Enskog. Este análisis ya fue abordado anteriormente en [33] al nivel de un desarrollo de Hilbert, el cual condujo a una ecuación hiperbólica en el espacio de posición–energía para la parte isotrópica de la función de distribución, acoplada con la ecuación hiperbólica usual para la conservación del momento. Un rasgo distintivo de este modelo (en la aproximación de Hilbert) consiste en que se reduce a un sistema cerrado de momentos de cualquier orden. En particular, si se trunca al nivel de la ecuación de la energía, el sistema de momentos coincide con las ecuaciones de Euler compresibles usuales.

Uno de nuestros principales logros en este terreno consiste en extender el análisis asintótico llevado a cabo en [33] por medio de un desarrollo de Chapman–Enskog, y obtener así correcciones difusivas del orden del número de Knudsen de las ecuaciones para la función de distribución isotrópica y el momento. El modelo obtenido conserva muchas similitudes con [102], aunque surgen también algunas diferencias debidas a las diferentes metodologías utilizadas. Además, el término de viscosidad es el mismo que en la ecuación de Navier–Stokes compresible; sin embargo, el término de conductividad térmica es sustituido por un operador de difusión que actúa sobre la función de distribución en el espacio de posición–energía. A diferencia de [33], el sistema de momentos no es cerrado. En particular, el término de conductividad térmica involucra algunos momentos de orden superior de la función de distribución. Este aspecto guarda algún parecido con el modelado de turbulencias, para el que se necesita información sobre las escalas espaciales pequeñas del problema (que están relacionadas de cierta forma con las escalas de altas energías) en las difusividades. También son analizados los efectos de los campos eléctrico y magnético aplicados. A diferencia de [100], por razones de simplicidad

consideramos el término del campo magnético “más pequeño” que el término de colisión.

En lo que se refiere al grupo de escala difusivo asociado al operador de colisión onda-partícula considerado supondremos, en la misma línea de [6] y [36], que las soluciones no se alejan “demasiado” de un equilibrio global, representado por una función de distribución dada $G(v)$. El desarrollo de Hilbert conduce hacia una expresión de la perturbación que depende de una velocidad promedio arbitraria u , solución de la ecuación usual de Navier-Stokes incompresible, y de una función de distribución de energía Φ . Esta última resuelve una ecuación de transporte-difusión en el espacio de posiciones, parametrizada por la variable de energía interna y sujeta a la condición de Boussinesq. Nuevamente el sistema de momentos para Φ no es cerrado, y en particular el flujo térmico depende de un momento de orden superior de Φ . Este hecho podría allanar el camino hacia modelos macroscópicos más elaborados que incluyan, como hemos dicho anteriormente, fenómenos de turbulencia. La influencia de los campos eléctrico y magnético en esta aproximación también se investiga en una clase restringida de campos electromagnéticos.

En definitiva, analizaremos y compararemos con otro tipo de aproximaciones la dinámica macroscópica de una ecuación cinética que modela la dispersión de partículas con carga frente a las irregularidades del campo magnético ambiente. Para ello, en primer lugar consideraremos en la Sección 3 un grupo de escala hidrodinámico y, a través de técnicas asintóticas de tipo Chapman-Enskog, obtendremos el correspondiente modelo macroscópico. Las incógnitas macroscópicas asociadas son la función de distribución de energía de las partículas en el sistema de referencia en reposo del fluido y la velocidad media. La función de distribución de energía evoluciona conforme a una ecuación de difusión en el espacio de posición-energía, y está acoplada con una ecuación de tipo Navier-Stokes para la velocidad media. El sistema de momentos para la función de distribución de energía no es cerrado, lo cual podría estar relacionado con la posibilidad de obtener nuevos modelos de turbulencias. En segundo lugar consideraremos, en la Sección 4, un grupo de escala difusivo en el contexto de perturbaciones pequeñas de un equilibrio global. La correspondiente dinámica macroscópica consiste en las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles para la velocidad media acopladas con una ecuación de difusión en el espacio de posición-energía para la función de distribución de energía, ligada a su vez a una relación de Boussinesq generalizada. Las mismas características que en el caso hidrodinámico son exhibidas, a saber, la posibilidad de relacionar con modelos de turbulencia el hecho de que el sistema de momentos no sea cerrado.

Comenzaremos estudiando el operador de colisión onda-partícula.

2.2 El operador de colisión

Esta sección está dedicada al estudio del operador de colisión onda-partícula $Q(f)$ de la teoría cuasi-lineal de plasmas en su forma más simple:

$$Q(f) = P_{u_f}(f) - f,$$

donde P_{u_f} es el valor medio de la función de distribución $f(\xi)$, $\xi \in \mathbb{R}^d$, sobre la esfera del espacio de velocidades centrada en la velocidad media u_f de f y de radio $|\xi - u_f|$:

$$P_{u_f}(f) = \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} f(u_f + |\xi - u_f|\omega) d\omega,$$

y donde hemos denotado por $d\omega$ a la medida superficial de \mathcal{S}^{d-1} . Consideraremos, además, que el operador de colisión $Q(f)$ actúa sobre funciones que sólo dependen de la variable ξ .

El espacio de velocidades se elige d -dimensional porque resulta interesante observar cómo nuestros resultados escalan con respecto a la dimensión. Para partículas sin grados de libertad internos se considera $d = 3$, como ocurre usualmente. Sin embargo, en algunas ocasiones puede darse el caso $d < 3$. Por ejemplo, $d = 1$ describe una distribución de partículas con carga distribuidas a lo largo de las líneas de un campo magnético intenso. Por el contrario, $d > 3$ supone una forma de modelar sistemas de partículas con grados de libertad internos (consultar, por ejemplo, [15]). En este caso, las tres primeras componentes del vector velocidad (ξ_1, ξ_2, ξ_3) representan la velocidad física, mientras que las componentes ξ_j , $j = 4, \dots, d$ están relacionadas con las energías E_j de los $d - 3$ grados de libertad internos mediante $v_j = \sqrt{E_j}$. Por simplicidad, la función de distribución se define, para $\xi_j \in \mathbb{R}$ con $j \geq 4$, por paridad y, como consecuencia, las componentes $(u_f)_j$ de la velocidad media de f son cero para $j \geq 4$, ya que no están relacionadas con ninguna cantidad físicamente relevante. El operador de colisión (2.3) contribuye a relajar la función de distribución f hacia su parte isotrópica $P_{u_f}(f)$ en torno a su velocidad media u_f . Este operador es el considerado en [43], [100], [102] y [101] para describir la interacción de partículas con carga (para ser más precisos, iones en rayos cósmicos) frente a irregularidades del campo magnético ambiente originadas por turbulencias electromagnéticas del plasma. En el viento solar, por

ejemplo, la turbulencia se genera al nivel del sol, debido a los fenómenos de convección extremadamente potentes que tienen lugar en la corona solar, y se transporta pasivamente por el plasma en el curso de su expansión por el espacio exterior. Esta turbulencia genera campos eléctricos o magnéticos microscópicos que desvían las trayectorias de las partículas, y que son excitados conforme a los modos normales posibles de propagación electromagnética en el plasma (consultar [95]). Para ciertos modos, como los de Alfvén, puede verse que, en una buena aproximación, el proceso se traduce en una interacción que conserva la energía, en un sistema de referencia que se mueve con la velocidad de fase de la onda (ver [52]). En el viento solar, esta velocidad de fase es próxima a la velocidad promedio del plasma. Por tanto, la interacción isotropiza a la función de distribución en torno a la velocidad media del plasma.

El operador de colisión (2.3) es un modelo particularmente simple de tal interacción isotrópica. Sin embargo, a través de la teoría cuasi-lineal de plasmas (consultar [95]) pueden derivarse operadores más complejos que conservan las mismas propiedades, y que incluso vienen dados por expresiones más complicadas (puede verse un ejemplo en [33]). En cualquier caso, la dinámica macroscópica asociada al operador (2.3) proporciona ciertamente una buena pista acerca de dinámicas más realistas. Puede observarse que, del hecho de que u_f depende de f , se desprende que el operador (2.3) es no lineal.

El operador de colisión $Q(f)$ se define sobre todas las funciones no negativas $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ tales que

$$f, f\xi \in L^1(\mathbb{R}^d), \quad f \text{ no es cero casi por doquier.} \quad (2.7)$$

Además, P_{u_f} pertenece, como función de ξ , a $L^2(\mathbb{R}^d; |\xi|^{d-1}d\xi)$ como consecuencia de la desigualdad de Cauchy-Schwartz, y $Q(f)$ pertenece a $L^2(\mathbb{R}^d)$. La elección de L^2 no es esencial por el momento; simplemente se hace por conveniencia para el cálculo de operadores adjuntos. Las propiedades fundamentales del operador $Q(f)$ pueden formularse de acuerdo al siguiente lema:

Lema 2.2.1. *Sea $Q(f)$ el operador dado por (2.3). Entonces, para toda función no negativa de cuadrado integrable $f(\xi)$ que satisfaga (2.7), tenemos:*

(i) *Teorema H generalizado:*

$$\int_{\mathbb{R}^d} Q(f)f d\xi = - \int_{\mathbb{R}^d} |f - P_{u_f}(f)|^2 d\xi \leq 0.$$

(ii) Los promedios de $Q(f)$ sobre todas las esferas del espacio de velocidades centradas en u_f se anulan:

$$\int_{S^{d-1}} Q(f)(u_f + |\xi - u_f|\omega) d\omega = 0, \quad |\xi - u_f| > 0 \text{ c.p.d.}$$

(iii) El operador Q conserva el momento promedio:

$$\int_{\mathbb{R}^d} Q(f)(\xi)\xi d\xi = 0.$$

(iv) El núcleo de Q consiste en todas las funciones de la forma $g(|\xi - u|^2/2)$, dada cualquier función arbitraria no negativa $g(v) \in L^2(\mathbb{R}^+, v^{\frac{d}{2}-1} dv)$ y cualquier vector arbitrario $u \in \mathbb{R}^d$.

La propiedad (i) (el teorema H generalizado) establece el carácter disipativo del operador Q sobre la parte no isotrópica de la función de distribución. Debido a esta propiedad, la dinámica temporal asociada a la función de distribución es irreversible (ver [25]). En efecto, puede definirse una entropía generalizada para la solución de la ecuación cinética (2.1) mediante

$$H(f)(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^d} |f(x, \xi, t)|^2 d\xi dx$$

(o, de forma más general, sustituyendo $|f|^2$ por cualquier expresión $h(f)$ donde h es una función estrictamente convexa). A partir de la propiedad (i) es fácil ver que $H(f)$ es no creciente con respecto al tiempo. Esta entropía generalizada caracteriza cómo se relaja la solución hacia lo que podría llamarse un equilibrio asociado al presente operador de colisión, a saber, una función isotrópica $g(|\xi - u|^2/2)$ como se deduce de (iv).

Las propiedades (ii) y (iii) caracterizan a los llamados invariantes de colisión (ver [25]); luego, como consecuencia de (ii), cualquier función $\psi(|\xi - u_f|)$ es un invariante de colisión. Por tanto, el conjunto de invariantes de colisión es infinito-dimensional y depende de la función de distribución f sobre la cual actúa el operador de colisión a través de la velocidad media u_f . Estas son características distintivas de este modelo comparado con la teoría clásica de Boltzmann (consultar [25]). La propiedad (iii) establece que ξ es también un invariante de colisión. Combinando 1 y $|\xi - u_f|^2$, que son también invariantes de colisión a la luz de (ii),

y ξ , deducimos que $|\xi|^2$ es también un invariante de colisión, o en otras palabras que Q también conserva la energía total:

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q(f)(\xi) |\xi|^2 d\xi = 0.$$

La conservación de la masa total, del momento y de la energía son usualmente propiedades específicas de las interacciones binarias, como las descritas por la teoría de Boltzmann para gases enrarecidos. Puede parecer, por tanto, sorprendente que una interacción con agentes dispersores externos (como por ejemplo las irregularidades del campo magnético que nosotros consideramos) conserve las mismas propiedades. Sin embargo, se puede comprobar fácilmente que esto es así, ya que

- (i) no se produce intercambio de energía con los agentes dispersores (como si fueran “partículas puntuales de masa infinita”),
- (ii) los agentes dispersores se mueven con la velocidad media de las partículas (como si fueran transportados de forma pasiva por el flujo).

En tal caso, la interacción comparte propiedades similares con las interacciones binarias, donde los agentes dispersores actúan como mediadores. Aun así, enfatizamos el hecho de que no hay necesidad de interacciones binarias en el sentido usual para alcanzar las propiedades enunciadas en el Lema 2.2.1.

Finalmente, la propiedad (iv) caracteriza al conjunto de equilibrios termodinámicos asociados a Q . Como cabía esperar, estos están constituidos por todas las funciones de distribución isotrópicas en torno a todas las posibles velocidades medias. La arbitrariedad de la velocidad media de equilibrio es otra de las características distintivas de este modelo y explica por qué la dinámica macroscópica asociada es de naturaleza hidrodinámica más que difusiva.

Denotamos por $L_g f = DQ(g)f$ a la derivada de Fréchet del operador Q en torno a una función de distribución dada g . Observamos que la densidad ρ_{g+f} y el momento $\rho_{g+f}u_{g+f}$ asociados a la suma de funciones de distribución $g + f$ pueden escribirse, por linealidad, de la siguiente forma:

$$\rho_{g+f} = \rho_g + \rho_f, \quad \rho_{g+f}u_{g+f} = \rho_g u_g + \rho_f u_f.$$

Entonces, si nos restringimos a términos lineales con respecto a f , encontramos que

$$u_{g+f} = u_g + \delta_f u, \tag{2.8}$$

donde

$$\delta_f u = \frac{1}{\rho_g} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} (\xi - u_g) f d\xi. \quad (2.9)$$

Haciendo un desarrollo de Taylor de $g(u_{g+f} + |\xi - u_{g+f}| \omega)$ en torno a $u_g + |\xi - u_g| \omega$ hasta términos de primer orden en f y utilizando (2.8) y la definición de Q , la linealización de primer orden del operador de colisión Q en torno a un equilibrio (es decir, una función de distribución isotrópica $g(\xi) = g(|\xi - u|^2/2)$, como se deduce del Lema 2.2.1 (iv)), viene dada por la siguiente expresión (donde hacemos $u = u_g$):

$$L_g f = \frac{1}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} f(u + |\xi - u| \omega) d\omega - g'(|\xi - u|^2/2) ((\xi - u) \cdot \delta_f u) - f, \quad (2.10)$$

donde las “primas” denotan derivadas con respecto a $|\xi - u|^2/2$. Las propiedades fundamentales de L_g quedan recogidas en el siguiente

Lema 2.2.2. *Sea $g(v)$ una función arbitraria no negativa en $L^2(\mathbb{R}^+, v^{\frac{d}{2}-1} dv)$ y sea $u \in \mathbb{R}^d$ un vector arbitrario. Hacemos la identificación $g(\xi) := g(|\xi - u|^2/2)$. Entonces, para toda función $f(\xi) \in L^2(\mathbb{R}^d)$ tal que f y $f\xi$ pertenecen a $L^1(\mathbb{R}_\xi^d)$, tenemos:*

- (i) *Los promedios de $L_g f$ sobre todas las esferas del espacio de velocidades centradas en u se anulan:*

$$\int_{S^{d-1}} L_g f(u + |\xi - u| \omega) d\omega = 0, \quad |\xi - u| > 0 \text{ c.p.d.}$$

- (ii) *El operador L_g conserva el momento promedio:*

$$\int_{\mathbb{R}^d} (L_g f)(\xi) \xi d\xi = 0.$$

- (iii) *El núcleo $N(L_g)$ de L_g consiste en todas las funciones de la forma*

$$\varphi\left(\frac{|\xi - u|^2}{2}\right) - g'\left(\frac{|\xi - u|^2}{2}\right)((\xi - u) \cdot \delta u), \quad (2.11)$$

para toda función arbitraria $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^+, v^{\frac{d}{2}-1} dv)$ y todo vector arbitrario $\delta u \in \mathbb{R}^d$.

(iv) L_g no es autoadjunto en $L^2(\mathbb{R}^d)$. Además, el operador adjunto L_g^* de L_g opera sobre funciones $f^* \in L^2(\mathbb{R}^d)$ tales que $g'f^*$ y $g'f^*\xi$ pertenecen a $L^1(\mathbb{R}_\xi^d)$, y viene dado por

$$L_g^*f^* = \frac{1}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} f^*(u + |\xi - u|\omega) d\omega - f^* - ((\xi - u) \cdot \delta_{f^*} u^*), \quad (2.12)$$

donde

$$\delta_{f^*} u^* = \frac{1}{\rho_g} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} (\xi - u) f^*(\xi) g'(|\xi - u|^2/2) d\xi. \quad (2.13)$$

(v) El núcleo $N(L_g^*)$ de L_g^* consiste en todas las funciones de la forma

$$\varphi^*\left(\frac{|\xi - u|^2}{2}\right) - ((\xi - u) \cdot \delta^* u), \quad (2.14)$$

para toda función arbitraria $\varphi^* \in L^2(\mathbb{R}^+, v^{\frac{d}{2}-1} dv)$ y todo vector arbitrario $\delta^* u \in \mathbb{R}^d$.

(vi) Sea $h(\xi)$ una función de $L^2(\mathbb{R}^d)$ tal que $h\xi \in L^1(\mathbb{R}_\xi^d)$. Entonces, la ecuación

$$L_g f = h \quad (2.15)$$

tiene solución si y sólo si h verifica las siguientes condiciones de solubilidad:

$$\int_{S^{d-1}} h(u + |\xi - u|\omega) d\omega = 0, \quad |\xi - u| > 0 \text{ c.p.d.}, \quad (2.16)$$

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} h(\xi)\xi d\xi = 0, \quad (2.17)$$

y todas sus soluciones son de la forma $f(\xi) = \tilde{f}(\xi) - h(\xi)$, donde $\tilde{f}(\xi)$ pertenece a $N(L_g)$. Si además $f(\xi)$ es ortogonal al núcleo $N(L_g^*)$ de L_g^* , es decir, si satisface las condiciones (2.16), (2.17), entonces $\tilde{f}(\xi) = 0$.

Las propiedades (i), (ii) y (iii) del Lema 2.2.2 consisten en su mayor parte en adaptaciones a L_g de propiedades de Q (a saber, las propiedades (ii), (iii) y (iv) del Lema 2.2.1). El hecho de que u_f dependa de f hace que el operador linealizado L_g no sea autoadjunto, lo cual se traduce en la aparición de componentes adicionales en los núcleos de L_g y L_g^* (ver (2.11) o (2.14)). Finalmente, la resolución de la

ecuación no homogénea (2.15) es fundamental para la derivación de los modelos macroscópicos. Las condiciones de solubilidad surgen del hecho de que el núcleo de L_g es no vacío, junto con alguna propiedad del tipo alternativa de Fredholm. A continuación describimos brevemente las ideas fundamentales que participan en la demostración del Lema 2.2.2.

Demostración del Lema 2.2.2. (i) es una consecuencia inmediata de la forma (2.10) de L_g . Para probar (ii) utilizamos

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} (L_g f)(\xi) \xi \, d\xi = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} (L_g f)(\xi) (\xi - u) \, d\xi + u \int_{\mathbb{R}_\xi^d} (L_g f)(\xi) \, d\xi.$$

La segunda integral se anula claramente por (i), y la primera puede desarrollarse de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} (L_g f)(\xi) (\xi - u) \, d\xi &= - \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f(\xi) (\xi - u) \, d\xi \\ &\quad - \int_{\mathbb{R}_\xi^d} g' \left(\frac{|\xi - u|^2}{2} \right) ((\xi - u) \cdot \delta_f u) (\xi - u) \, d\xi. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Ahora es sencillo comprobar que las dos integrales que aparecen en el segundo miembro de (2.18) son mutuamente opuestas, siendo la primera de ellas igual a $-\rho_g \delta_f u$ por la definición (2.9). (iv) procede de un cálculo directo, mientras que (iii) y (v) son obvias. Falta por probar el punto (vi). De (i) y (ii) deducimos que (2.16), (2.17) son condiciones necesarias para la solubilidad de la ecuación $L_g f = h$. Para ver que son suficientes, simplemente apuntamos que $f = -h$ es una solución. Luego, claramente, todas las soluciones son de la forma $-h + \tilde{f}$ con $\tilde{f} \in N(L_g)$.

2.3 Grupo de escala hidrodinámico: el límite compresible

En esta sección consideraremos la siguiente ecuación cinética afectada por un cambio de escala de tipo hidrodinámico:

$$\frac{\partial f_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f_\epsilon = \frac{\tau^{-1}}{\epsilon} Q(f_\epsilon), \quad (2.19)$$

donde $f_\epsilon(x, \xi, t)$ es la función de distribución de partículas en el espacio de fases posición-velocidad $\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^d$ en el instante $t > 0$, ϵ es la razón entre la trayectoria

libre media de las partículas y una dimensión macroscópica del problema, $\tau^{-1} = \tau^{-1}(x, t)$ es la frecuencia local de colisión en unidades microscópicas y $d \geq 1$ es la dimensión del espacio de velocidades. Si $d > 3$, entenderemos que

$$\xi \cdot \nabla_x = \sum_{i=1}^3 \xi_i \frac{\partial}{\partial x_i},$$

y procederemos de forma similar cuando ξ sea reemplazada por la velocidad media u (tal como quedó establecido en la discusión anterior sobre la dimensión de la velocidad). Nosotros estamos interesados en la forma simplificada del operador de colisión onda-partícula $Q(f)$ de la teoría cuasi-lineal de plasmas dado por (2.3). También estudiaremos al final de esta sección el efecto producido por la incorporación de un término de fuerza de Lorentz. Los resultados serán discutidos a la luz de [100], [101] y [102].

En particular, investigamos el límite macroscópico $\epsilon \rightarrow 0$, que describe un régimen bajo el cual la trayectoria libre media de las partículas es mucho más pequeña que la longitud característica del problema. Obviamente, en vista de la discusión de la sección anterior, la intensidad de la interacción depende del nivel de turbulencia del plasma, que está controlado por fenómenos externos (por ejemplo, en el viento solar depende de la actividad solar). En los trabajos [100], [102] y [101], se considera siempre el régimen macroscópico sin más justificación. En [52], donde la discusión se aplica específicamente a iones producidos por la ionización de moléculas neutras evaporadas de una superficie cometaria, la distancia macroscópica es la distancia típica de un proceso de ionización al cometa. Debido a que el átomo neutro puede recorrer una gran distancia antes de ser ionizado, esta distancia es siempre mucho más grande que la trayectoria libre media entre colisiones (frente a las irregularidades del campo magnético) de los iones así generados.

En [33], donde ya se estudió un aspecto del límite $\epsilon \rightarrow 0$, se estableció que f_ϵ converge formalmente hacia una función $g(x, |\xi - u|^2/2, t)$ que pertenece al núcleo de Q , donde $g(x, v, t)$ y $u(x, t)$ satisfacen el siguiente sistema:

$$\frac{\partial g}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x)g - \frac{2}{d} v \frac{\partial g}{\partial v} (\nabla_x \cdot u) = 0 \quad (2.20)$$

$$m \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \nabla_x \cdot (\rho u u) \right) + \nabla_x \cdot \left(\frac{2e}{d} \right) = 0, \quad (2.21)$$

donde ρ y e son respectivamente la densidad y la energía interna asociadas a g por medio de (2.5) y (2.6). La ecuación (2.20) resulta de una integración de (2.19) sobre

algunas direcciones de la velocidad en un sistema de referencia que se mueve con velocidad u , mientras que la ecuación (2.21) resulta de multiplicar (2.19) por ξ e integrar sobre todas las coordenadas de la velocidad. Cuando $d > 3$, supondremos que $u_j = 0$, $j = 4, \dots, d$. Por otro lado, integrando (2.20) con respecto a la variable v comprobamos fácilmente que ρ y e satisfacen las ecuaciones

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho u) = 0, \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) e + \left(\frac{d+2}{d} \right) e (\nabla_x \cdot u) = 0. \quad (2.23)$$

El sistema formado por (2.22), (2.21) y (2.23) no es más que el sistema usual de ecuaciones de la dinámica de gases compresibles para un gas perfecto, escritas en términos de la energía interna del fluido en vez de la energía total. Además, el momento de g de k -ésimo orden:

$$M_k = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} g \left(\frac{|\xi - u|^2}{2} \right)^k d\xi = \int_0^\infty g(v) v^k (2v)^{\frac{d-2}{2}} |S^{d-1}| dv, \quad (2.24)$$

satisface la ecuación

$$\frac{\partial M_k}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) M_k + \left(\frac{2k+d}{d} \right) M_k (\nabla_x \cdot u) = 0. \quad (2.25)$$

Por tanto, el sistema de momentos es cerrado para cualquier orden $p \geq 1$. Es por ello que los equilibrios termodinámicos locales de la ecuación (2.19), a pesar de no ser maxwellianas, evolucionan, en lo que respecta a sus momentos de orden inferior, conforme a las ecuaciones usuales de la dinámica de gases compresibles. Además, el sistema de momentos deducido a raíz de esta dinámica es cerrado incluso después de truncarlo a cualquier orden arbitrario. Estas dos características son propiedades distintivas del límite macroscópico de la ecuación (2.19) tratado al nivel de un desarrollo de Hilbert.

Una pregunta natural que podríamos hacernos es si estas propiedades siguen siendo ciertas si se introducen correcciones difusivas de orden ϵ en los segundos miembros de las ecuaciones del sistema (2.20)–(2.21) por medio de una aproximación de Chapman–Enskog. En particular, ¿podríamos recuperar las ecuaciones compresibles de Navier–Stokes para ρ , u , e ? Y, ¿son cerrados los sistemas de momentos truncados a cualquier orden arbitrario?. Nuestra aportación principal

a este respecto es probar que esto no es así y deducir las expresiones exactas de los términos de corrección difusivos en (2.20) y (2.21).

En primer lugar introducimos una definición. Diremos que $\tilde{f}_\epsilon(x, \xi, t)$ es una solución aproximada de orden p de la ecuación cinética (2.19) si

$$\frac{\partial \tilde{f}_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) \tilde{f}_\epsilon = \frac{\tau^{-1}}{\epsilon} Q(\tilde{f}_\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^p), \quad (2.26)$$

donde $\mathcal{O}(\epsilon^p)$ denota un término formalmente acotado por ϵ^p . Sea ahora

$$g_\epsilon(x, \frac{|\xi - u_\epsilon|^2}{2}, t)$$

una distribución de equilibrio para el operador de colisión Q . La densidad de partículas ρ_ϵ y la densidad de energía interna e_ϵ correspondientes vienen dadas por (2.5) y (2.6) o, equivalentemente, por

$$\begin{pmatrix} \rho_\epsilon \\ e_\epsilon \end{pmatrix} = \int_0^\infty g(x, v, t) \begin{pmatrix} 1 \\ mv \end{pmatrix} (2v)^{\frac{d-2}{2}} |\mathcal{S}^{d-1}| dv, \quad (2.27)$$

mientras que u_ϵ es la velocidad media asociada. A continuación veremos que, para que la aproximación

$$\tilde{f}_\epsilon = g_\epsilon(x, \frac{|\xi - u_\epsilon|^2}{2}, t) + \epsilon f_\epsilon^1 + \epsilon^2 f_\epsilon^2 \quad (2.28)$$

constituya una solución aproximada de orden dos de (2.19), es necesario y suficiente que (g_ϵ, u_ϵ) sea una solución del siguiente sistema:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial g_\epsilon}{\partial t} + (u_\epsilon \cdot \nabla_x) g_\epsilon - \frac{2}{d} v \frac{\partial g_\epsilon}{\partial v} (\nabla_x \cdot u_\epsilon) \\ &= \epsilon \frac{2}{d} v^{1-\frac{d}{2}} (\nabla_x + \frac{1}{m\rho_\epsilon} \nabla_x p_\epsilon \frac{\partial}{\partial v}) \cdot \left[\tau v^{\frac{d}{2}} (\nabla_x + \frac{1}{m\rho_\epsilon} \nabla_x p_\epsilon \frac{\partial}{\partial v}) g_\epsilon \right] \\ &+ \epsilon \frac{4\tau}{d(d+2)} v^{1-\frac{d}{2}} \frac{\partial}{\partial v} (v^{\frac{d+2}{2}} \frac{\partial g_\epsilon}{\partial v}) (\sigma(u_\epsilon) : \nabla_x u_\epsilon), \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$m \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_\epsilon u_\epsilon) + \nabla_x \cdot (\rho_\epsilon u_\epsilon u_\epsilon) \right) + \nabla_x p_\epsilon = \epsilon \nabla_x \cdot [\mu_\epsilon \sigma(u_\epsilon)]. \quad (2.30)$$

En estas ecuaciones $\sigma(u)$ denota el tensor de deformación (de traza 0)

$$\sigma(u)_{ij} = \frac{\partial u^i}{\partial x_j} + \frac{\partial u^j}{\partial x_i} - \frac{2}{d}(\nabla_x \cdot u)\delta_{ij}, \quad (2.31)$$

siendo δ_{ij} el símbolo de la delta de Kronecker, mientras que la viscosidad μ_ϵ es una función de la presión:

$$\mu_\epsilon = \mu(p_\epsilon) = \tau p_\epsilon, \quad (2.32)$$

y la presión p_ϵ viene dada por

$$p_\epsilon = \frac{2e_\epsilon}{d}. \quad (2.33)$$

Para ser más precisos, el teorema puede formularse de la siguiente forma:

Teorema 2.3.1. *Existen dos funciones, f_ϵ^1 en $N(L_{g_\epsilon}^*)^\perp$ y f_ϵ^2 tales que \tilde{f}_ϵ , dada por (2.28), es una solución aproximada de orden dos de la ecuación (2.19) si y sólo si g_ϵ y u_ϵ son soluciones de las ecuaciones (2.29) y (2.30). Además, tenemos que*

$$g_\epsilon(x, \frac{|\xi - u_\epsilon|^2}{2}, t) = \frac{1}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} \tilde{f}_\epsilon(x, u_{\tilde{f}_\epsilon} + |\xi - u_{\tilde{f}_\epsilon}| \omega, t) d\omega + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (2.34)$$

$$\rho_\epsilon u_\epsilon(x, t) = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} \tilde{f}_\epsilon(x, \xi, t) \xi d\xi + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (2.35)$$

Demostración.- Ya conocemos por [33] que (2.28) constituye una solución aproximada de orden uno a la ecuación cinética (2.19) si y solamente si (g_ϵ, u_ϵ) es una solución del sistema (2.20)–(2.21). Como una solución aproximada de orden dos es necesariamente una solución aproximada de orden uno, debemos buscar (g_ϵ, u_ϵ) como una perturbación de las ecuaciones (2.20)–(2.21) en base a términos de orden ϵ , a saber:

$$\frac{\partial g_\epsilon}{\partial t} + (u_\epsilon \cdot \nabla_x) g_\epsilon - \frac{2}{d} v \frac{\partial g_\epsilon}{\partial v} (\nabla_x \cdot u) = \epsilon R_\epsilon, \quad (2.36)$$

$$m \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_\epsilon u_\epsilon) + \nabla_x \cdot (\rho_\epsilon u_\epsilon u_\epsilon) \right) + \nabla_x \cdot \left(\frac{2e_\epsilon}{d} \right) = \epsilon S_\epsilon, \quad (2.37)$$

donde $R_\epsilon = R_\epsilon(x, v, t)$ y $S_\epsilon = S_\epsilon(x, t)$ son de orden uno. Probaremos, por tanto, que para que (2.28) sea una solución aproximada de orden dos de (2.19) es necesario y suficiente que R_ϵ y S_ϵ vengan dados por

$$R = \frac{2}{d} v^{1-\frac{d}{2}} \left(\nabla_x + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p \frac{\partial}{\partial v} \right) \cdot \left[\tau v^{\frac{d}{2}} \left(\nabla_x + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p \frac{\partial}{\partial v} \right) g \right] + \frac{4\tau}{d(d+2)} v^{1-\frac{d}{2}} \frac{\partial}{\partial v} \left(v^{\frac{d+2}{2}} \frac{\partial g}{\partial v} \right) (\sigma(u) : \nabla_x u), \quad (2.38)$$

$$S = \nabla_x [\mu \sigma(u)], \quad (2.39)$$

donde el subíndice ϵ ha sido omitido por simplicidad.

Insertando la expresión (2.28) para una solución aproximada de orden dos en la ecuación (2.26) obtenemos

$$\begin{aligned} & \frac{\partial g}{\partial t} - \frac{\partial g}{\partial v} (\xi - u) \cdot \frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{i=1}^d \xi_i \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} - \frac{\partial g}{\partial v} (\xi - u) \cdot \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) \\ & \quad + \epsilon \left(\frac{\partial f^1}{\partial t} + \xi \cdot \nabla_x f^1 \right) \\ & = \tau^{-1} \left[L_g f^1 + \epsilon \left(L_g f^2 + \frac{1}{2} M_g(f^1, f^1) \right) \right] + \mathcal{O}(\epsilon^2), \end{aligned} \quad (2.40)$$

donde M_g denota a la segunda derivada de Fréchet del operador Q en g : $M_g(f, f) = D^2 Q(g)(f, f)$. A continuación eliminamos las derivadas temporales de g y u que aparecen en (2.40) sustituyéndolas por sus correspondientes expresiones, utilizando las ecuaciones (2.36) y (2.37). Esta manipulación introduce en (2.40) nuevos términos de orden ϵ que corresponden a los segundos miembros de las ecuaciones (2.36) y (2.37), y que dan lugar a la siguiente relación:

$$\begin{aligned} & C(\xi) + (\nabla_x u) : D(\xi) + \epsilon \left(\frac{\partial f^1}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^1 + T \right) \\ & = \tau^{-1} \left[L_g f^1 + \epsilon \left(L_g f^2 + \frac{1}{2} M_g(f^1, f^1) \right) \right] + \mathcal{O}(\epsilon^2), \end{aligned} \quad (2.41)$$

donde

$$T = R - \frac{1}{m\rho} \frac{\partial g}{\partial v} (\xi - u) \cdot S, \quad (2.42)$$

y donde C y $D = (D_{ij})_{i,j=1,\dots,d}$ denotan, respectivamente, al escalar y al tensor

$$C(\xi) = (\xi - u) \cdot \left(\nabla_x g + \frac{2}{md} \frac{1}{\rho} \frac{\partial g}{\partial v} \nabla_x e \right), \quad (2.43)$$

$$D(\xi) = \left[\frac{1}{d} |\xi - u|^2 I - (\xi - u)(\xi - u) \right] \frac{\partial g}{\partial v}, \quad (2.44)$$

siendo I el tensor identidad de \mathbb{R}^d y $(\xi - u)(\xi - u)$ el producto tensorial de $(\xi - u)$ por sí mismo. Puede comprobarse fácilmente que $C(\xi)$ y $D(\xi)$ satisfacen separadamente las condiciones de solubilidad (2.16) y (2.17). Además, $-C(\xi)$ y $-D(\xi)$ son las únicas soluciones en el conjunto ortogonal al núcleo de L_g^* de las ecuaciones

$$L_g(-C) = C, \quad L_g(-D) = D, \quad (2.45)$$

como se deduce del Lema 2.2.2 (vi). La segunda ecuación en (2.45) ha de entenderse componente a componente.

Identificando términos del mismo orden en (2.41) y utilizando el Lema 2.2.2 (vi), se sigue que f^1 es la única solución de

$$L_g f^1 = \tau(C(\xi) + (\nabla_x u) : D(\xi)), \quad f^1 \in N(L_g^*)^\perp,$$

y está dada por

$$f_\epsilon^1 = -\tau(C(\xi) + \nabla_x u_\epsilon : B(\xi)). \quad (2.46)$$

Para completar la demostración sólo falta comprobar que existe una función f^2 que resuelve la ecuación satisfecha al identificar los términos de orden ϵ en (2.41):

$$L_g f^2 = \tau \left(T + \frac{\partial f^1}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^1 \right) - \frac{1}{2} M_g(f^1, f^1), \quad (2.47)$$

si y sólo si R viene dado por (2.38) y S por (2.39). Por el Lema 2.2.2 (vi), f^2 existe si y sólo si el segundo miembro de (2.47) satisface las condiciones de solubilidad (2.16) y (2.17). Comenzamos con el término $M_g(f^1, f^1)$. La expresión para M_g está dada por el lema siguiente, cuya demostración consiste en un simple desarrollo de Taylor (ver Apéndice A de este capítulo):

Lema 2.3.2. *La segunda derivada de Fréchet del operador de colisión Q en g está dada por la siguiente fórmula:*

$$M_g(f, f) = \frac{2}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} \nabla_\xi f(u + |\xi - u|\omega) \cdot \left[\delta_f u - \left(\frac{(\xi - u)}{|\xi - u|} \cdot \delta_f u \right) \omega \right] d\omega$$

$$\begin{aligned}
& + 2g' \left[|\delta_f u|^2 - ((\xi - u) \cdot \delta_f^2 u) \right] \\
& + g'' \left[\frac{1}{d} |\xi - u|^2 |\delta_f u|^2 + ((\xi - u) \cdot \delta_f u)^2 \right], \tag{2.48}
\end{aligned}$$

donde $\delta_f u$ viene dado por (2.9) con $\rho = \rho_g$, $u = u_g$ y

$$\delta_f^2 u = -\frac{\rho_f}{\rho} \delta_f u, \tag{2.49}$$

y donde las "primas" denotan derivadas de g con respecto a v .

Del hecho de que C y D satisfacen las relaciones de ortogonalidad (2.16) y (2.17), uno puede deducir fácilmente que $\delta_C u = \delta_D u = 0$ (ver (2.9)). Por tanto, utilizando (2.48) se tiene que $M_g(f^1, f^1) = 0$. Para los términos restantes utilizaremos la siguiente notación: sea φ una función arbitraria de la variable ξ . Entonces,

$$\langle \varphi \rangle_{S^{d-1}} = \frac{1}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} \varphi(u + |\xi - u|\omega) d\omega$$

y

$$\langle \varphi \rangle_{\mathbb{R}^d} = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} \varphi(\xi) d\xi.$$

En primer lugar observamos que

$$\langle T \rangle_{S^{d-1}} = R, \quad \langle \xi T \rangle_{\mathbb{R}^d} = \frac{1}{m} S. \tag{2.50}$$

Por tanto, quedan por demostrar las siguientes relaciones:

$$\left\langle \frac{\partial f^1}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^1 \right\rangle_{S^{d-1}} = 0, \tag{2.51}$$

$$\left\langle \xi \left(\frac{\partial f^1}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^1 \right) \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = 0. \tag{2.52}$$

Comenzaremos por calcular los términos de (2.51) y (2.52) que involucran derivadas temporales:

$$\frac{\partial f^1}{\partial t} = -\frac{\partial(\tau C)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t}(\tau(\nabla_x u : D)). \tag{2.53}$$

Dada cualquier función $\psi(v)$, observamos que

$$\langle (\xi - u)_i (\xi - u)_j \psi(v) \rangle_{S^{d-1}} = \frac{2v}{d} \psi(v) \delta_{ij}. \quad (2.54)$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} \langle \frac{\partial(\tau C)}{\partial t} \rangle_{S^{d-1}} = & -\frac{\partial u}{\partial t} \cdot \tau \left[\nabla_x g + \frac{2}{md} \frac{1}{\rho} \frac{\partial g}{\partial v} \nabla_x e + \frac{2v}{d} \nabla_x \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right) \right. \\ & \left. + \frac{4}{md^2} \frac{1}{\rho} v \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} \nabla_x e \right]. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Por otro lado, $\langle \xi \frac{\partial(\tau C)}{\partial t} \rangle_{\mathbb{R}^d} = 0$ ya que C es ortogonal al núcleo de L_g^* . La ortogonalidad de D con respecto a $N(L_g^*)$ implica que, para el segundo término del segundo miembro de (2.53), tenemos:

$$\langle \frac{\partial}{\partial t} (\tau(\nabla_x u : D)) \rangle_{S^{d-1}} = \langle \xi \frac{\partial}{\partial t} (\tau(\nabla_x u : D)) \rangle_{\mathbb{R}^d} = 0,$$

donde hemos utilizado que $\langle \frac{\partial D_{ij}}{\partial t} \rangle_{S^{d-1}} = 0$, como se deduce a partir de cálculos sencillos. Ahora volvemos a los términos de (2.51) y (2.52) que incluyen gradientes espaciales. Tenemos que

$$(\xi \cdot \nabla_x) f^1 = - \sum_{i=1}^d \xi_i \left(\frac{\partial(\tau C)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau(\nabla_x u : D)) \right). \quad (2.56)$$

Entonces, utilizando el convenio de índices repetidos de Einstein, deducimos:

$$\begin{aligned} \xi_i \frac{\partial(\tau C)}{\partial x_i} = & \tau \xi_i \left[-\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \left(\frac{\partial g}{\partial x_j} + \frac{2}{md} \frac{1}{\rho} \frac{\partial g}{\partial v} \frac{\partial e}{\partial x_j} \right) \right. \\ & + (\xi - u)_j \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial g}{\partial x_j} + \frac{2}{md} \frac{1}{\rho} \frac{\partial g}{\partial v} \frac{\partial e}{\partial x_j} \right) - (\xi - u)_j \frac{\partial^2 g}{\partial x_j \partial v} (\xi - u)_k \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \\ & \left. - (\xi - u)_j \frac{2}{md} \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} \frac{\partial e}{\partial x_j} (\xi - u)_k \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right] + \xi_i \frac{\partial \tau}{\partial x_i} C. \end{aligned} \quad (2.57)$$

Por consiguiente, usando (2.54) para los términos segundo, tercero y cuarto del segundo miembro de (2.57) obtenemos

$$\langle (\xi \cdot \nabla_x) (\tau C) \rangle_{S^{d-1}} = -((u \cdot \nabla_x) u) \cdot \tau \left(\nabla_x g + \frac{2}{md} \frac{1}{\rho} \frac{\partial g}{\partial v} \nabla_x e \right)$$

$$+ \frac{2v}{d} \nabla_x \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right) + \frac{4}{md^2} \frac{1}{\rho} v \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} \nabla_x e \Big) + \frac{2v}{d} \nabla_x \cdot \left[\tau (\nabla_x g + \frac{2}{md} \frac{1}{\rho} \frac{\partial g}{\partial v} \nabla_x e) \right]. \quad (2.58)$$

De forma similar, para la segunda condición de solubilidad obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \xi_j \xi_i \frac{\partial(\tau C)}{\partial x_i} \rangle_{\mathbb{R}^d} &= \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau \langle \xi_j \xi_i C \rangle_{\mathbb{R}^d}) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} [\tau (\langle (\xi - u)_i (\xi - u)_j C \rangle_{\mathbb{R}^d} + u_i \langle (\xi - u)_j C \rangle_{\mathbb{R}^d} \\ &\quad + u_j \langle (\xi - u)_i C \rangle_{\mathbb{R}^d} + u_i u_j \langle C \rangle_{\mathbb{R}^d})] = 0, \end{aligned}$$

por antisimetría y por el hecho de que $C \in N(L_g^*)^\perp$. Por tanto,

$$\langle \xi (\xi \cdot \nabla_x) (\tau C) \rangle_{\mathbb{R}^d} = 0.$$

Para el segundo término del segundo miembro de (2.56) los cálculos son algo más delicados. Comenzamos con el promedio en \mathbb{R}^d que aparece en la relación (2.52). Tenemos que

$$\langle \xi_k \xi_\ell \frac{\partial}{\partial x_\ell} (\tau (\nabla_x u : D)) \rangle_{\mathbb{R}^d} = \frac{\partial}{\partial x_\ell} (\tau \frac{\partial u_i}{\partial x_j} T_{ij}^{k\ell}), \quad (2.59)$$

con

$$\begin{aligned} T_{ij}^{k\ell} &= \langle (\xi - u)_k (\xi - u)_\ell D_{ij} \rangle_{\mathbb{R}^d} \\ &= \langle (\xi - u)_k (\xi - u)_\ell \frac{|\xi - u|^2}{d} \delta_{ij} \frac{\partial g}{\partial v} \rangle_{\mathbb{R}^d} \\ &\quad - \langle (\xi - u)_k (\xi - u)_\ell (\xi - u)_i (\xi - u)_j \frac{\partial g}{\partial v} \rangle_{\mathbb{R}^d}, \end{aligned} \quad (2.60)$$

como puede deducirse fácilmente. Destacamos también que

$$\int_{\mathbb{R}^d_\xi} \frac{\partial g}{\partial v} |\xi - u|^4 d\xi = -\frac{2}{m} (d+2) e. \quad (2.61)$$

Entonces,

$$\begin{aligned} \langle (\xi - u)_k (\xi - u)_\ell \frac{|\xi - u|^2}{d} \delta_{ij} \frac{\partial g}{\partial v} \rangle_{\mathbb{R}^d} &= \langle \frac{|\xi - u|^4}{d^2} \frac{\partial g}{\partial v} \rangle_{\mathbb{R}^d} \delta_{ij} \delta_{k\ell} \\ &= -\frac{2(d+2)}{md^2} e \delta_{ij} \delta_{k\ell}. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Para acabar de evaluar $T_{ij}^{k\ell}$ debemos distinguir varios casos. En primer lugar, si $i \neq j$ en (2.60), entonces $k = i, l = j$ o bien $k = j, l = i$, ya que de otra manera $T_{ij}^{k\ell} = 0$. En este caso, vemos que

$$T_{ij}^{k\ell} = \frac{2}{md} e, \quad (2.63)$$

donde hemos utilizado (2.61) y la identidad

$$\frac{1}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} \omega_i^2 \omega_j^2 d\omega = \frac{1}{d(d+2)}, \quad \forall i, j \in \{1, \dots, d\}, i \neq j \quad (2.64)$$

(ver Apéndice B a esta sección). Por otro lado, si $i = j$ en (2.60), entonces $k = \ell$ ya que en otro caso $T_{ij}^{k\ell} = 0$. Para el subcaso $(i = j) \neq (k = \ell)$ tenemos que

$$T_{ij}^{k\ell} = -\frac{4}{md^2} e, \quad \forall i, j, k, \ell \text{ tales que } (i = j) \neq (k = \ell), \quad (2.65)$$

mientras que para el subcaso $i = j = k = \ell$ obtenemos

$$T_{ij}^{k\ell} = -\frac{4}{md^2} (1-d)e, \quad \forall i, j, k, \ell \text{ tales que } i = j = k = \ell, \quad (2.66)$$

con la ayuda de la identidad

$$\frac{1}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} \omega_i^4 d\omega = \frac{3}{d(d+2)}, \quad \forall i \in \{1, \dots, d\} \quad (2.67)$$

(ver también Apéndice B). Por tanto, teniendo en cuenta las contribuciones de (2.63), (2.65) y (2.66), la expresión final de $T_{ij}^{k\ell}$ viene dada por

$$T_{ij}^{k\ell} = \frac{2}{md} e \left(\delta_{ik} \delta_{j\ell} + \delta_{i\ell} \delta_{jk} - \frac{2}{d} \delta_{ij} \delta_{k\ell} \right),$$

luego (2.59) se convierte en

$$\langle \xi_k (\xi \cdot \nabla_x) (\tau(\nabla_x u : D)) \rangle_{\mathbb{R}^d} = \frac{\partial}{\partial x_\ell} \left[\frac{2\tau}{md} e \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_\ell} + \frac{\partial u_\ell}{\partial x_k} - \frac{2}{d} (\nabla_x \cdot u) \delta_{k\ell} \right) \right]$$

o bien

$$\langle \xi_k (\xi \cdot \nabla_x) (\tau(\nabla_x u : D)) \rangle_{\mathbb{R}^d} = \frac{1}{m} \nabla_x \cdot [\mu(p) \sigma(u)], \quad (2.68)$$

donde $\mu(p)$ es la viscosidad –una función de la presión p (ver relaciones (2.32) y (2.33))– y $\sigma(u)$ es el tensor de deformación (2.31) de traza cero.

Investigamos ahora el promedio sobre la esfera S^{d-1} , siguiendo el programa indicado en (2.51), del segundo término del segundo miembro de (2.56). Tenemos:

$$\begin{aligned} \xi_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\tau \frac{\partial u_i}{\partial x_j} D_{ij} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\tau \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \xi_k \left(\frac{1}{d} |\xi - u|^2 \delta_{ij} - (\xi - u)_i (\xi - u)_j \right) \frac{\partial g}{\partial v} \\ &+ \tau \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \xi_k \left(\frac{1}{d} |\xi - u|^2 \delta_{ij} - (\xi - u)_i (\xi - u)_j \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right) - \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} (\xi - u)_\ell \frac{\partial u_\ell}{\partial x_k} \right) \\ &+ \tau \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \xi_k \left(-\frac{2}{d} (\xi - u)_\ell \frac{\partial u_\ell}{\partial x_k} \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} (\xi - u)_j + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} (\xi - u)_i \right) \frac{\partial g}{\partial v}. \end{aligned}$$

Debido a la ortogonalidad de D con respecto al núcleo de L_g^* , deducimos que

$$\begin{aligned} \left\langle \xi_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\tau (\nabla_x u : D) \right) \right\rangle_{S^{d-1}} &= \tau \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left[\left\langle (\xi - u)_k \left(\frac{1}{d} |\xi - u|^2 \delta_{ij} \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - (\xi - u)_i (\xi - u)_j \right) \left(-\frac{\partial^2 g}{\partial v^2} (\xi - u)_\ell \frac{\partial u_\ell}{\partial x_k} \right) \right\rangle_{S^{d-1}} \\ &+ \left. \left\langle (\xi - u)_k \left(-\frac{2}{d} (\xi - u)_\ell \frac{\partial u_\ell}{\partial x_k} \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} (\xi - u)_j + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} (\xi - u)_i \right) \frac{\partial g}{\partial v} \right\rangle_{S^{d-1}} \right] \\ &= \tau \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left[(2v)^2 \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} \frac{1}{d(d+2)} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{d} (\nabla_x \cdot u) \delta_{ij} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(-\frac{4v}{d^2} (\nabla_x \cdot u) \delta_{ij} + \frac{2v}{d} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) \frac{\partial g}{\partial v} \right]. \quad (2.69) \end{aligned}$$

Para conseguir la segunda igualdad en esta última fórmula hemos necesitado de la identidad

$$\frac{1}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} \left(\frac{1}{d} \delta_{ij} - \omega_i \omega_j \right) \omega_k \omega_\ell d\omega = -\frac{1}{d(d+2)} [\delta_{ik} \delta_{j\ell} + \delta_{i\ell} \delta_{jk} - \frac{2}{d} \delta_{ij} \delta_{k\ell}].$$

Por consiguiente, (2.69) puede reescribirse de la siguiente forma:

$$\left\langle \xi_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\tau (\nabla_x u : D) \right) \right\rangle_{S^{d-1}}$$

$$\begin{aligned}
&= \tau(2v)^2 \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} \frac{1}{d(d+2)} \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 - \frac{2}{d} (\nabla_x \cdot u)^2 \right] \\
&\quad + \tau \frac{2v}{d} \frac{\partial g}{\partial v} \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 - \frac{2}{d} (\nabla_x \cdot u)^2 \right]. \quad (2.70)
\end{aligned}$$

Recopilando las distintas contribuciones (2.55), (2.58), (2.59) y (2.70) de C y D a las condiciones de solubilidad (2.51) y (2.52), llegamos finalmente a la siguiente igualdad:

$$\begin{aligned}
\langle \frac{\partial f^1}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^1 \rangle_{S^{d-1}} &= \tau \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) u \right) \cdot \left[\nabla_x g + \frac{2}{md} \frac{1}{\rho} \frac{\partial g}{\partial v} \nabla_x e \right. \\
&\quad \left. + \frac{2v}{d} \nabla_x \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right) + \frac{4}{md^2} \frac{1}{\rho} v \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} \nabla_x e \right] - \frac{2v}{d} \nabla_x \cdot \left[\tau (\nabla_x g + \frac{2}{md} \frac{1}{\rho} \frac{\partial g}{\partial v} \nabla_x e) \right] \\
&\quad - \tau(2v)^2 \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} \frac{1}{d(d+2)} \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 - \frac{2}{d} (\nabla_x \cdot u)^2 \right] \\
&\quad - \tau \frac{2v}{d} \frac{\partial g}{\partial v} \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 - \frac{2}{d} (\nabla_x \cdot u)^2 \right]. \quad (2.71)
\end{aligned}$$

Veamos ahora cómo se puede expresar el factor $\partial_t u + (u \cdot \nabla_x) u$ que aparece en (2.71): integrando la ecuación (2.29) con respecto a ξ , obtenemos en primer lugar la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho u) = \epsilon r, \quad (2.72)$$

con

$$r = \int_0^\infty R |S^{d-1}| (2v)^{\frac{d-2}{2}} dv,$$

la cual, introducida en la ecuación (2.30), proporciona la siguiente forma equivalente para (2.30) (para soluciones regulares):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) u + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p = \epsilon \left(\frac{S}{m\rho} - \frac{ru}{\rho} \right). \quad (2.73)$$

Al insertar la ecuación (2.73) (reteniendo sólo términos de primer orden) en (2.71), obtenemos (salvo términos de orden ϵ):

$$\begin{aligned}
& \left\langle \frac{\partial f^1}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^1 \right\rangle_{S^{d-1}} \\
&= -\frac{\tau}{m\rho} \nabla_x p \cdot \left[(\nabla_x + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p \frac{\partial}{\partial v}) g + \frac{2v}{d} \frac{\partial}{\partial v} (\nabla_x + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p \frac{\partial}{\partial v}) g \right] \\
&\quad - \frac{2v}{d} \nabla_x \cdot \left[\tau (\nabla_x + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p \frac{\partial}{\partial v}) g \right] \\
&\quad - \tau \frac{2v}{d} \left(\frac{2}{d+2} v \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} + \frac{\partial g}{\partial v} \right) \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 - \frac{2}{d} (\nabla_x \cdot u)^2 \right] \\
&= -\frac{2}{d} v^{1-\frac{d}{2}} (\nabla_x + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p \frac{\partial}{\partial v}) \left[v^{\frac{d}{2}} \tau (\nabla_x + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p \frac{\partial}{\partial v}) g \right] \\
&\quad - \frac{4\tau}{d(d+2)} v^{1-\frac{d}{2}} \frac{\partial}{\partial v} \left(v^{\frac{d}{2}+1} \frac{\partial g}{\partial v} \right) (\sigma(u) : \nabla_x u). \tag{2.74}
\end{aligned}$$

De forma similar, a través de algunos cálculos simples llegamos a

$$\left\langle \xi \left(\frac{\partial}{\partial t} + \xi_\ell \frac{\partial}{\partial x_\ell} \right) f^1 \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = -\frac{1}{m} \nabla_x \cdot [\mu(p) \sigma(u)]. \tag{2.75}$$

La ecuación (2.47) tiene solución si y sólo si las condiciones de solubilidad del Lema 2.2.2 (vi) son satisfechas, es decir: si nos basamos en (2.50), (2.74) y (2.75), si y solamente si R está dada por (2.38) y S está dada por (2.39). Finalmente, las últimas afirmaciones (2.34) y (2.35) son obvias a partir de (2.28) y de la ortogonalidad de f^1 respecto del núcleo de L^* . Esto completa la demostración del Teorema 2.3.1.

Observamos que la afirmación del “sólo si” en el Teorema 2.3.1 constituye de hecho una derivación del modelo (2.29), (2.30). En efecto, las expresiones para los segundos miembros de las ecuaciones (2.29) y (2.30) son las únicas que hacen que (2.28) sea una solución aproximada de orden dos de la ecuación cinética (2.19), y las únicas también que proporcionan aproximaciones de orden dos del valor medio del momento y de los valores medios de la función de distribución sobre las esferas del espacio de velocidades centradas en la velocidad media.

La ecuación (2.29) es una ecuación de convección-difusión en el espacio (x, ξ) para la función de distribución de energía g en el sistema en reposo del fluido. El término de difusión está formado por dos partes: la primera es una difusión en la dirección oblicua (en el espacio (x, ξ)): $\nabla_x + (m\rho)^{-1}\nabla_x p \partial/\partial v$, que correspondería, en la ecuación de Navier-Stokes usual, al término de conductividad térmica; la segunda es una difusión en la dirección de la energía interna $\partial/\partial v$ y correspondería al trabajo de las fuerzas de viscosidad. Esta correspondencia aparecerá con claridad en la ecuación de energía (2.79). Al ser estas dos direcciones mutuamente independientes, el operador de difusión total es no degenerado. Para u y p dadas, esta ecuación de difusión está claramente bien planteada. Sin embargo, incluso para u dada, teniendo en cuenta (2.33) y que p es un momento de g con respecto a v , observamos que la teoría de existencia y unicidad de soluciones para la ecuación (2.27) constituye un problema abierto. Además, si tenemos en cuenta la ecuación acoplada para el momento (2.29), nos vemos abocados a un problema matemático aún más complejo.

La ecuación (2.29) guarda muchas similitudes con la "ecuación de transporte extendida" de [43], [100], [102] y [101]. Si la comparamos, por ejemplo, con la ecuación (9) de [102]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) f + \frac{1}{4\pi m} \left(\nabla_x + \frac{u}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \right) (\rho u) \\ &= \frac{1}{3} (\nabla_x \cdot u) p \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{m}{4\pi} \left(\frac{\partial}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) \right) u \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} (p \rho u) + \nabla_x u : \frac{1}{p^2} \frac{\partial}{\partial p} (p P), \end{aligned}$$

donde P es el tensor definido por

$$P_{ij} = \sum_{k,l=1}^3 \gamma_{ijkl} \frac{p^3 \tau}{15} \frac{\partial f}{\partial t} \sigma(u)_{kl}$$

y γ es un tensor de viscosidad, podemos comprobar que aparecen los mismos términos para las derivadas de primer orden. Para analizar los términos difusivos debemos utilizar la ecuación (2.30) para eliminar los términos $\nabla_x p$ de (2.29) en favor de la derivada convectiva de la función velocidad. Entonces, reconocemos en la fórmula (9) de [102] las segundas derivadas cruzadas con respecto a x y v que aparecen en el primer término de difusión de (2.29) (se utiliza la notación $p = \sqrt{2}v$ en vez de v en [102]). El segundo término de difusión de (2.29) es también idéntico al último término de la fórmula (9) de [102]. Sin embargo, también existen

algunas diferencias, en particular debidas a la aparición de las llamadas “derivadas espaciales convectivas” en [102]. Estas derivadas involucran factores que dependen de u/c , donde c es la velocidad de la luz, con los que se pretende tener en cuenta, en cierta medida, los efectos relativistas.

Analizamos ahora el sistema de momentos deducido a partir del sistema (2.29)–(2.30). Los momentos de orden superior M_k de g están definidos en (2.24). Destacamos las correspondencias $M_0 = \rho$ y $M_1 = e/m$. El siguiente resultado es consecuencia de algunos cálculos directos:

Proposición 2.3.3. *Para todo entero $p \geq 1$, la $(p+2)$ -upla $\{(M_K)_{k=0,\dots,p}, u\}$ verifica el sistema consistente en la ecuación (2.30) y las ecuaciones*

$$\begin{aligned} & \frac{\partial M_k}{\partial t} + \nabla_x \cdot (uM_k) + \frac{2k}{d} M_k (\nabla_x \cdot u) \\ &= \epsilon \left\{ \frac{2}{d} \nabla_x \cdot (\tau \nabla_x M_{k+1}) - \frac{2}{d} \left(1 + \frac{2k}{d} \right) \nabla_x \cdot \left(\frac{\tau}{m\rho} \nabla_x e \right) M_k \right. \\ & - \frac{2}{d} \left(1 + \frac{4k}{d} \right) \frac{\tau}{m\rho} (\nabla_x e) \cdot \nabla_x M_k + \frac{2}{d} \left(1 + \frac{2k-2}{d} \right) \frac{2k}{d} \tau \left| \frac{\nabla_x e}{m\rho} \right|^2 M_{k-1} \\ & \left. + \frac{2k(2k+d)}{d(d+2)} \tau (\sigma(u) : \nabla_x u) M_k \right\}. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Este conjunto de ecuaciones de momentos puede obtenerse haciendo un desarrollo de tipo Chapman–Enskog (o cualquier aproximación perturbativa semejante, como el llamado método de iteración de la maxwelliana) sobre el sistema de momentos deducido a partir de la ecuación cinética original (2.19). El sistema de momentos no es cerrado porque el término de difusión en la ecuación para el momento de k -ésimo orden depende del momento de orden $k+1$. En particular, el sistema para ρ , u y e puede escribirse de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho u) = 0, \quad (2.77)$$

$$m \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \nabla_x \cdot (\rho u u) \right) + \nabla_x p = \epsilon \nabla_x \cdot [\mu \sigma(u)], \quad (2.78)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) e + \left(\frac{d+2}{d} \right) e (\nabla_x \cdot u) = \epsilon [\mu \sigma(u) : \nabla_x u - \nabla_x \vec{q}], \quad (2.79)$$

donde $\vec{q}(x, t)$ es el flujo térmico definido por

$$\vec{q} = -\frac{2m}{d} \tau \nabla_x M_2 + \frac{2(d+2)}{md^2} \frac{\tau e}{\rho} \nabla_x e. \quad (2.80)$$

Este sistema no se reduce a las ecuaciones compresibles de Navier–Stokes debido a que la expresión para el flujo térmico incorpora el momento de segundo orden M_2 . Además, esta expresión corresponde a la suma de una auténtica difusión actuando sobre M_2 (debido al signo “-”) y una antidifusión actuando sobre e (debido al signo “+”). Obviamente, no podemos deducir que el modelo (2.77)–(2.79) no está bien planteado, pues consiste de hecho en el sistema infinito de ecuaciones de momentos (2.76), que es formalmente equivalente a la ecuación de difusión (2.29), que está bien planteada al menos linealmente.

El término de viscosidad $\nabla_x \cdot [\mu \sigma(u)]$ con $\mu = \tau p$ es parecido al de las ecuaciones compresibles de Navier–Stokes. En efecto, si la frecuencia de colisión τ^{-1} fuese proporcional a la densidad local: $\tau^{-1} = C\rho$, como ocurre para el operador de Boltzmann usual, entonces la viscosidad μ sería proporcional a p/ρ que es, por la ley de los gases perfectos, la definición de temperatura. Si además la constante de proporcionalidad C fuese una función de p/ρ , recuperaríamos entonces una viscosidad $\mu(T)$ dependiente de la temperatura, como ocurre en las ecuaciones compresibles de Navier–Stokes usuales (ver, por ejemplo, [6]).

Como ejemplo, es instructivo investigar cuál es la expresión del flujo térmico (2.80) cuando $g(v)$ es una distribución maxwelliana:

$$g(v) = \frac{\rho}{\left(\frac{2\pi T}{m}\right)^{d/2}} \exp\left(-\frac{mv}{T}\right).$$

Una serie de cálculos directos conducen a las siguientes expresiones:

$$e = \frac{d}{2} \rho T, \quad p = \rho T, \quad M_2 = \frac{d(d+2)}{4m^2} \rho T^2,$$

de donde deducimos que el flujo térmico está relacionado con la conductividad térmica κ mediante la ley de Fourier usual:

$$\vec{q} = -\kappa \nabla_x T, \quad \kappa = \frac{d+2}{2m} \tau p.$$

En esta situación, el número de Prandtl es igual a 1:

$$\text{Pr} := \frac{d+2}{2} \frac{\mu}{m\kappa} = 1.$$

Esta es una característica conservada por el modelo BGK usual de la ecuación de Boltzmann. F. Bouchut y B. Perthame encontraron en [14] un modelo BGK refinado que proporciona cualquier número de Prandtl comprendido entre 0 y 1. Una mejora similar del presente modelo podría ser objeto de estudio orientada a obtener el valor $\text{Pr} = 2/3$, propio de los gases monoatómicos.

El cierre por maxwellianas es válido a escalas de tiempo muy grandes, cuando los mecanismos de inestabilidad (no incluidos en el presente modelo) tienen tiempo suficiente para conducir la función de distribución hacia la de energía libre minimal, a saber, la maxwelliana. Para escalas de tiempo más cortas, sin embargo, el cierre por maxwellianas no es una hipótesis válida, y uno ha de recurrir al sistema completo (2.29)–(2.30) o, equivalentemente, al conjunto infinito de ecuaciones de momentos (2.76). En este caso general no existe conexión *a priori* entre e y M_2 . Entonces, el modelo de conductividad térmica (2.80) recoge la influencia de las características de alta energía de la función de distribución (su momento de orden superior M_2) sobre su parte térmica (sus momentos de orden inferior ρ , u y e). Este concepto está en cierto modo relacionado con el modelo de turbulencias $K - \epsilon$ (ver, por ejemplo, [82]), para el que la influencia del movimiento turbulento a pequeñas escalas sobre las difusividades del modelo fluido a grandes escalas (viscosidad y conductividad térmica) se obtiene a través de procedimientos de promediado. En este caso, se supone que la turbulencia a pequeñas escalas (plasma) influye sobre la función de distribución por medio del operador de colisión $Q(f)$. Por tanto, algunas “características promedio” de los movimientos a pequeñas escalas quedan retenidas en la dependencia de la función de distribución g con respecto a la energía interna v y en la ley de flujo térmico (2.80). Sin embargo, el modelo simple de colisiones (2.3) con el que estamos tratando permite contar con tal tipo de características de alta energía de la función de distribución solamente en el término de flujo térmico, pero no en el término de viscosidad, que sigue siendo el mismo que en la ecuación usual de Navier–Stokes compresible. Es probable que el uso de operadores de colisión más complejos (y realistas para plasmas) se traduzca en términos de viscosidad modificados, susceptibles de explicar mejor los movimientos asociados a escalas pequeñas.

A continuación introducimos un término de fuerza de Lorentz en la ecuación

(2.19):

$$\frac{\partial f_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f_\epsilon + \frac{q}{m} [(A(x, t) + \xi \times B(x, t)) \cdot \nabla_\xi] f_\epsilon = \frac{\tau^{-1}}{\epsilon} Q(f_\epsilon), \quad (2.81)$$

donde suponemos por simplicidad que $d = 3$, q representa a la carga de las partículas y donde $A(x, t)$ y $B(x, t)$ son respectivamente los campos eléctrico y magnético aplicados. En (2.81), la hipótesis subyacente es que los campos eléctrico y magnético son un orden de magnitud (en ϵ) más pequeños que el término de colisión. Por el contrario, en [100] y [102] se supone implícitamente que el campo magnético es del mismo orden de magnitud que el operador de colisión y que el campo eléctrico se deduce de la ley de Ohm generalizada para plasmas (que recordamos es una forma simplificada de la ecuación de conservación del momento del electrón, consultar [66]) $A + u \times B = 0$. Cuando B y Q son del mismo orden de magnitud los cálculos son presumiblemente más complejos. En nuestro caso supondremos desde el principio que no existe ninguna relación *a priori* entre A y B .

En [33] se estableció el límite $\epsilon \rightarrow 0$ de (2.81). Continuando en esta línea, deducimos ahora el desarrollo asintótico de Chapman-Enskog. En particular, probamos que existe una solución aproximada de orden $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ de la forma (2.28), si y sólo si g_ϵ y u_ϵ son soluciones de:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial g_\epsilon}{\partial t} + (u_\epsilon \cdot \nabla_x) g_\epsilon - \frac{2}{3} v \frac{\partial g_\epsilon}{\partial v} \nabla_x \cdot u_\epsilon \\ &= \epsilon \frac{2}{3} v^{-\frac{1}{2}} \left(\nabla_x + \left(\frac{1}{m \rho_\epsilon} \nabla_x p_\epsilon + \frac{q}{m} (A + u_\epsilon \times B) \right) \frac{\partial}{\partial v} \right) \cdot \\ & \quad \left[\tau v^{\frac{3}{2}} \left(\nabla_x + \frac{1}{m \rho_\epsilon} \nabla_x p_\epsilon \frac{\partial}{\partial \xi} \right) g_\epsilon \right] \\ & \quad + \epsilon \frac{4\tau}{15} v^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial v} \left(v^{\frac{5}{2}} \frac{\partial g_\epsilon}{\partial v} \right) (\sigma(u_\epsilon) : \nabla_x u_\epsilon), \end{aligned} \quad (2.82)$$

$$\begin{aligned} & m \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_\epsilon u_\epsilon) + \nabla_x \cdot (\rho_\epsilon u_\epsilon u_\epsilon) \right) + \nabla_x p_\epsilon - q \rho_\epsilon (A + u_\epsilon \times B) \\ & \quad \epsilon \nabla_x \cdot [\mu_\epsilon \sigma(u_\epsilon)]. \end{aligned} \quad (2.83)$$

En estas ecuaciones $\sigma(u_\epsilon)$ y μ_ϵ continúan denotando, respectivamente, al tensor de deformación de traza nula y a la viscosidad, definidos por las relaciones (2.31) y (2.32). Tenemos que:

Teorema 2.3.4. *Las mismas conclusiones que las obtenidas en el Teorema 2.3.1 son válidas para $d = 3$, cuando la ecuación (2.19) es reemplazada por la ecuación (2.122) y el sistema (2.29)–(2.30) es reemplazado por el sistema (2.82)–(2.83).*

Demostración.— La demostración sigue los mismos pasos que la del Teorema 2.3.1. Nuevamente omitimos el subíndice ϵ por comodidad, y mostramos que las ecuaciones (2.82), (2.83) son condiciones suficientes para asegurar que (2.28) es una solución aproximada de orden dos de las ecuaciones cinéticas (2.81). El hecho de ser también una condición necesaria se extrae a través de los mismos argumentos utilizados en la demostración del Teorema 2.3.1, y por tanto se omite aquí. Insertando (2.28) en la ecuación (2.81) y sustituyendo las derivadas temporales de g y de u por sus expresiones en (2.82), (2.83), llegamos a

$$\begin{aligned} C(\xi) + (\nabla_x u) : D(\xi) + \epsilon \left(\frac{\partial f^1}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^1 + \left(\frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi \right) f^1 + T + T' \right) \\ = \tau^{-1} \left[L_g f^1 + \epsilon \left(L_g f^2 + \frac{1}{2} M_g(f^1, f^1) \right) \right], \end{aligned} \quad (2.84)$$

donde $F = q(A + \xi \times B)$, T viene dada por la fórmula (2.42) y

$$T' = -\frac{2\tau}{3} v^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{q}{m} (A + u \times B) \frac{\partial}{\partial v} \right) \cdot \left[v^{\frac{3}{2}} \left(\nabla_x + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p \frac{\partial}{\partial v} \right) g \right]. \quad (2.85)$$

Si ahora identificamos términos del mismo orden en (2.84), se sigue que f^1 es de la forma (2.46) y que f^2 es una solución de

$$\tau^{-1} L_g f^2 = T + \frac{\partial f^1}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^1 - \frac{\tau^{-1}}{2} M_g(f^1, f^1) + T' + \left(\frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi \right) f^1. \quad (2.86)$$

Recordamos que una condición suficiente y necesaria para la existencia de f^2 es que el segundo miembro de la ecuación (2.86) satisfaga las relaciones de ortogonalidad (2.16), (2.17). Sin embargo, comparando la ecuación (2.86) con la ecuación (2.47) descubrimos que lo único que falta por demostrar son las relaciones

$$\langle T' + \left(\frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi \right) f^1 \rangle_{S^2} = 0, \quad \langle \xi \left(T' + \left(\frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi \right) f^1 \right) \rangle_{\mathbb{R}^d} = 0. \quad (2.87)$$

Para verificar (2.87) calculamos

$$\nabla_\xi C = \left(\nabla_x + \frac{1}{m\rho} \nabla_x p \frac{\partial}{\partial v} \right) g + (\xi - u) ((\xi - u) \cdot \nabla_x) \frac{\partial g}{\partial v}$$

$$+ \frac{1}{m\rho}(\xi - u) ((\xi - u) \cdot \nabla_x) p \frac{\partial^2 g}{\partial v^2}$$

y

$$\begin{aligned} \nabla_\xi (\nabla_x u : D) &= \left[\frac{2}{d}(\xi - u) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \nabla_\xi ((\xi - u)_i (\xi - u)_j) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] \frac{\partial g}{\partial v} \\ &+ (\xi - u) \left[\frac{1}{d}|\xi - u|^2 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - (\xi - u)_i (\xi - u)_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] \frac{\partial^2 g}{\partial v^2}, \end{aligned}$$

donde se impone nuevamente el criterio de sumación sobre índices repetidos. Entonces

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi \right) C \right\rangle_{S^2} &= \frac{q}{m} (A + u \times B) \cdot \left\langle \nabla_\xi C \right\rangle_{S^2} = -\tau^{-1} T', \\ \left\langle \left(\frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi \right) (\nabla_x u : D) \right\rangle_{S^2} &= \frac{q}{m} \left\langle ((\xi - u) \times B) \cdot \nabla_\xi (\nabla_x u : D) \right\rangle_{S^2} \\ &= -\frac{q}{m} \left\langle ((\xi - u) \times B) \cdot \nabla_\xi ((\xi - u)_i (\xi - u)_j) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial g}{\partial v} \right\rangle_{S^2} = 0, \end{aligned}$$

como se deduce a partir de cálculos sencillos, y la primera relación de (2.87) se obtiene fácilmente. La segunda relación también se deduce con facilidad de

$$\left\langle \xi S \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = \left\langle \xi \left(\frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi \right) C \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = \left\langle \xi \left(\frac{F}{m} \cdot \nabla_\xi \right) (\nabla_x u : D) \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = 0,$$

con lo que la demostración queda completa.

El operador de difusión en el segundo miembro de (2.82) deja de ser autoadjunto debido a la presencia del término de fuerza de Lorentz. El sistema de momentos deducido a raíz de (2.82) consiste simplemente en el sistema (2.76) con $d = 3$ y el término adicional

$$-\frac{2k}{3} \frac{q}{m} \tau (A + u \times B) \left(\nabla_x M_k - \frac{2}{3m\rho} \left(k + \frac{1}{2} \right) (\nabla_x e) M_{k-1} \right)$$

en el segundo miembro. Observamos que este término es igual a cero para $k = 0$ y $k = 1$, de forma que las ecuaciones (2.77) para la densidad y (2.79) para la energía interna permanecen inalteradas. Finalmente, cuando A y B están relacionados mediante la ley de Ohm $A + u \times B = 0$, lo cual ocurre con bastante frecuencia en física de plasmas (ver [66]), entonces el sistema (2.82)–(2.83) se reduce al sistema de campo cero (2.29)–(2.30).

2.4 Grupo de escala difusivo: el límite incompresible

Nuestro objetivo es ahora estudiar el paso del modelo cinético a la ecuación de Navier–Stokes incompresible en el sentido establecido en [6], [36]. Para ello, introducimos el siguiente grupo de escala difusivo:

$$\epsilon \frac{\partial F_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) F_\epsilon = \frac{\tau^{-1}}{\epsilon} Q(F_\epsilon), \quad (2.88)$$

donde ϵ continúa siendo la razón entre la trayectoria libre media de las partículas y una dimensión macroscópica típica del problema, y $\tau^{-1}(x, t)$ la frecuencia de colisión local en unidades microscópicas. Recordamos que, en un grupo de escala difusivo, la unidad de tiempo macroscópico es del orden de ϵ^{-2} veces mayor que la unidad de tiempo microscópico, mientras que la unidad de longitud macroscópica es sólo del orden de ϵ^{-1} veces mayor que la microscópica. Buscamos soluciones F_ϵ de la ecuación (2.88) en forma de pequeñas perturbaciones de equilibrios globales:

$$F_\epsilon(x, \xi, t) = G\left(\frac{|\xi|^2}{2}\right) + \epsilon f_\epsilon(x, \xi, t), \quad (2.89)$$

donde G es ahora una función de distribución de equilibrio absoluto relativa al operador de colisión Q (es decir, un elemento del núcleo de Q independiente de la posición y del tiempo). Después de una elección adecuada del sistema de referencia, la velocidad media de G puede elegirse igual a 0. Denotamos también por ρ_0 y e_0 a su densidad y energía interna, respectivamente:

$$\int_{\mathbb{R}^d_\xi} G\left(\frac{|\xi|^2}{2}\right) d\xi = \rho_0, \quad \int_{\mathbb{R}^d_\xi} G\left(\frac{|\xi|^2}{2}\right) \xi d\xi = 0, \quad m \int_{\mathbb{R}^d_\xi} G\left(\frac{|\xi|^2}{2}\right) \frac{|\xi|^2}{2} d\xi = e_0. \quad (2.90)$$

Las pequeñas perturbaciones de equilibrios absolutos son utilizadas en mecánica de fluidos meteorológicos para obtener la aproximación de Boussinesq de las ecuaciones de Navier–Stokes compresibles (consultar, por ejemplo, [103] y [104]). El modelo de Boussinesq consiste esencialmente en las ecuaciones de Navier–Stokes incompresibles para la velocidad del fluido junto con una ecuación de transporte–difusión (a la que hemos llamado ecuación del calor) para la temperatura (de la perturbación). La densidad (de la perturbación) está vinculada a la temperatura (de la perturbación) mediante una relación lineal llamada relación de Boussinesq. En [6], el modelo de Boussinesq se obtiene a partir de un grupo de escala difusivo para la ecuación de Boltzmann bajo la hipótesis de pequeñas perturbaciones de

equilibrios absolutos de la forma (2.89), donde G es una distribución maxwelliana. Una pregunta que surge de forma natural es si el modelo de Boussinesq puede recuperarse a partir del operador de colisión onda-partícula (2.3). Veremos que el límite $\epsilon \rightarrow 0$ de (2.88), (2.89) consiste en las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles acopladas con una ecuación de difusión para la función de distribución de energía (de la perturbación), ligadas a su vez por una condición análoga a la de Boussinesq. El paso al límite se establece en el siguiente resultado:

Teorema 2.4.1. *Sea $F_\epsilon(x, \xi, t)$ una sucesión de soluciones no negativas de la ecuación cinética escalada (2.88) tal que, escrita de la forma (2.89), la sucesión f_ϵ converge, en un espacio de funciones "suficientemente regulares", hacia una función f cuando ϵ tiende a cero. Entonces, f es de la forma*

$$f(x, \xi, t) = \Phi(x, \frac{|\xi|^2}{2}, t) - G'(\frac{|\xi|^2}{2})(\xi \cdot u(x, t)), \quad (2.91)$$

donde la velocidad u y la densidad de energía interna e satisfacen respectivamente las condiciones de incompresibilidad y de Boussinesq

$$\nabla_x \cdot u = 0, \quad \nabla_x e = 0, \quad (2.92)$$

con

$$e = m \int_{\mathbb{R}_\xi^d} \Phi(\frac{|\xi|^2}{2}) \frac{|\xi|^2}{2} d\xi = m \int_0^\infty \Phi(v) v (2v)^{\frac{d}{2}-1} |\mathcal{S}^{d-1}| dv. \quad (2.93)$$

Además, las funciones Φ y u son soluciones de

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) \Phi + \frac{2v}{d} G' r = \frac{2v}{d} \nabla_x \cdot (\tau \nabla_x \Phi) \quad (2.94)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) u + \frac{1}{m\rho_0} \nabla_x p = \frac{1}{m\rho_0} \nabla_x \cdot (\mu \sigma(u)), \quad (2.95)$$

donde la viscosidad μ viene dada por

$$\mu = \frac{2e_0}{d} \tau, \quad (2.96)$$

siendo ρ_0 y e_0 los momentos de G dados por (2.90). En estas ecuaciones p (la presión) y r son funciones reales de (x, t) que representan, respectivamente, a los multiplicadores de Lagrange asociados a la primera y segunda ligadura de (2.92).

Considerando la relación de incompresibilidad establecida en (2.92), el tensor de deformación $\sigma(u)$ viene dado ahora por la expresión

$$\sigma(u)_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}. \quad (2.97)$$

Antes de proceder a la demostración de este resultado es conveniente destacar que ϵu es, salvo términos de orden ϵ^2 , la velocidad media de la función de distribución total F_ϵ definida por (2.89). En efecto:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} F_\epsilon(\xi) \xi \, d\xi \left(\int_{\mathbb{R}_\xi^d} F_\epsilon(\xi) \, d\xi \right)^{-1} &= \epsilon \rho_0^{-1} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f_\epsilon(\xi) \xi \, d\xi + \mathcal{O}(\epsilon)^2 \\ &- \epsilon \rho_0^{-1} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} G' \left(\frac{|\xi|^2}{2} \right) \xi \xi \, d\xi u + \mathcal{O}(\epsilon)^2 = \epsilon u. \end{aligned} \quad (2.98)$$

No hay confusión posible con la velocidad media de G , que ahora vale 0. Cuando τ es constante, la ecuación (2.95) junto con la primera ecuación de (2.92) constituyen el sistema de Navier–Stokes incompresible para la velocidad u . Además, tal como muestra el análisis del sistema de momentos descrito más adelante, la ecuación (2.94) y la segunda ecuación de (2.92) son respectivamente formas generalizadas de la ecuación del calor y de la relación de Boussinesq. Estas consisten ahora en una ecuación de transporte–difusión para la función de distribución de energía Φ con una ligadura integral que se traduce en la introducción del multiplicador de Lagrange r .

Demostración del Teorema 2.4.1.- Insertando (2.89) en la ecuación (2.88) obtenemos:

$$\epsilon \frac{\partial f_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f_\epsilon = \tau^{-1} \left[\frac{1}{\epsilon} L_G f_\epsilon + \frac{1}{2} M_G(f_\epsilon, f_\epsilon) + \frac{\epsilon}{6} T_G(f_\epsilon, f_\epsilon, f_\epsilon) \right] + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (2.99)$$

donde hemos hecho un desarrollo de Taylor hasta el tercer orden en ϵ y donde $L_G f$, $M_G(f, f)$ y $T_G(f, f, f)$ son respectivamente las derivadas de Fréchet primera, segunda y tercera de Q en $G(|\xi|^2/2)$. Cuando $g = G(|\xi|^2/2)$, las expresiones (2.10) y (2.48) de L_g y M_g se transforman en

$$L_G f = \frac{1}{|S^{d-1}|} \int_{S^{d-1}} f(|\xi|\omega) \, d\omega - G' \left(\frac{|\xi|^2}{2} \right) (\xi \cdot u) - f, \quad (2.100)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}M_G(f, f) &= \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} \nabla_\xi f(|\xi|\omega) \cdot \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) d\omega \\ &+ G' \left(\frac{|\xi|^2}{2} \right) \left(|u|^2 + \frac{\rho}{\rho_0} (\xi \cdot u) \right) + \frac{1}{2} G'' \left(\frac{|\xi|^2}{2} \right) \left(\frac{1}{d} |\xi|^2 |u|^2 + (\xi \cdot u)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.101)$$

donde ahora hemos denotado a $\delta_f u$ por u (ver ecuación (2.9)),

$$u = \frac{1}{\rho_0} \int_{\mathbb{R}^d} f(\xi) \xi d\xi.$$

De forma similar, la cantidad $\delta_f^2 u$ en (2.49) viene dada ahora por

$$\delta_f^2 u = -\frac{\rho}{\rho_0} u, \quad \text{con } \rho = \int_{\mathbb{R}^d} f d\xi.$$

La tercera derivada $T_G(f, f, f)$ de Q en $G(|\xi|^2/2)$ viene expresada en el siguiente lema, cuya demostración se basa en un simple desarrollo de Taylor (ver Apéndice A):

Lema 2.4.2. *La tercera derivada de Fréchet del operador de colisión Q en un equilibrio absoluto G viene dada por*

$$\begin{aligned} \frac{1}{6} T_G(f, f, f) &= \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} \left\{ \nabla_\xi f(|\xi|\omega) \right. \\ &\cdot \left[-\frac{\rho}{\rho_0} \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) + \frac{1}{2|\xi|^3} (|u|^2 |\xi|^2 - (u \cdot \xi)^2) \omega \right] \\ &+ \frac{1}{2} \nabla_\xi^2 f(|\xi|\omega) : \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) \left. \right\} d\omega \\ &\quad - G' \left[\frac{\rho^2}{\rho_0^2} (\xi \cdot u) + 2 \frac{\rho}{\rho_0} |u|^2 \right] \\ &\quad - G'' \left[\frac{\rho}{\rho_0} \left(\frac{|u|^2 |\xi|^2}{d} + (u \cdot \xi)^2 \right) + \left(\frac{d+1}{d} \right) (u \cdot \xi) |u|^2 \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} G''' (u \cdot \xi) \left(\frac{|u|^2 |\xi|^2}{d} + \frac{1}{3} (u \cdot \xi)^2 \right), \end{aligned} \quad (2.102)$$

donde las “primas” denotan derivadas de G con respecto a $v = |\xi|^2/2$.

El sistema (2.94)–(2.95) se obtiene insertando el desarrollo de Hilbert clásico de f_ϵ

$$f_\epsilon = f_0 + \epsilon f_1 + \epsilon^2 f_2 + \dots$$

en (2.99) e igualando términos del mismo orden en ϵ . Esto conduce al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\tau^{-1} L_G f_0 = 0, \quad (2.103)$$

$$\tau^{-1} L_G f_1 = (\xi \cdot \nabla_x) f_0 - \frac{1}{2} \tau^{-1} M_G(f_0, f_0), \quad (2.104)$$

$$\tau^{-1} L_G f_2 = \frac{\partial f_0}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f_1 - \tau^{-1} M_G(f_0, f_1) - \frac{\tau^{-1}}{6} T_G(f_0, f_0, f_0). \quad (2.105)$$

Por (2.103), f_0 pertenece al núcleo de L_G y, consecuentemente, conforme al Lema 2.2.2 (iii), f_0 viene dada por (2.91) con $\Phi(x, \frac{|\xi|^2}{2}, t)$ y $u(x, t)$ funciones a determinar. Denotamos por h_1 al segundo miembro de la ecuación (2.104). Entonces, tras evaluar $M_G(f_0, f_0)$ mediante (2.101), obtenemos que

$$h_1 = (\xi \cdot \nabla_x) \Phi - G'(\nabla_x u : \xi \xi) + \tau^{-1} \left[\Phi'(\xi \cdot u) - G' \frac{\rho}{\rho_0}(\xi \cdot u) - \frac{1}{2} G'' \left((\xi \cdot u)^2 - \frac{|\xi|^2 |u|^2}{d} \right) \right],$$

con

$$\rho = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} \Phi d\xi.$$

Conforme al Lema 2.2.2 (vi), la ecuación (2.104) es resoluble supuesto que h_1 satisface las condiciones de solubilidad (2.16) y (2.17). Tras algunos cálculos sencillos se comprueba que (2.16) impone la condición de incompresibilidad (primera ecuación en (2.92)), mientras que (2.17) impone la condición de Boussinesq (segunda ecuación en (2.92)). Una vez que estas condiciones son satisfechas, f^1 viene dada por

$$\begin{aligned} f_1 &= -\tau h_1 + \Phi^1 - G'(\xi \cdot u^1) \\ &= -\tau((\xi \cdot \nabla_x) \Phi - G'(\nabla_x u : \xi \xi)) - \Phi'(\xi \cdot u) + G' \frac{\rho}{\rho_0}(\xi \cdot u) \\ &\quad + \frac{1}{2} G'' \left((\xi \cdot u)^2 - \frac{|\xi|^2 |u|^2}{d} \right) + \Phi^1 - G'(\xi \cdot u^1), \end{aligned} \quad (2.106)$$

donde $\Phi^1 = \Phi^1(x, |\xi|^2/2, t)$ y $u^1 = u^1(x, t)$ son arbitrarias, como consecuencia del Lema 2.2.2 (vi).

Con la mirada puesta en analizar las condiciones de solubilidad para la ecuación (2.105), calculamos:

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{\partial \Phi}{\partial t} - G' \left(\xi \cdot \frac{\partial u}{\partial t} \right) \quad (2.107)$$

y

$$\begin{aligned} (\xi \cdot \nabla_x) f_1 &= \xi \xi : [-\nabla_x(\tau \nabla_x \Phi) - u \nabla_x \Phi' - \Phi' \nabla_x u \\ &+ G' \left(\frac{u}{\rho_0} \nabla_x \rho + \frac{\rho}{\rho_0} \nabla_x u \right) - G' \nabla_x u^1] + \xi \xi \xi : [G' \nabla_x(\tau \nabla_x u) + G'' u \nabla_x u] \\ &- G'' \frac{|\xi|^2}{d} [((\xi \cdot \nabla_x) u) \cdot u] + (\xi \cdot \nabla_x) \Phi^1, \end{aligned} \quad (2.108)$$

donde recordamos que las “primas” denotan derivadas con respecto a v . La notación $:$ hace referencia, por otra parte, al producto contraído de tensores de rango tres:

$$A:B = \sum_{i,j,k} A_{ijk} B_{ijk}.$$

Tras algunos cálculos sencillos aunque largos, obtenemos también

$$\begin{aligned} M_G(f_0, f_1) &= -[\Phi'(\xi \cdot u^1) + \Phi^1(\xi \cdot u)] - \tau \frac{|\xi|^2}{d} (u \cdot \nabla_x) \Phi' \\ &- \tau (u \cdot \nabla_x) \Phi - 2 \left(G' + \frac{|\xi|^2}{d} G'' \right) (u \cdot u^1) \\ &+ G' \left[\frac{\rho}{\rho_0} (\xi \cdot u^1) + \frac{\rho^1}{\rho_0} (\xi \cdot u) + 2u \cdot u^1 \right] \\ &+ \frac{1}{2} G'' \left[\frac{2|\xi|^2}{d} (u \cdot u^1) + 2(\xi \cdot u)(\xi \cdot u^1) \right] \\ &- |u|^2 \left(\frac{|\xi|^2}{d} \Phi'' + \Phi' \right) + \frac{\rho}{\rho_0} |u|^2 \left(G' + \frac{|\xi|^2}{d} G'' \right), \end{aligned} \quad (2.109)$$

con

$$\rho^1 = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} \Phi^1 d\xi$$

y, a raíz de (2.102),

$$\begin{aligned} \frac{1}{6}T_G(f_0, f_0, f_0) &= \Phi' \left[\frac{\rho}{\rho_0}(\xi \cdot u) + |u|^2 \right] + \frac{1}{2}\Phi'' \left(\frac{|\xi|^2|u|^2}{d} + (u \cdot \xi)^2 \right) \\ &\quad - G' \left[\frac{\rho^2}{\rho_0^2}(\xi \cdot u) + \frac{\rho}{\rho_0}|u|^2 \right] + G'' \left[\frac{|u|^2}{d}(\xi \cdot u) - \frac{\rho}{\rho_0}(u \cdot \xi)^2 \right] \\ &\quad + \frac{1}{2}G'''(u \cdot \xi) \left[\frac{|\xi|^2|u|^2}{d} - \frac{1}{3}(u \cdot \xi)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.110)$$

Entonces, reuniendo (2.107)–(2.110) y aplicando la primera condición de solubilidad (2.16) a la ecuación (2.105) obtenemos:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) \Phi - \frac{2v}{d} \nabla_x \cdot (\tau \nabla_x \Phi) + \frac{2v}{d} G' \left(\frac{1}{\rho_0} (u \cdot \nabla_x) \rho - \nabla_x \cdot u^1 \right) = 0,$$

que es (2.94) con

$$r = \frac{1}{\rho_0} (u \cdot \nabla_x) \rho - \nabla_x \cdot u^1.$$

Destacamos que $\nabla_x \cdot u^1$ es arbitrario y, por tanto, también lo es r . De forma similar, la segunda condición de solubilidad conduce a

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x) u + \frac{1}{d} \nabla_x \left(\frac{2e^1}{m\rho_0} - |u|^2 \right) - \frac{1}{m\rho_0} \nabla_x \cdot (\mu \sigma(u)) = 0$$

con

$$e^1 = m \int_{\mathbb{R}^d} \Phi^1 \frac{|\xi|^2}{2} d\xi$$

y μ dada por (2.96). Esta no es más que la fórmula (2.95) con

$$p = \frac{1}{d} (2e^1 - m\rho_0|u|^2).$$

Como Φ^1 y por tanto e^1 son arbitrarias también lo es p , con lo que concluye la demostración.

Estudiaremos a continuación el sistema de momentos asociado a (2.94). Para ello, denotamos respectivamente por ρ_k y M_k a los momentos de G y Φ :

$$\rho_k = \int_0^\infty G(v) v^k (2v)^{\frac{d-2}{2}} |\mathcal{S}^{d-1}| dv, \quad M_k(x, t) = \int_0^\infty \Phi(x, v, t) v^k (2v)^{\frac{d-2}{2}} |\mathcal{S}^{d-1}| dv.$$

Entonces $\rho_1 = e_0/m$ y $M_1 = e/m$, mientras que $M_0 = \rho$ representa a la densidad de la perturbación Φ . Multiplicando (2.94) por $v^k(2v)^{d/2-1}|\mathcal{S}^{d-1}|$ e integrando con respecto a v obtenemos:

Proposición 2.4.3. *Para todo entero $p \geq 1$, la $(p+2)$ -upla $\{(M_k)_{k=0,\dots,p}, u\}$ verifica el sistema constituido por la ecuación (2.95) y las siguientes ecuaciones, para $k = 0, \dots, p$:*

$$\frac{\partial M_k}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x)M_k - \left(\frac{d+2k}{d}\right)N_k r = \frac{2}{d}\nabla_x \cdot (\tau \nabla_x M_{k+1}). \quad (2.111)$$

El sistema de momentos (2.111) no es cerrado. En particular, si nos restringimos a la densidad ρ y a la energía interna e , obtenemos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x)\rho - \rho_0 r = 0, \quad (2.112)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} - \left(\frac{d+2}{d}\right)e_0 r = \frac{2m}{d}\nabla_x \cdot (\tau \nabla_x M_2). \quad (2.113)$$

Si suponemos que las perturbaciones Φ y u están espacialmente localizadas y se anulan cuando x tiende a infinito, deducimos de la condición de Boussinesq (segunda ecuación en (2.92)) que $e = 0$. Entonces, reescribiendo la ecuación (2.113) como

$$r = -\frac{2m}{(d+2)e_0}\nabla_x \cdot (\tau \nabla_x M_2), \quad (2.114)$$

el multiplicador de Lagrange puede suprimirse de (2.94):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x)\Phi = \frac{2v}{d} \left(\nabla_x \cdot (\tau \nabla_x \Phi) + \frac{2m}{(d+2)e_0} G'(v) \nabla_x \cdot (\tau \nabla_x M_2) \right), \quad (2.115)$$

de (2.111):

$$\frac{\partial M_k}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x)M_k = \frac{2}{d}\nabla_x \cdot (\tau \nabla_x M_{k+1}) - \frac{2(d+2k)m}{d(d+2)e_0} \rho_k \nabla_x \cdot (\tau \nabla_x M_2), \quad (2.116)$$

y en particular de (2.112):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x)\rho = -\frac{2m\rho_0}{(d+2)e_0}\nabla_x \cdot (\tau \nabla_x M_2). \quad (2.117)$$

Es significativo el hecho de que la ligadura de Boussinesq introduce un tipo de término antidifusivo que depende del momento de segundo orden M_2 . Probar que el sistema acoplado para u y Φ (sistema (2.92)–(2.95)) así como el sistema de momentos (2.116) están bien planteados constituye por ahora un problema abierto.

Nuevamente vuelve a ser instructivo analizar lo que ocurre en el caso de una distribución maxwelliana $F_\epsilon = M_{\rho_0+\epsilon\rho, \epsilon u, T_0+\epsilon T}$, donde $M_{\rho, u, T}$ representa a la maxwelliana con densidad ρ , velocidad media u y temperatura T :

$$M_{\rho, u, T}(\xi) = \frac{\rho}{\left(\frac{2\pi T}{m}\right)^{d/2}} \exp(-m|\xi - u|^2/2T).$$

El cierre por maxwellianas podría resultar relevante para escalas grandes de tiempo al igual que en el caso compresible. Desarrollando F_ϵ en potencias de ϵ encontramos que, salvo términos de orden ϵ^2 , es de la forma (2.89) con f_ϵ dada por (2.91) y G y Φ dadas por

$$G\left(\frac{|\xi|^2}{2}\right) = M_{\rho_0, 0, T_0}(\xi), \quad (2.118)$$

$$\Phi\left(x, \frac{|\xi|^2}{2}, t\right) = M_{\rho_0, 0, T_0}(\xi) \left(\frac{\rho}{\rho_0} + \frac{T}{T_0} \left(\frac{m|\xi|^2}{2T_0} - \frac{d}{2} \right) \right). \quad (2.119)$$

Por tanto, podemos cerrar el sistema de momentos utilizando (2.118) para G y (2.119) para Φ . En efecto:

$$\frac{e}{\epsilon_0} = \frac{\rho}{\rho_0} + \frac{T}{T_0}, \quad (2.120)$$

por lo que la condición de Boussinesq (segunda ecuación en (2.92)) en este contexto particular se traduce en

$$\nabla_x \left(\frac{\rho}{\rho_0} + \frac{T}{T_0} \right) = 0,$$

que es la misma condición dada en [6]. Si además las perturbaciones ρ y T se suponen localizadas espacialmente, esta condición se reduce a

$$\frac{\rho}{\rho_0} = -\frac{T}{T_0}, \quad (2.121)$$

como en [103]. Entonces también tenemos que

$$M_2 = \frac{(d+2)\epsilon_0 T_0}{2m^2} \frac{T}{T_0},$$

expresión que, introducida en (2.117), conduce a la ecuación del calor

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{T}{T_0} \right) + (u \cdot \nabla_x) \left(\frac{T}{T_0} \right) = \frac{T_0}{m} \nabla_x \cdot \left(\tau \nabla_x \left(\frac{T}{T_0} \right) \right).$$

Cuando Φ es una solución de (2.94), no es posible en general cerrar la ecuación (2.117) ni el sistema de momentos (2.116). De hecho, el término de conductividad térmica M_2 del modelo de Boussinesq "extendido" (2.117) contiene características de alta energía de la función de distribución Φ , que podrían ser interesantes desde el punto de vista de un posible modelo de turbulencias. Sin embargo, un modelo aún más interesante debería tener en cuenta también la influencia de tales características en el coeficiente de viscosidad, mientras que el presente modelo, por su simplicidad, no lo hace (ver (2.96)). El uso de operadores de colisión más complejos podría suponer una forma de evitar esta restricción.

De forma análoga a la utilizada para derivar el modelo de Boussinesq estándar, el modelo incompresible puede obtenerse a partir del compresible. Sea el par $(g_\epsilon(x, v, \tilde{t}), u_\epsilon(x, \tilde{t}))$ una solución del sistema compresible (2.29)–(2.30), una vez escrito en términos de la variable de tiempo difusiva $\tilde{t} = \epsilon t$. Tenemos la siguiente

Proposición 2.4.4. *Supongamos que g_ϵ y u_ϵ admiten el siguiente desarrollo asintótico cuando $\epsilon \rightarrow 0$:*

$$u_\epsilon(x, \tilde{t}) = \epsilon \tilde{u}(x, \tilde{t}) + \mathcal{O}(\epsilon^2),$$

$$g_\epsilon(x, v, \tilde{t}) = G(v) + \epsilon \Phi(x, v, \tilde{t}) + \mathcal{O}(\epsilon^2),$$

en un espacio de funciones regulares. Entonces, $\tilde{u}(x, \tilde{t})$ y $\Phi(x, v, \tilde{t})$ son soluciones del modelo incompresible (2.92)–(2.95).

En este contexto, los multiplicadores de Lagrange p y r tienen el siguiente significado:

$$r = -\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon^2} (\nabla_x \cdot u_\epsilon), \quad \nabla_x p = \frac{2}{d} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon^2} \nabla_x e_\epsilon.$$

Finalmente, introducimos un término de fuerza de Lorentz en la ecuación (2.88) y consideramos la siguiente ecuación de Boltzmann:

$$\epsilon \frac{\partial F_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) F_\epsilon + \epsilon \frac{q}{m} [(A(x, t) + \xi \times B(x, t)) \cdot \nabla_\xi] F_\epsilon = \frac{\tau^{-1}}{\epsilon} Q(F_\epsilon). \quad (2.122)$$

Este grupo de escala corresponde a un campo de fuerzas de Lorentz dos órdenes de magnitud más pequeño (en ϵ) que el operador de colisión. En efecto, campos de fuerza de orden ϵ en comparación con el operador de colisión darían lugar a una inconsistencia en la relación de Boussinesq. Además, asumimos que A es un campo gradiente $A = -\nabla_x V$, donde V es un potencial electrostático escalar. Esto supone que las derivadas temporales del campo magnético en la ecuación de Maxwell-Faraday son pequeñas y hace que el modelo que estamos tratando sólo se pueda utilizar en algunas situaciones específicas. Buscamos soluciones aproximadas de la forma (2.89). Para ello, tenemos el siguiente resultado:

Teorema 2.4.5. *EL Teorema 2.4.1 sigue siendo válido cuando sustituimos la ecuación (2.88) por la ecuación (2.122). En este caso, las relaciones de incompresibilidad y de Boussinesq vienen dadas por*

$$\nabla_x \cdot u = 0 \quad , \quad \nabla_x \left(e + \frac{3q\rho_0}{2} V \right) = 0, \quad (2.123)$$

mientras que Φ y u satisfacen, respectivamente, la ecuación (2.94) con $d = 3$ y

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla_x)u + \nabla_x p - \frac{q}{m} \left(\frac{\rho}{\rho_0} A + u \times B \right) = \nabla_x \cdot (\mu\sigma(u)), \quad (2.124)$$

donde p y r son los multiplicadores de Lagrange de las ligaduras (2.123).

Demostración.- Insertando (2.89) en la ecuación (2.122) obtenemos:

$$\begin{aligned} & \epsilon \frac{\partial f_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f_\epsilon + \frac{q}{m} (A + \xi \times B) \cdot (G' \xi + \epsilon \nabla_\xi f_\epsilon) \\ & = \tau^{-1} \left[\frac{1}{\epsilon} L_G f_\epsilon + \frac{1}{2} M_g(f_\epsilon, f_\epsilon) + \frac{\epsilon}{6} T_G(f_\epsilon, f_\epsilon, f_\epsilon) \right] + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (2.125)$$

Entonces, si introducimos el desarrollo de Hilbert de f_ϵ en (2.125) e igualamos los términos del mismo orden en ϵ conseguimos el sistema (2.103)–(2.105) con términos adicionales $\frac{q}{m} G' A \cdot \xi$ en el segundo miembro de (2.104) y $\frac{q}{m} [(A + \xi \times B) \cdot \nabla_\xi] f_0$ en el segundo miembro de (2.105). De (2.103) deducimos nuevamente que f_0 viene dada por (2.91), con $\Phi \left(x, \frac{|\xi|^2}{2}, t \right)$ y $u(x, t)$ funciones a determinar. Luego, al aplicar las condiciones de solubilidad (2.16) y (2.17) al segundo miembro de la ecuación (2.86) con el término adicional anteriormente descrito, se obtienen las relaciones

(2.123) de incompresibilidad y de Boussinesq. Una vez que estas condiciones son satisfechas, f^1 viene dada por (2.106) con término adicional $-\frac{q\tau}{m}G'A \cdot \xi$. Sin embargo, como u^1 en (2.106) es arbitrario, este término adicional puede ser absorbido al reemplazar u^1 por $\tilde{u}^1 = u^1 + \frac{q\tau}{m}A$, y ahora \tilde{u}^1 es tan arbitrario como lo es u^1 . Por tanto, los términos $(\xi \cdot \nabla_x)f^1$ y $M_G(f_0, f_1)$ así como $\partial f_0/\partial t$ y $T_G(f_0, f_0, f_0)$ permanecen inalterados en comparación con (2.107)–(2.110). El término adicional del segundo miembro de (2.105) se calcula conforme a:

$$[(A + \xi \times B) \cdot \nabla_\xi]f_0 = \Phi'(A \cdot \xi) - G''(\xi \cdot u)(A \cdot \xi) - G'(A \cdot u) + G'[\xi \cdot (u \times B)]. \quad (2.126)$$

Finalmente, recopilando todos los términos que hemos ido enumerando anteriormente y aplicando las condiciones de solubilidad (2.16) y (2.17) llegamos a las ecuaciones (2.94) y (2.124).

2.5 Apéndice A: Demostración de los Lemas 1.3.2 y 1.4.2

En esta sección calcularemos en detalle las expresiones para las derivadas segunda y tercera $M_g(f, f) := D_g^2 Q(f, f)$ y $T_G(f, f, f) := D_G^3 Q(f, f, f)$ del operador de colisión Q en las distribuciones de equilibrio g y G , respectivamente. Para ello seguiremos la terminología introducida en las secciones anteriores, según la cual recordamos que los equilibrios asociados a Q (o, en otras palabras, los elementos de su núcleo) son de la forma $g := g(|\xi - u|^2/2)$, dada cualquier función arbitraria no negativa $g(v) \in L^2(\mathbb{R}^+, v^{\frac{d}{2}-1} dv)$ y cualquier vector arbitrario $u \in \mathbb{R}^d$. Asimismo, G representa a una distribución de equilibrio global (independiente de x y de t) tal que $u_G = 0$.

Demostración del Lema 2.3.2.- Por comodidad en los cálculos denotaremos por $u := u_g$ y $\rho := \rho_g$. Entonces observamos fácilmente que

$$u_{g+f} = \frac{\rho u + (\rho u)_f}{\rho + \rho_f}.$$

Si hacemos un desarrollo de Taylor de $(\rho + \rho_f)^{-1}$ salvo términos cuadráticos con respecto a f , encontramos que u_{g+f} puede escribirse de manera equivalente como

$$u_{g+f} = u + \delta_f u + \delta_f^2 u + \mathcal{O}(f^2),$$

donde

$$\delta_f u = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^d_\xi} f(\xi - u) d\xi$$

y

$$\delta_f^2 u = -\frac{\rho_f}{\rho} \delta_f u.$$

Entonces

$$|\xi - u_{g+f}| = |\xi - u| \left(1 - 2 \frac{(\xi - u)}{|\xi - u|^2} \cdot \delta_f u - 2 \frac{(\xi - u)}{|\xi - u|^2} \cdot \delta_f^2 u + \frac{|\delta_f u|^2}{|\xi - u|^2} \right)^{1/2}.$$

Si desarrollamos en esta ocasión la raíz cuadrada en serie de Taylor hasta términos de orden cuadrático con respecto a f , tenemos que

$$\begin{aligned} |\xi - u_{g+f}| &= |\xi - u| - \frac{(\xi - u)}{|\xi - u|} \cdot \delta_f u - \frac{(\xi - u)}{|\xi - u|} \cdot \delta_f^2 u \\ &+ \frac{1}{2|\xi - u|^3} \left(|\delta_f u|^2 |\xi - u|^2 - ((\xi - u) \cdot \delta_f u)^2 \right) + \mathcal{O}(f^2). \end{aligned}$$

Por tanto, un nuevo desarrollo en serie de Taylor nos conduce a

$$\begin{aligned} f(u_{g+f} + |\xi - u_{g+f}| \omega) &= f(u + |\xi - u| \omega) \\ &+ f'(u + |\xi - u| \omega) \cdot \left[\delta_f u - \left(\frac{(\xi - u)}{|\xi - u|} \cdot \delta_f u \right) \omega \right] + \mathcal{O}(f^2) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} g(u_{g+f} + |\xi - u_{g+f}| \omega) &= g\left(\frac{|\xi - u|^2}{2}\right) \\ &+ g'\left(\frac{|\xi - u|^2}{2}\right) |\xi - u| \omega \cdot \left[\delta_f u + \delta_f^2 u - \left(\frac{(\xi - u)}{|\xi - u|} \cdot \delta_f u \right) \omega - \left(\frac{(\xi - u)}{|\xi - u|} \cdot \delta_f^2 u \right) \omega \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2|\xi - u|^3} \left(|\delta_f u|^2 |\xi - u|^2 - ((\xi - u) \cdot \delta_f u)^2 \right) \omega \right] \\ &+ \frac{1}{2} \left(g''\left(\frac{|\xi - u|^2}{2}\right) |\xi - u|^2 \omega \omega + g'\left(\frac{|\xi - u|^2}{2}\right) I \right) \\ &: \left(\delta_f u - \left(\frac{(\xi - u)}{|\xi - u|} \cdot \delta_f u \right) \omega \right) \left(\delta_f u - \left(\frac{(\xi - u)}{|\xi - u|} \cdot \delta_f u \right) \omega \right) + \mathcal{O}(f^2), \end{aligned}$$

donde I denota el tensor identidad y \cdot el producto contraído de tensores de rango dos.

La demostración concluye a raíz de la relación

$$Q(g+f) = Q(g) + L_g f + \frac{1}{2} M_g(f, f) + \mathcal{O}(f^2),$$

teniendo en cuenta que $Q(g) = 0$ y

$$L_g(f) = \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} f(u + |\xi - u|\omega) d\omega - g' \left(\frac{|\xi - u|^2}{2} \right) ((\xi - u) \cdot \delta_f u) - f.$$

Demostración del Lema 2.4.2.- Recordamos que podemos considerar

$$u_G = 0, \quad \rho_G = 1$$

sin pérdida de generalidad. Denotaremos por $\rho := \rho_f$ y

$$u := \int_{\mathbb{R}^d} f \xi d\xi.$$

Entonces es sencillo comprobar que

$$u_{G+f} = \frac{u}{1+\rho} + u(1-\rho+\rho^2) + \mathcal{O}(f^3),$$

como se sigue de un simple desarrollo en serie de Taylor hasta términos de tercer orden en f . Tenemos, por tanto, que

$$\begin{aligned} |\xi - u_{G+f}| &= |\xi| \left(1 - \frac{2}{|\xi|^2} (\xi \cdot u) + \frac{2}{|\xi|^2} \rho (\xi \cdot u) \right. \\ &\quad \left. + \frac{|u|^2}{|\xi|^2} - \frac{2}{|\xi|^2} \rho^2 (\xi \cdot u) - \frac{2}{|\xi|^2} \rho |u|^2 + \mathcal{O}(f^3) \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Si desarrollamos nuevamente la raíz cuadrada en serie de Taylor hasta términos de tercer orden en f , obtenemos que

$$|\xi - u_{G+f}| = |\xi| - \frac{\xi}{|\xi|} \cdot u + \rho \frac{\xi}{|\xi|} \cdot u + \frac{1}{2|\xi|^3} (|u|^2 |\xi|^2 - (u \cdot \xi)^2)$$

$$-\rho^2 \frac{\xi}{|\xi|} \cdot u + \left(\frac{u \cdot \xi}{2|\xi|^5} - \frac{\rho}{|\xi|^3} \right) (|u|^2 |\xi|^2 - (u \cdot \xi)^2) + \mathcal{O}(f^3).$$

Como consecuencia, un nuevo desarrollo en serie de Taylor nos conduce a las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} f(u_{G+f} + |\xi - u_{G+f}| \omega) &= f(|\xi| \omega) + f'(|\xi| \omega) \cdot \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) \\ &+ f'(|\xi| \omega) \cdot \left[-\rho \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) + \frac{1}{2|\xi|^3} (|u|^2 |\xi|^2 - (u \cdot \xi)^2) \omega \right] \\ &+ \frac{1}{2} f''(|\xi| \omega) \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega, u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) + \mathcal{O}(f^3) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} G(u_{G+f} + |\xi - u_{G+f}| \omega) &= G + G' |\xi| \omega \cdot \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) \\ &+ G' |\xi| \omega \cdot \left[-\rho \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) + \frac{1}{2|\xi|^3} (|u|^2 |\xi|^2 - (u \cdot \xi)^2) \omega \right] \\ &+ \frac{1}{2} (G'' |\xi|^2 \omega \omega + G' I) : \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) \\ &+ G' |\xi| \omega \cdot \left[\rho^2 \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) + \left(\frac{u \cdot \xi}{2|\xi|^5} - \frac{\rho}{|\xi|^3} \right) (|u|^2 |\xi|^2 - (u \cdot \xi)^2) \omega \right] \\ &\quad + (G'' |\xi|^2 \omega \omega + G' I) \\ &: \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) \left[-\rho \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) + \frac{1}{2|\xi|^3} (|u|^2 |\xi|^2 - (u \cdot \xi)^2) \omega \right] \\ &\quad + \frac{1}{6} (G''' |\xi|^3 \omega \omega \omega + 3G'' |\xi|^2 \omega \tilde{I}) \\ &: \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) + \mathcal{O}(f^3). \end{aligned}$$

En esta última expresión I denota el tensor identidad y $:$ el producto contraído de tensores de rango tres. Además, hemos omitido la dependencia $G^{(k)} := G^{(k)}(|\xi|^2/2)$ tanto para G como para sus derivadas, y hemos utilizado que

$$G\left(\frac{|\xi|^2}{2}\right)' = G' \xi, \quad G\left(\frac{|\xi|^2}{2}\right)'' = G'' \xi \xi + G' I, \quad G\left(\frac{|\xi|^2}{2}\right)''' = G''' \xi \xi \xi + 3G'' \tilde{\xi} I,$$

donde el tensor $\tilde{\xi}I$ está definido por

$$(\tilde{\xi}I)_{ijk} = \frac{1}{3}(\xi_i\delta_{jk} + \xi_j\delta_{ik} + \xi_k\delta_{ij}).$$

La demostración concluye a raíz del desarrollo de $Q(G + f)$ hasta términos de orden tres en f :

$$Q(G + f) = Q(G) + L_G f + \frac{1}{2}M_G(f, f) + \frac{1}{6}T_G(f, f, f) + \mathcal{O}(f^2),$$

teniendo en cuenta que $Q(G) = 0$,

$$L_G(f) = \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} f(|\xi|\omega) d\omega - G'(\xi \cdot u) - f$$

y

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}M_G(f, f) &= \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} f'(|\xi|\omega) \cdot \left(u - \left(\frac{\xi}{|\xi|} \cdot u \right) \omega \right) d\omega \\ &+ G'(\rho(\xi \cdot u) + |u|^2) + \frac{1}{2}G'' \left(\frac{|u|^2|\xi|^2}{d} + (\xi \cdot u)^2 \right), \end{aligned}$$

tal como se desprende del lema anterior para $g = G$.

2.6 Apéndice B

Este apéndice está dedicado a calcular el valor de las integrales

$$\alpha = \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} w_i^2 w_j^2 dw,$$

$$\beta = \frac{1}{|\mathcal{S}^{d-1}|} \int_{\mathcal{S}^{d-1}} w_i^4 dw,$$

con $i, j = 1, \dots, d$. Para ello consideramos la siguiente parametrización de \mathcal{S}^{d-1} :

$$\begin{aligned} x_1 &= \cos\theta_1 \\ x_2 &= \text{sen}\theta_1 \cos\theta_2 \\ x_3 &= \text{sen}\theta_1 \text{sen}\theta_2 \cos\theta_3 \\ &\dots \\ x_{d-1} &= \text{sen}\theta_1 \text{sen}\theta_2 \text{sen}\theta_3 \dots \text{sen}\theta_{d-2} \cos\theta_{d-1} \\ x_d &= \text{sen}\theta_1 \text{sen}\theta_2 \text{sen}\theta_3 \dots \text{sen}\theta_{d-2} \text{sen}\theta_{d-1}, \end{aligned}$$

donde $\theta_k \in [0, \pi]$, $k = 1, \dots, d-2$, y $\theta_{d-1} \in [0, 2\pi)$, de forma que la medida de superficie asociada viene dada por

$$w_{d-1} = \text{sen}^{d-2}\theta_1 \text{sen}^{d-3}\theta_2 \dots \text{sen}\theta_{d-2} d\theta_1 \dots d\theta_{d-2} d\theta_{d-1}.$$

Entonces tenemos que:

$$\alpha = \frac{\int_0^\pi \cos^2\theta_1 \text{sen}^d\theta_1 d\theta_1 \times \int_0^\pi \cos^2\theta_2 \text{sen}^{d-3}\theta_2 d\theta_2}{\int_0^\pi \text{sen}^{d-2}\theta_1 d\theta_1 \times \int_0^\pi \text{sen}^{d-3}\theta_2 d\theta_2}, \quad (2.127)$$

$$\beta = \frac{\int_0^\pi \cos^4\theta_1 \text{sen}^{d-2}\theta_1 d\theta_1}{\int_0^\pi \text{sen}^{d-2}\theta_1 d\theta_1}, \quad (2.128)$$

con

$$d\beta + d(d-1)\alpha = 1. \quad (2.129)$$

Las fórmulas clásicas son

$$|\mathcal{S}^{d-1}| = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2})}.$$

Si $d = 2\delta$ es un número par, entonces $\Gamma(\frac{d}{2}) = \Gamma(\delta) = (\delta-1)!$, por lo que $|\mathcal{S}^{2\delta-1}| = \frac{2\pi^\delta}{(\delta-1)!}$. Por otro lado, si $d = 2\delta + 1$ es impar tenemos que

$$\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta}\theta d\theta = \frac{|\mathcal{S}^{2\delta+1}|}{|\mathcal{S}^{2\delta}|} = \pi \frac{(2\delta-1)!}{2^\delta \delta!},$$

mientras que para $d = 2\delta - 1$

$$\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta-1}\theta d\theta = \frac{|\mathcal{S}^{2\delta}|}{|\mathcal{S}^{2\delta-1}|} = \frac{2^\delta (\delta-1)!}{(2\delta-1)!}.$$

Luego, desarrollando $\cos^4\theta_1$ como $(1 - \text{sen}^2\theta_1)^2$ en (2.128) obtenemos:

$$\beta = 1 - 2 \frac{\int_0^\pi \text{sen}^d\theta d\theta}{\int_0^\pi \text{sen}^{d-2}\theta d\theta} + \frac{\int_0^\pi \text{sen}^{d+2}\theta d\theta}{\int_0^\pi \text{sen}^{d-2}\theta d\theta}. \quad (2.130)$$

Si $d = 2\delta$, entonces

$$\frac{\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta}\theta d\theta}{\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta-2}\theta d\theta} = \frac{2\delta-1}{2\delta}, \quad \frac{\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta+2}\theta d\theta}{\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta-2}\theta d\theta} = \frac{(2\delta-1)(2\delta+1)}{4\delta(\delta+1)},$$

y se deduce fácilmente que $\beta = \frac{3}{d(d+2)}$. Por otro lado, si $d = 2\delta + 1$ entonces

$$\frac{\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta+1}\theta \, d\theta}{\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta-1}\theta \, d\theta} = \frac{2\delta}{2\delta+1}, \quad \frac{\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta+3}\theta \, d\theta}{\int_0^\pi \text{sen}^{2\delta-1}\theta \, d\theta} = \frac{4\delta(\delta+1)}{(2\delta+1)(2\delta+3)}.$$

Otro simple cálculo nos conduce, también en este caso, a la expresión $\beta = \frac{3}{d(d+2)}$.

La conclusión es, por tanto, que para cualquiera que sea la dimensión d del problema β toma el valor

$$\beta = \frac{3}{d(d+2)}$$

y, como consecuencia de la fórmula (2.129),

$$\alpha = \frac{1}{d(d+2)}.$$

Capítulo 3

Un modelo cinético de colisiones de tipo onda-partícula: existencia de soluciones

3.1 Introducción

En este capítulo presentamos un teorema de existencia de soluciones globales para el modelo cinético introducido en el capítulo anterior:

$$\begin{cases} \partial_t f + (\xi \cdot \nabla_x) f = Q(f), \\ f(x, \xi, 0) = f_0(x, \xi), \end{cases} \quad (3.1)$$

donde $Q(f)$ está definido por (2.3)–(2.4) y las densidades de masa, momento y energía asociadas a la función de distribución f vienen dadas por las relaciones (2.5). Asimismo, la velocidad media y la energía interna específica están definidas por (2.6), donde consideramos la masa de las partículas normalizada a la unidad ($m = 1$). Como hemos visto antes, este sistema rige el transporte de un flujo de cometas en un plasma astrofísico. Desde el punto de vista matemático, la dificultad fundamental del modelo procede de la no linealidad del operador de colisión Q , inducida por la aparición de la velocidad media u_f en el operador de proyección P_{u_f} . El problema (3.1) está ahora escrito en forma adimensional. En particular, como tiempo de referencia se ha utilizado el tiempo de relajación que aparece en la versión dimensional del operador de colisión (ver ecuación (2.1)).

Comenzaremos recordando algunas propiedades formales del operador de colisión $Q_u, u \in \mathbb{R}^d$:

Lema 3.1.1. *Para toda $u \in \mathbb{R}^d$ arbitraria, $f, g \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ y $\psi \in C^\infty([0, \infty))$,*

(i) $\psi(|\xi - u|)$ es un invariante de colisión de Q_u :

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q_u(f)(\xi) \psi(|\xi - u|) d\xi = 0, \quad (3.2)$$

(ii) Q_u es simétrico con respecto al producto escalar de $L^2(\mathbb{R}^d)$:

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q_u(f)g d\xi = - \int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q_u(f)Q_u(g) d\xi, \quad (3.3)$$

(iii) Q_u tiene la propiedad de monotonía:

$$a \leq f(\xi) \leq b \Rightarrow a \leq P_u(f) \leq b. \quad (3.4)$$

La mayor parte de las propiedades básicas del operador no lineal Q se obtienen como consecuencia de este resultado.

Lema 3.1.2. Para toda $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ arbitraria con $\rho_f > 0$ y para toda $\psi \in C^\infty([0, \infty))$, se verifica que:

(i) $\psi(|\xi - u_f|)$ y ξ son invariantes de colisión de Q :

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q(f)(\xi) \psi(|\xi - u_f|) d\xi = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q(f)(\xi) \xi d\xi = 0. \quad (3.5)$$

(ii) Teorema H:

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q(f)f d\xi = - \int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q(f)^2 d\xi \leq 0, \quad (3.6)$$

(iii) $Q(f) = 0$ si y solamente si existen $u \in \mathbb{R}^d$ y $F \in C^\infty([0, \infty))$ tales que $f(\xi) = F(|\xi - u|)$.

Nótese que los enunciados de los Lemas 3.1.1 y 3.1.2 pueden extenderse al caso de funciones menos regulares mediante argumentos de densidad estándar, siempre que las integrales involucradas estén bien definidas. Esta es precisamente la forma en que estos resultados serán utilizados de aquí en adelante.

A continuación presentamos los resultados fundamentales que demostraremos en este capítulo.

Teorema 3.1.3. (*Existencia de soluciones para el problema no lineal*) Sea

$$f_0 \in L^1(\mathbb{R}^{2d}) \cap L^\infty(\mathbb{R}^{2d})$$

una función no negativa que satisface que $E_{f_0} \in L^1(\mathbb{R}^d)$ y

$$\int_{\mathbb{R}^d} f_0(x - \xi t, \xi) d\xi \geq \gamma_{K,T} > 0, \quad x \in K, t \in [0, T], \quad (3.7)$$

para todo compacto $K \subset \mathbb{R}^d$ y $T > 0$. Entonces, existe una solución débil global no negativa

$$f \in L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}^{2d}) \cap L^\infty(\mathbb{R}^{2d}))$$

del problema (2.1)–(2.6). Para las densidades de masa, momento y energía definidas en (2.5) se verifica que

$$\rho_f, m_f, E_f \in L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}^d)). \quad (3.8)$$

Además, la velocidad media y la energía interna específica definidas en (2.6) satisfacen las propiedades

$$u_f \in L_{loc}^\infty([0, \infty); L_{loc}^2(\mathbb{R}^d)), \quad e_f \in L_{loc}^\infty([0, \infty); L_{loc}^1(\mathbb{R}^d)). \quad (3.9)$$

A modo de ejemplo y para mostrar que las condiciones del Teorema 3.1.3 no son vacías, destacamos que cualquier función $f_0 \in L^1(\mathbb{R}^{2d}) \cap L^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ continua y positiva satisface la hipótesis (3.7). En particular, un ejemplo explícito de dato inicial admisible lo constituye la función gaussiana

$$f_0(x, \xi) = \exp(-|x|^2 - |\xi|^2).$$

Teorema 3.1.4. (*Propagación de momentos*) Supongamos que el dato inicial f_0 satisface las hipótesis del Teorema 3.1.3 y que $(|\xi|^p + |x|^q)f_0 \in L^1(\mathbb{R}^{2d})$ con $1 \leq q \leq p$. Entonces, las soluciones del problema (2.1)–(2.6) dadas por el Teorema 3.1.3 satisfacen

$$(|\xi|^p + |x|^q)f \in L_{loc}^\infty([0, \infty); L^1(\mathbb{R}^{2d})).$$

Teorema 3.1.5. (*Leyes de conservación*) Supongamos que se verifican las hipótesis del Teorema 3.1.3. Entonces, las siguientes leyes de conservación son satisfechas por las soluciones f del problema (2.1)-(2.6):

$$\int_{\mathbb{R}_x^d} \begin{pmatrix} \rho_f \\ m_f \\ E_f \end{pmatrix} dx = \int_{\mathbb{R}_x^d} \begin{pmatrix} \rho_{f_0} \\ m_{f_0} \\ E_{f_0} \end{pmatrix} dx, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho_f \\ m_f \\ E_f \end{pmatrix} + \nabla_x \cdot \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f \begin{pmatrix} \xi \\ \xi \otimes \xi \\ \xi |\xi|^2 / 2 \end{pmatrix} d\xi = 0, \quad (3.11)$$

donde (3.11) ha de entenderse en el sentido de las distribuciones. También se verifica la siguiente relación para la disipación de entropía:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f^2 d\xi dx = -2 \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q(f)^2 d\xi dx. \quad (3.12)$$

Además, si $|x|^2 f_0 \in L^1(\mathbb{R}^{2d})$ tenemos que

$$\int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f |x - \xi t|^2 d\xi dx = \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f_0 |x|^2 d\xi dx. \quad (3.13)$$

La siguiente sección contiene una extensión de la definición del operador de colisión para argumentos no regulares, así como algunas propiedades de regularidad del mismo. La demostración del Teorema 3.1.3 se realiza en la Sección 3. Esta consiste en la construcción de una solución aproximada, diseñada de tal forma que podamos pasar al límite para obtener una solución del problema original. Para este fin, utilizaremos un argumento de compacidad basado en los lemas clásicos de promedios en velocidad (momentos de la función de distribución) de [50] y [49]. Estos resultados ya han sido ampliamente explotados en la literatura para tratar algunos problemas de existencia de soluciones para ecuaciones cinéticas no lineales, como por ejemplo en [41] para establecer la existencia global de soluciones de la ecuación de Boltzmann, en [85] y [55] para demostrar la existencia de soluciones de la ecuación BGK, o en [7] para probar la existencia de soluciones para las ecuaciones de transferencia radiactiva.

3.2 Propiedades del operador de colisión

Necesitaremos una definición de $Q_u(f)$ para funciones no regulares $u(x, t)$ y $f(x, \xi, t)$. En esta sección trataremos solamente con $P_u(f)$; sin embargo, todos los resultados se extienden trivialmente a $Q_u(f) = P_u(f) - f$.

Sea $u : \mathbb{R}^d \times (0, \infty) \mapsto \mathbb{R}^d$ una función boreliana con $|u| < \infty$ casi por doquier en $\mathbb{R}^d \times (0, \infty)$ y $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^{2d} \times (0, \infty))$. Entonces $P_u(f)(x, \xi, t)$ está definido por (2.4) para todo (x, t) con $|u(x, t)| < \infty$ y por $P_u(f)(x, \xi, t) = 0$ en otro caso. Una consecuencia inmediata de esta definición es el siguiente resultado:

Lema 3.2.1. *Sean $u, \tilde{u} : \mathbb{R}^d \times (0, \infty) \mapsto \mathbb{R}^d$ funciones borelianas que verifican $|u|, |\tilde{u}| < \infty$ y $u = \tilde{u}$ casi por doquier en $\mathbb{R}^d \times (0, \infty)$. Sea también $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^{2d} \times (0, \infty))$. Entonces $P_u(f) = P_{\tilde{u}}(f)$ casi por doquier en $\mathbb{R}^{2d} \times (0, \infty)$.*

Demostración.- Denotamos por $N \subset \mathbb{R}^d \times (0, \infty)$ al conjunto de medida cero en el que $u \neq \tilde{u}$. Entonces $P_u(f) \neq P_{\tilde{u}}(f)$ en un subconjunto de $\mathbb{R}^d \times N$ que es un conjunto de medida cero en $\mathbb{R}^{2d} \times (0, \infty)$.

Lema 3.2.2. *Bajo las hipótesis del lema anterior sobre u y f , $1 \leq p, q \leq \infty$ y $T > 0$, tenemos que*

$$\|P_u(f)\|_{L^q((0, T); L^p(\mathbb{R}^{2d}))} \leq \|f\|_{L^q((0, T); L^p(\mathbb{R}^{2d}))}.$$

Demostración.- La desigualdad $|P_u(f)|^p \leq P_u(|f|^p)$ se deduce fácilmente a partir de la desigualdad de Hölder para el caso $1 < p < \infty$ y es obvia para $p = 1, \infty$. Integrando con respecto a ξ obtenemos

$$\|P_u(f)(x, \cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \leq \|f(x, \cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^d)}, \quad (3.14)$$

y con ello el resultado que buscamos.

Como consecuencia del Lema 3.2.2, podemos considerar P_u como un operador lineal y acotado actuando sobre $L^q((0, T); L^p(\mathbb{R}^{2d}))$ para toda función boreliana u con $|u| < \infty$ casi por doquier en $\mathbb{R}^d \times (0, T)$. El último resultado de esta sección concierne a la estabilidad de $P_u(f)$ con respecto a u :

Lema 3.2.3. *Sea $f \in L^q((0, T); L^p(\mathbb{R}^{2d}))$ con $1 \leq p, q < \infty$, y supongamos que $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u$ en $L^1_{loc}(\mathbb{R}^d \times (0, T))^d$. Entonces*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_{u_n}(f) = P_u(f) \quad \text{en } L^q((0, T); L^p(\mathbb{R}^{2d})).$$

Demostración.- Utilizando el Lema 3.2.2 y un argumento de densidad, es suficiente hacer la demostración para funciones test $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^{2d} \times (0, T))$. Además, como para una tal función test tenemos que se verifica

$$\|P_{u_n}(f)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{2d} \times (0, T))} \leq \|f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{2d} \times (0, T))},$$

entonces basta con demostrar la convergencia en $L^1(\mathbb{R}^{2d} \times (0, T))$.

La dificultad principal de la demostración surge del hecho de que incluso para una función test, tanto f como $P_u(f)$ no tienen necesariamente soporte compacto si u es no acotada. En la estimación básica

$$|P_{u_n}(f)(x, \xi, t) - P_u(f)(x, \xi, t)| \leq c(f)|u_n(x, t) - u(x, t)| \quad (3.15)$$

(que es una consecuencia obvia del hecho de que f es Lipschitz continua) la constante $c(f)$ podría redefinirse como una función de (x, t) con soporte compacto, pero habría de ser en cualquier caso elegida independientemente de ξ en general. Por tanto, la desigualdad (3.15) no puede ser utilizada directamente para demostrar el lema.

Sea K un conjunto compacto en $\mathbb{R}^d \times (0, t)$ tal que $\text{sop}(f) \subset \mathbb{R}^d \times K$. Esto implica, obviamente, que

$$\text{sop}(P_{u_n}(f)), \text{sop}(P_u(f)) \subset \mathbb{R}^d \times K. \quad (3.16)$$

Además, por hipótesis, u_n converge hacia u en $L^1(K)$. Por consiguiente, podemos extraer una subsucesión (que denotaremos nuevamente por u_n) que converge hacia u casi por doquier en K . Entonces el teorema de Egoroff implica, para todo $\epsilon > 0$, la existencia de un conjunto $A_\epsilon \subset K$ con $\text{meas}(K \setminus A_\epsilon) \leq \epsilon$ tal que $u_n \rightarrow u$ uniformemente en A_ϵ . Introducimos también el conjunto

$$B_M = \{(x, t) \in K : |u(x, t)| < M\}.$$

Se puede observar fácilmente que

$$|K \setminus B_M| \leq \frac{1}{M} \|u\|_{L^1(K)}.$$

Por otro lado, la convergencia uniforme de u_n garantiza que

$$|u_n| < 2M \quad \text{en } A_\epsilon \cap B_M$$

para n suficientemente grande. Como consecuencia, existe un conjunto compacto $K_\xi \subset \mathbb{R}^d$ tal que

$$\text{sop}(P_{u_n}(f)(x, \cdot, t)), \text{sop}(P_u(f)(x, \cdot, t)) \subset K_\xi \quad (3.17)$$

para $(x, t) \in A_\epsilon \cap B_M$. Conforme a (3.16) tenemos que

$$\|P_{u_n}(f) - P_u(f)\|_{L^1(\mathbb{R}^{2d} \times (0, T))} = \int_{\mathbb{R}^d} \int_K |P_{u_n}(f) - P_u(f)| dt dx d\xi \leq \mathcal{A} + \mathcal{B} + \mathcal{C},$$

donde los tres términos del segundo miembro de la desigualdad corresponden a la descomposición $K = (A_\epsilon \cap B_M) \cup (K \setminus A_\epsilon) \cup (K \setminus B_M)$. Para la estimación de

$$\mathcal{A} = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{A_\epsilon \cap B_M} |P_{u_n}(f) - P_u(f)| dt dx d\xi$$

utilizamos (3.17) y (3.15):

$$\mathcal{A} \leq \int_{K_\xi} \int_{A_\epsilon \cap B_M} c(f) |u_n - u| dt dx d\xi \leq c_1(f) \|u_n - u\|_{L^1(K)}.$$

Para estimar

$$\mathcal{B} = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{K \setminus A_\epsilon} |P_{u_n}(f) - P_u(f)| dt dx d\xi$$

y

$$\mathcal{C} = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{K \setminus B_M} |P_{u_n}(f) - P_u(f)| dt dx d\xi$$

utilizamos (3.14):

$$\mathcal{B} \leq 2 \int_{\mathbb{R}^d} \int_{K \setminus A_\epsilon} |f| dt dx d\xi \leq c_2(f) \epsilon,$$

$$\mathcal{C} \leq 2 \int_{\mathbb{R}^d} \int_{K \setminus B_M} |f| dt dx d\xi \leq c_3(u, f) \frac{1}{M}.$$

Pasando al límite cuando $n \rightarrow \infty$ obtenemos

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \|P_{u_n}(f) - P_u(f)\|_{L^1(\mathbb{R}^{2d} \times (0, T))} \leq c_2(f) \epsilon + c_3(u, f) \frac{1}{M},$$

y con ello el resultado de convergencia que buscamos al hacer $\epsilon \rightarrow 0$ y $M \rightarrow \infty$.

Recordamos que u_n es una subsucesión de la sucesión original. A pesar de ello, la convergencia de la sucesión completa está garantizada a raíz de la unicidad del límite, que es una consecuencia del Lema 3.2.1.

3.3 El resultado de existencia

Comenzamos con la formulación de un problema que aproxima formalmente al problema (2.1)-(2.6). Para ello definimos, para cada $n \in \mathbb{N}$, la siguiente sucesión de velocidades truncadas:

$$\varphi_n(u)(x, t) = \begin{cases} u(x, t) & \text{si} \\ |u(x, t)| < n, |x| < n, \\ n \frac{u(x, t)}{|u(x, t)|} & \text{si } |u(x, t)| \geq n, |x| < n, \\ 0 & \text{si } |x| \geq n, \end{cases} \quad (3.18)$$

y consideramos la sucesión de problemas

$$\frac{\partial f^n}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^n = Q^n(f^n), \quad (3.19)$$

$$f^n(x, \xi, 0) = f_0(x, \xi), \quad (3.20)$$

como una aproximación de (2.1)-(2.6), donde

$$Q^n(f) = Q_{\varphi_n(u_f)}(f). \quad (3.21)$$

Mostraremos el siguiente resultado de existencia de soluciones:

Proposición 3.3.1. *(Existencia de una solución aproximada) Supongamos que el dato inicial f_0 satisface las hipótesis del Teorema 3.1.3. Entonces, para cada $n \in \mathbb{N}$ existe una solución débil no negativa*

$$f^n \in L^\infty((0, n); L^1(\mathbb{R}^{2d}) \cap L^\infty(\mathbb{R}^{2d}))$$

del problema (3.18)-(3.21) con $E_{f^n} \in L^\infty((0, n); L^1(\mathbb{R}^d))$. Además, las cotas para f^n y E_{f^n} en los espacios respectivos son independientes de n .

La demostración se centra en un argumento de punto fijo basado en la resolución de una familia de problemas linealizados. Por ello, probaremos en primer lugar un resultado preliminar de existencia de soluciones para el correspondiente problema lineal con función de velocidad dada en el operador de proyección:

Proposición 3.3.2. (*Existencia y unicidad de solución para el problema lineal*) Supongamos que la condición inicial f_0 satisface las hipótesis del Teorema 3.1.3 y sea $u \in L^\infty(\mathbb{R}^d \times (0, \infty))^d$ con $\|u\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d \times (0, \infty))} = M$. Entonces, el problema

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f = Q_u(f), \quad (3.22)$$

$$f(x, \xi, 0) = f_0(x, \xi), \quad (3.23)$$

tiene una única solución no negativa

$$f \in L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}^{2d}) \cap L^\infty(\mathbb{R}^{2d}))$$

que verifica

$$\|f(\cdot, \cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}^{2d})} = \|f_0\|_{L^1(\mathbb{R}^{2d})}, \quad \|f(\cdot, \cdot, t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{2d})} = \|f_0\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{2d})}. \quad (3.24)$$

Además, $E_f \in L_{loc}^\infty([0, \infty); L^1(\mathbb{R}^d))$ y $u_f \in L_{loc}^\infty([0, \infty); L_{loc}^2(\mathbb{R}^d))$. Las cotas para E_f y u_f en los respectivos espacios sólo dependen de f_0 y M .

Demostración.- La existencia y unicidad de solución puede comprobarse a partir de un argumento simple de punto fijo de tipo contractivo, usando el Lema 3.2.2. Sea $\lambda > 0$ un parámetro fijo; entonces, haciendo el cambio de función incógnita $g = e^{-\lambda t} f$, resulta claro que f es una solución del problema (3.22)–(3.23) si y solamente si g es una solución del problema

$$\frac{\partial g}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) g + (\lambda + 1)g = e^{-\lambda t} P_u(e^{\lambda t} g), \quad (3.25)$$

$$g(x, \xi, 0) = f_0(x, \xi), \quad (3.26)$$

en un espacio de funciones adecuado, por ejemplo $L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}^{2d}))$. Consideremos el siguiente problema para una función fija g :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) h + (\lambda + 1)h = e^{-\lambda t} P_u(e^{\lambda t} g), \quad (3.27)$$

$$h(x, \xi, 0) = f_0(x, \xi). \quad (3.28)$$

Denotamos por T_λ a la aplicación $g \mapsto h$. Entonces, multiplicando la ecuación (3.27) por la función $\text{sgn}(T_\lambda(g_1 - g_2))$, integrando sobre el espacio de fases y recurriendo al siguiente argumento estándar de regularización de la función signo:

$$G \in C^\infty, \quad G(x) = |x| \quad \forall |x| \geq 1,$$

$$\begin{aligned}
G_\delta(x) &= \delta G\left(\frac{x-k}{\delta}\right) = |x-k| \text{ si } |x-k| \geq \delta, \\
G_\epsilon(x) &\rightarrow |x-k| \text{ cuando } \delta \rightarrow 0, \\
G'_\delta(x) &= \frac{x-k}{|x-k|} \text{ si } |x-k| \geq \delta, \\
G'_\delta(x) &\rightarrow \operatorname{sgn}(x-k) \text{ cuando } \delta \rightarrow 0,
\end{aligned}$$

tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \|T_\lambda(g_1 - g_2)\|_{L^1(\mathbb{R}^{2d})} + (\lambda + 1) \|T_\lambda(g_1 - g_2)\|_{L^1(\mathbb{R}^{2d})} \leq \|g_1 - g_2\|_{L^1(\mathbb{R}^{2d})},$$

donde hemos utilizado el Lema 3.1.1 (ii) y (iii). Por tanto, tras algunos cálculos sencillos llegamos a que

$$\|T_\lambda(g_1 - g_2)\|_{L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}^{2d}))} \leq \frac{1}{\lambda + 1} \|g_1 - g_2\|_{L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}^{2d}))},$$

de donde se deduce que T_λ es una aplicación estrictamente contractiva en el espacio $L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}^{2d}))$ para todo $\lambda > 0$, lo cual acaba por demostrar la existencia y unicidad de solución del problema (3.22)–(3.23) en $L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}^{2d}))$.

Las desigualdades

$$0 \leq f(x, \xi, t) \leq \|f_0\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{2d})}$$

se deducen por medio de un argumento iterativo estándar a partir de la no negatividad de f_0 y de la propiedad de monotonía de P_u establecida en (3.4). La propiedad de conservación de masa enunciada en (3.24) se obtiene al integrar la ecuación (3.22) con respecto a ξ, x y t . Para demostrar la propiedad de acotación de E_f utilizaremos la identidad

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q_u(f) |\xi|^2 d\xi = 2u \cdot (\rho_f u - m_f),$$

que se deduce a partir del Lema 3.1.1. Multiplicando formalmente la ecuación (3.22) por $|\xi|^2/2$ e integrando con respecto a x y ξ , obtenemos que

$$\frac{d}{dt} \|E_f\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} = \int_{\mathbb{R}_x^d} u \cdot (\rho_f u - m_f) dx \leq c(c + \sqrt{2\|E_f\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}})$$

con

$$c = M \|f_0\|_{L^1(\mathbb{R}^{2d})}^{1/2},$$

de donde se tiene que

$$\|m_f\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}^2 \leq 2\|\rho_f\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}\|E_f\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \quad (3.29)$$

a partir de la desigualdad de Cauchy-Schwartz. Entonces, la afirmación referente a E_f en el enunciado de la proposición se obtiene como consecuencia del lema de Gronwall.

Atendiendo a (3.29), para comprobar que u_f está bien definida sólo necesitamos una cota inferior para la densidad ρ_f . Para encontrarla usaremos la siguiente representación integral equivalente del problema (3.22)–(3.23), dada por el principio de Duhammel:

$$f(x, \xi, t) = e^{-t}f_0(x - \xi t, \xi) + \int_0^t e^{s-t}P_u(f)(x - \xi(t-s), \xi, s) ds. \quad (3.30)$$

Entonces, gracias a (3.30) y a la hipótesis (3.7) se concluye que

$$\rho_f(x, t) \geq e^{-T}\gamma_{K,T} > 0, \quad x \in K, 0 \leq t \leq T, \quad (3.31)$$

para todo compacto $K \in \mathbb{R}^d$ y para todo $T > 0$.

Finalmente, combinando las estimaciones (3.29) y (3.31) llegamos a que u_f pertenece a $L_{loc}^\infty([0, \infty); L_{loc}^1(\mathbb{R}^d))$. El resultado (más fuerte) sobre u_f anunciado en la Proposición 3.3.2 se desprende de la versión local (en x) de (3.29):

$$\rho_f|u_f|^2 \leq 2E_f,$$

la cota de E_f y (3.31).

El siguiente paso es estudiar la solución del problema aproximado (3.18)–(3.21).

Demostración de la Proposición 3.3.1.— En primer lugar daremos la prueba de existencia de soluciones. Para cada $n \in \mathbb{N}$ fijo, introducimos el conjunto

$$\mathcal{S}_n = \{u \in L^1(B_n \times (0, n))^d : |u| \leq n \text{ c.p.d. en } B_n \times (0, n)\},$$

con $B_n = \{x \in \mathbb{R}^d : |x| < n\}$. Entonces \mathcal{S}_n es un subconjunto convexo, cerrado y acotado de $L^1(B_n \times (0, n))^d$. Si asumimos extensión por cero para el caso en que $x \notin B_n$, todo elemento de \mathcal{S}_n puede ser considerado también como un elemento de $L^1(B_n \times (0, n))^d$. Con este criterio, el operador φ_n definido por (3.18) aplica campos de velocidad medibles arbitrarios definidos sobre $\mathbb{R}^d \times (0, n)$ en \mathcal{S}_n .

Definimos ahora un operador $T_1 : \mathcal{S}_n \rightarrow L^1(B_n \times (0, n))^d$ de la siguiente forma: para $u \in \mathcal{S}_n$ dada (extendida a $\mathbb{R}^d \times (0, n)$), denotemos por f a la solución del problema (3.22)–(3.23), y sea $T_1(u)$ la restricción de u_f a $B_n \times (0, n)$. Definimos entonces un operador de punto fijo $T : \mathcal{S}_n \rightarrow \mathcal{S}_n$ de la forma $T(u) = \varphi_n(T_1(u))$. Obviamente, los puntos fijos de T corresponden a soluciones del problema (3.18)–(3.21). Como $\varphi_n : L^1(B_n \times (0, n))^d \rightarrow \mathcal{S}_n$ es continua, podremos aplicar el teorema de punto fijo de Schauder a T toda vez que consigamos demostrar continuidad y compacidad del operador T_1 .

En primer lugar demostraremos la propiedad de compacidad. Para $u \in \mathcal{S}_n$, como consecuencia de la acotación de la solución f del problema (3.22)–(3.23) en $L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}^{2d}) \cap L^\infty(\mathbb{R}^{2d}))$, tenemos que f también está acotada en $L^2(\mathbb{R}^{2d} \times (0, n))$. Como Q_u es un operador acotado en este espacio, se sigue que

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f \in L^2(\mathbb{R}^{2d} \times (0, n)).$$

Por consiguiente, podemos aplicar un lema de momentos (ver Apéndice) y obtenemos que

$$\int_{K_\xi} f |\xi|^r d\xi \in H^{1/2}(\mathbb{R}^d \times (0, n))$$

para todo compacto $K_\xi \subset \mathbb{R}^d$. La acotación uniforme de E_f en $L^1(B_n \times (0, n))$ (ver Proposición 3.3.2) implica que $\int_{\mathbb{R}^d} f |\xi|^r d\xi$ es compacta en $L^1(B_n \times (0, n))$ para $0 \leq r < 2$. Por tanto, la aplicación que lleva $u \in \mathcal{S}_n$ en $\rho_f, m_f \in L^1(B_n \times (0, n))$ es compacta. Finalmente, la cota inferior

$$\rho_f \geq e^{-n} \gamma_{B_n, n} > 0 \quad \text{en } B_n \times (0, n)$$

implica la compacidad de T_1 .

Para comprobar su continuidad, consideremos una sucesión $u_k \in \mathcal{S}_n$ que converge hacia $u \in \mathcal{S}_n$ cuando $k \rightarrow \infty$. Denotamos por f_k y f a las únicas soluciones del problema lineal (3.22)–(3.23) asociado, respectivamente, a u_k y a u . El resultado de acotación uniforme de la Proposición 3.3.2 implica la convergencia de una subsucesión de f_k hacia \tilde{f} en $L^\infty(\mathbb{R}^{2d} \times (0, \infty))$ débil- \star . El resultado de continuidad del Lema 3.2.3 implica, por su parte, que podemos pasar al límite en el problema lineal (3.22)–(3.23) en el sentido de las distribuciones. Como consecuencia de la unicidad de solución del problema lineal tenemos que $\tilde{f} = f$ y, por tanto, la convergencia de la sucesión completa f_k . Utilizando ahora el lema de momentos y la acotación inferior de ρ_{f_k} deducida anteriormente podemos pasar al límite

cuando $k \rightarrow \infty$ en $u_{f_k} = m_{f_k}/\rho_{f_k}$, lo cual completa la prueba de continuidad para T_1 . Finalmente, la aplicación del teorema de punto fijo de Schauder establece el resultado de existencia de soluciones anunciado.

El último punto a demostrar es la acotación de E_{f_n} . Para ello procedemos como en la demostración de la Proposición 3.3.2 e integramos el producto de (3.19) por $|\xi|^2/2$ con respecto a ξ y a x :

$$\frac{d}{dt} \|E_{f_n}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} = \int_{\mathbb{R}^d} \varphi_n(u_{f_n}) \cdot (\rho_{f_n} \varphi_n(u_{f_n}) - m_{f_n}) dx.$$

Observando que $\varphi_n(u)(x, t) = \theta(x, t)u(x, t)$ con $0 \leq \theta \leq 1$ se deduce fácilmente que el segundo miembro de esta igualdad es no positivo, con lo que se completa la demostración.

Ya estamos en condiciones de demostrar el teorema fundamental de este capítulo acerca de existencia de soluciones para el problema no lineal.

Demostración del Teorema 3.1.3.- Llevaremos a cabo el paso al límite cuando $n \rightarrow \infty$ en el problema aproximado (3.19)–(3.20). Extendiendo f^n por cero para $t \in [n, \infty)$, la Proposición 3.3.1 implica que existe una subsucesión de f^n que converge débilmente hacia una función límite f en $L^q_{loc}((0, \infty); L^p(\mathbb{R}^{2d}))$ para todo $1 < p, q < \infty$. Como en la demostración anterior, podemos aplicar un lema de momentos para probar la convergencia (salvo la extracción de una subsucesión) de $u_n := u_{f^n}$ hacia u_f en $A_\epsilon \subset K$ tal que $|K \setminus A_\epsilon| \leq \epsilon$. Utilizaremos también el conjunto

$$B_M = \{(x, t) \in K : |u_f(x, t)| < M\},$$

como en la demostración del Lema 3.2.3. Entonces

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{A_\epsilon \cap B_M} |\varphi_n(u_n) - u_f| dt dx = 0,$$

ya que $\varphi_n(u_n) = u_n$ en $A_\epsilon \cap B_M$ para n suficientemente grande. Por otro lado,

$$\begin{aligned} \int_{K \setminus (A_\epsilon \cap B_M)} |\varphi_n(u_n) - u_f| dt dx &\leq \int_{K \setminus (A_\epsilon \cap B_M)} (|u_n| + |u_f|) dt dx \\ &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} 2 \int_{K \setminus (A_\epsilon \cap B_M)} |u_f| dt dx \xrightarrow{M \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0} 0, \end{aligned}$$

lo cual implica la convergencia de $\varphi_n(u_n)$ hacia u_f en $L^1_{loc}(\mathbb{R}^d \times (0, T))$.

Por tanto, a través de los resultados de continuidad establecidos en los Lemas 3.2.2 y 3.2.3 podemos pasar al límite en el problema (3.19)–(3.20) en el sentido

de las distribuciones. Las cotas para los momentos y para la velocidad media se obtienen tras pasar al límite en las desigualdades correspondientes para el problema aproximado.

3.4 Propagación de momentos y leyes de conservación

Para las demostraciones de los Teoremas 3.1.4 y 3.1.5 necesitaremos el siguiente resultado técnico:

Lema 3.4.1. *Para todo $p \geq 1$ y para toda función no negativa f con $(1 + |\xi|^p)f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, $\rho_f > 0$, tenemos que*

- (i) $\rho_f |u_f|^p \leq \int_{\mathbb{R}^d} f |\xi|^p d\xi$,
- (ii) $\int_{\mathbb{R}^d} P_{u_f}(f) |\xi|^p d\xi \leq C_p \int_{\mathbb{R}^d} f |\xi|^p d\xi$,

donde C_p es una constante positiva que sólo depende de p .

Demostración.- (i) La desigualdad de Hölder para la medida $f d\xi$ proporciona la siguiente relación:

$$\rho_f |u_f| \leq \int_{\mathbb{R}^d} f |\xi| d\xi \leq \rho_f^{1/p'} \left(\int_{\mathbb{R}^d} f |\xi|^p d\xi \right)^{1/p} ,$$

que es equivalente al resultado anunciado (p' es el exponente conjugado de p).

(ii) En lo que sigue, C denotará diversas constantes que sólo dependen de p . Si $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ con $\rho_f > 0$, tenemos que

$$|\xi|^p \leq C(|\xi - u_f|^p + |u_f|^p) ,$$

que implica

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} P_u(f) |\xi|^p d\xi &\leq C \left(\int_{\mathbb{R}^d} f |\xi - u_f|^p d\xi + \rho_f |u_f|^p \right) \\ &\leq C \left(\int_{\mathbb{R}^d} f |\xi|^p d\xi + \rho_f |u_f|^p \right) . \end{aligned}$$

Para ello ha sido aplicada la propiedad de conservación (3.2), lo cual está justificado ya que f es regular y tiene soporte compacto. La demostración concluye con una sencilla aplicación de (i).

Ahora ya puede enunciarse con rigor la afirmación de que $1, \xi, |\xi|^2$ son invariantes de colisión de Q :

Corolario 3.4.2. *Si f es una solución del problema (2.1)–(2.6) como la dada en el Teorema 3.1.3, tenemos que*

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} Q(f) \begin{pmatrix} 1 \\ \xi \\ |\xi|^2 \end{pmatrix} d\xi = 0.$$

Con la ayuda del Lema 3.4.1 probaremos la acotación de los momentos de orden superior:

Demostración del Teorema 3.1.4.- Presentamos una demostración formal que puede completarse mediante una regularización adecuada. Definimos $g = (1 + |x|^q + |\xi|^p)f$. Entonces tenemos que g es una solución de la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial g}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)g + g = S = q(\xi \cdot x)|x|^{q-2}f + (1 + |x|^q + |\xi|^p)P_{u_f}(f). \quad (3.32)$$

Con la desigualdad

$$|\xi \cdot x||x|^{q-2} \leq |\xi||x|^{q-1} \leq \frac{|\xi|^q}{q} + \frac{|x|^q}{q'}$$

(donde q' es el exponente conjugado de q) y con el Lema 3.4.1 obtenemos

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} |S| d\xi \leq C \int_{\mathbb{R}_\xi^d} g d\xi.$$

Finalmente, integrando (3.32) con respecto a ξ y x llegamos a que

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} g d\xi dx \leq C \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} g d\xi dx,$$

de forma que una aplicación del lema de Gronwall sirve para completar la demostración.

Demostración del Teorema 3.1.5.- Concentrémonos en la conservación de la energía. Las otras leyes de conservación se obtendrán de forma análoga. En la formulación débil de (2.1)–(2.2),

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) \Phi + Q_{u_f}(\Phi) \right) d\xi dx dt = \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f_0 \Phi(t=0) d\xi dx$$

introducimos la familia de funciones test $\Phi(x, \xi, t) = |\xi|^2 \varphi(x/R) \varphi(\xi/V) \theta(t)$ con $\theta \in C_0^\infty([0, \infty))$ y $\varphi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$, $\varphi(y) = 1$ en la bola $|y| \leq 1$. Las cotas del Teorema 3.1.3 justifican el paso al límite cuando $R \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} (f |\xi|^2 \varphi(\xi/V) \theta'(t) + Q(f) |\xi|^2 \varphi(\xi/V) \theta(t)) d\xi dx dt \\ &= \theta(0) \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} f_0 |\xi|^2 \varphi(\xi/V) d\xi dx. \end{aligned}$$

En el siguiente límite $V \rightarrow \infty$ el segundo término del primer miembro se anula por el Corolario 3.4.2, de lo que se desprende la conservación de la energía total (3.10). Destacamos que, como consecuencia del Lema (de dispersión) 7.0.3 (ver Apéndice), tenemos:

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} f \xi |\xi|^2 d\xi \in L_{loc}^1(\mathbb{R}^d \times [0, \infty)).$$

Eligiendo ahora una función test de la forma $\Phi(x, \xi, t) = |\xi|^2 \varphi(\xi/V) \eta(x, t)$ con $\eta \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d \times [0, \infty))$ y haciendo $V \rightarrow \infty$, obtenemos la versión local de la conservación de energía.

Para probar el resultado de disipación de entropía (3.12) señalamos que $f \in L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_\xi^d))$. Con la ayuda del Lema 3.2.2, esto es suficiente para demostrar que el Teorema H enunciado en (3.6) se verifica. Multiplicamos ahora la ecuación de transporte (2.1) por $2f$. Como f y $\partial_t f + (\xi \cdot \nabla_x) f$ pertenecen a $L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_\xi^d))$, obtenemos que

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f \right) 2f = \frac{\partial f^2}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f^2.$$

Esto se puede justificar fácilmente utilizando, por ejemplo, un producto de convolución por una aproximación de la unidad y el lema de Friedrichs (ver [5] y la noción de solución renormalizada en [42]). Si ahora integramos con respecto a ξ y x obtenemos (3.12). Finalmente, (3.13) es una consecuencia de la identidad

$$|x - \xi t|^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f \right) = \frac{\partial}{\partial t} (|x - \xi t|^2 f) + (\xi \cdot \nabla_x) (|x - \xi t|^2 f)$$

y del hecho de que $|x - \xi t|^2 = |x|^2 - 2t(x \cdot \xi) + t^2|\xi|^2$ es un invariante de colisión de Q .

Capítulo 4

Análisis de un modelo cuántico disipativo de tipo Fokker-Planck: aproximación de Wigner

4.1 Introducción

En este capítulo estudiamos una clase de modelos cuánticos de carácter disipativo que surgen cuando consideramos el movimiento de un conjunto de partículas cuánticas (por ejemplo, electrones) que interactúan con un baño térmico de osciladores en equilibrio (por ejemplo, fonones), lo cual obliga a que los efectos de las correlaciones entre el sistema y su entorno hayan de ser tenidos en cuenta. Esta clase de modelos disipativos queda completamente determinada cuando asumimos que el núcleo de interacción entre las partículas está descrito por términos de dispersión de tipo Fokker-Planck. A su vez, estos modelos están representados típicamente a nivel cinético por un problema de valores iniciales para la función de cuasi-probabilidad de Wigner, cuya forma más general es la siguiente:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W + \theta_{\hbar}[V]W = L_{QFP}W, \quad x, \xi \in \mathbb{R}^3, t > 0, \quad (4.1)$$

$$W(x, \xi, t = 0) = W^I(x, \xi). \quad (4.2)$$

En particular, analizaremos el caso en que el potencial V es el potencial electrostático (coulombiano) de Hartree:

$$V(x, t) = \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{n(y, t)}{|x - y|} dy, \quad (4.3)$$

donde $\gamma = +1$ ó $\gamma = -1$ en función del tipo de fuerzas que actúan sobre el sistema (repulsivas o atractivas), y donde $n(x, t)$ denota la densidad de posición de las

partículas:

$$n(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} W(x, \xi, t) d\xi. \quad (4.4)$$

En este modelo, el carácter no lineal de la ecuación de Wigner-Fokker-Planck (4.1) procede de la acción autoconsistente del potencial (4.3) sobre el sistema a través del operador pseudo-diferencial

$$\begin{aligned} \theta_{\hbar}[V]W(x, \xi, t) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{V(x + \frac{\hbar}{2m}\eta, t) - V(x - \frac{\hbar}{2m}\eta, t)}{\hbar} \\ &\times W(x, \xi', t) e^{-i(\xi - \xi') \cdot \eta} d\xi' d\eta, \end{aligned} \quad (4.5)$$

donde \hbar denota la constante de Planck y m la masa efectiva de las partículas, mientras que L_{QFP} simboliza el operador cuántico de Fokker-Planck

$$L_{QFP}W = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_{\xi} W + 2\lambda \operatorname{div}_{\xi}(\xi W) - 2\frac{D_{pq}}{m} \operatorname{div}_x(\nabla_{\xi} W) + D_{qq} \Delta_x W.$$

En esta expresión $\lambda, D_{pp}, D_{pq}, D_{qq}$ son constantes positivas relacionadas con las interacciones entre las partículas y el baño térmico (ver siguiente sección).

El modelo cuántico anteriormente descrito con operador de colisión de tipo Fokker-Planck gobierna la evolución dinámica de un conjunto de electrones, en la aproximación de Hartree para una partícula simple, que interactúan de forma disipativa con un baño térmico idealizado consistente en un conjunto de osciladores armónicos (ver [20]). Este sistema se ajusta generalmente al marco de los sistemas mecano-cuánticos abiertos (es decir, aquellos que intercambian materia con su entorno), presentes en una amplia variedad de situaciones en Mecánica Estadística Cuántica donde la interacción partícula-oscilador es importante (ver, por ejemplo, [46] y [30]).

Los fenómenos disipativos desempeñan un papel relevante en microelectrónica, especialmente en lo que concierne al modelado de transporte de carga en dispositivos electrónicos semiconductores. Otros campos de aplicación significativos los constituyen la óptica cuántica, el movimiento browniano cuántico y el efecto túnel cuántico disipativo entre otros, así como una enorme variedad de problemas tecnológicos basados en sistemas que representan procesos de transporte que operan fuera de equilibrio.

El análisis matemático riguroso de modelos cuánticos de tipo Fokker-Planck en la representación de Wigner (desarrollada en el espacio de fases) será llevado

a cabo en este capítulo para el caso más simple descrito por la aproximación markoviana en el límite de altas temperaturas (para la cual $D_{qq} = D_{pq} = 0$) y sin fricción ($\lambda = 0$). Discutiremos también brevemente las diferencias fundamentales existentes entre el análisis de este modelo y el del modelo general con fricción, que podría incluso resultar matemáticamente más simple que el anterior, como señalaremos más tarde. Si denotamos por $\sigma = \frac{D_{pp}}{m^2}$, entonces el sistema a estudiar en este capítulo es

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W + \theta_{\hbar}[V]W - \sigma \Delta_{\xi}W = 0 \quad (4.6)$$

con condición inicial dada por (4.2), donde el operador pseudo-diferencial $\theta_{\hbar}[V]$ está definido por (4.5) y $V(x, t)$ es el potencial coulombiano autoconsistente (4.3) (que resuelve la ecuación de Poisson $\Delta_x V = -\gamma n$). De ahora en adelante nos referiremos a este problema como “sistema de Wigner–Poisson–Fokker–Planck” (WPFPP). En [38] se indica cómo este modelo proporciona una ecuación matemáticamente “consistente” (es decir, una ecuación que preserva la positividad al nivel de matrices de densidad), aunque no tiene en cuenta el efecto producido por la disipación de energía del conjunto de electrones por el medio. A pesar de ello, los modelos sin fricción constituyen los únicos modelos cuánticos de tipo Fokker–Planck físicamente relevantes que hacen que la entropía cuántica crezca (ver siguiente sección).

En [39], L. Diósi describió la aproximación markoviana sistemática más simple con disipación de energía, consistente en la ecuación (4.1) habiendo eliminado el término $\frac{D_{pq}}{m} \text{div}_x(\nabla_{\xi}W)$. Esto quiere decir que el modelo con fricción incluye un término elíptico con respecto a la variable de posición, a saber, $D_{qq}\Delta_x W$. Al hacer $D_{pq} = D_{qq} = 0$ se obtiene el modelo de Caldeira–Leggett (ver [20]) que no pertenece a la clase de Lindblad (ver [72]), por lo que no puede garantizarse la positividad del operador matriz de densidad. En la siguiente sección mostraremos con más detalle cómo la forma de Lindblad de la ecuación de evolución para la matriz de densidad proporciona las propiedades necesarias para asegurar que el sistema está bien planteado (es decir, que la carga total y la densidad y entropía cuánticas asociadas al sistema están bien definidas, y que el problema es matemáticamente “consistente”). Por consiguiente, el análisis matemático del problema de WPFPP sin fricción alcanza una mayor complejidad debido a la falta de regularización elíptica *a priori* en la variable x .

La técnica estándar que utilizaremos para demostrar la existencia de soluciones débiles se basa en la construcción de una sucesión de problemas aproximados cu-

yas soluciones han de verificar ciertas cotas (independientes de la regularización) apropiadas para pasar al límite en el parámetro de aproximación. Esencialmente, estas cotas son obtenidas a partir de la regularización de la densidad de partículas inicial, que implica también la correspondiente regularización elíptica del potencial por medio de la ecuación de Poisson. Para ello, nos valdremos de una representación equivalente del problema en términos de la función de Green asociada al sistema de WFPF, que proporciona una ecuación integral no lineal de punto fijo sobre la que obtendremos las estimaciones *a priori* de las soluciones. La prueba de unicidad (respectivamente de estabilidad) se deduce de forma directa estimando la diferencia de dos soluciones distintas con dato inicial nulo (respectivamente la diferencia de dos soluciones distintas correspondientes a un dato inicial y una perturbación pequeña del mismo) en una norma adecuada. Por otro lado, mientras que para probar la existencia de soluciones locales (en tiempo) basta con controlar uniformemente la norma L^p de determinados promedios de densidad (con respecto a la variable de posición x) para obtener cotas para la densidad de partículas original, la prueba de existencia de soluciones globales (definidas en $[0, \infty)$) requiere la acotación de algún momento de $W(x, \xi, t)$ para todo tiempo. En particular, demostraremos que la energía cinética y el momento de inercia del sistema son cantidades finitas. Finalmente, la aplicación del teorema de compacidad de Ascoli-Arzelá generalizado nos permite pasar al límite en el caso de soluciones globales. Por otra parte, el análisis del comportamiento asintótico de las soluciones se fundamenta en una técnica no lineal que consiste en la introducción de un grupo de escala en la ecuación de WFPF (y, por tanto, de una sucesión de problemas reescalados), la obtención de las propiedades de compacidad necesarias sobre las soluciones y los potenciales reescalados para pasar al límite en el parámetro de escala (relacionado en cierto sentido con la variable temporal, como veremos más tarde) y, por último, la identificación del límite $t \rightarrow \infty$.

Entre los logros obtenidos cabe destacar, por un lado, una cota (inusual) de la función de Wigner $W(x, \xi, t)$ en $L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ uniformemente localmente en tiempo, bajo hipótesis muy débiles sobre el dato inicial. Por otro lado, deducimos también fuertes propiedades de regularidad para la distribución de partículas, la densidad y el potencial, así como algunas estimaciones óptimas de caída en tiempo. Sin embargo, no podemos extender estas propiedades (al menos con nuestras técnicas) para todo $t \in \mathbb{R}^+$, excepto si suponemos que el dato inicial es "suficientemente pequeño" (en un sentido que especificaremos más adelante). Demostramos también un resultado de existencia global en tiempo a través del control de la energía cinética y el momento de inercia del sistema a lo largo de la evolución. Finalmente,

demostramos que la solución del problema de WFP se comporta como QG para tiempos grandes, donde

$$Q = \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W^I d\xi dx$$

denota la carga total del sistema y G es la solución fundamental de la ecuación cinética de Fokker–Planck lineal (con $V \equiv 0$). Por tanto, los efectos cuánticos del sistema parecen perderse en el límite de tiempos grandes $t \rightarrow \infty$.

Comenzamos presentando los modelos de Wigner–Fokker–Planck en el contexto de sistemas mecano–cuánticos abiertos y señalando su relación con los sistemas completamente positivos y disipativos en forma de Lindblad.

4.2 Modelos de Wigner–Fokker–Planck

4.2.1 Algunos aspectos sobre la derivación de modelos cuánticos de tipo Fokker–Planck

Consideramos el movimiento de un electrón en \mathbb{R}^d (o de un conjunto de electrones en la aproximación de partícula simple) bajo la influencia de un potencial eléctrico $V = V(x, t) : \mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_t^+ \rightarrow \mathbb{R}$, sometido a las interacciones con un baño térmico de osciladores armónicos en equilibrio. En particular nos ocuparemos de una extensión de la llamada ecuación maestra de Caldeira–Leggett (ver [20]) para el caso de temperaturas moderadas/altas, como la obtenida en [38]. Denotamos por

$$R(t) : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d) \quad (4.7)$$

al operador matriz de densidad del electrón (o del conjunto de electrones) en el instante $t \geq 0$, esto es, un operador lineal, no negativo, autoadjunto y de clase traza ($\text{tr}|R(t)| < \infty$), y por $\rho = \rho(x, y, t) \in L^2(\mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_y^d)$ a su núcleo integral, la función matriz de densidad:

$$(R(t)f)(x) = \int_{\mathbb{R}_y^d} f(y)\rho(x, y, t) dy. \quad (4.8)$$

El modelo que describe el movimiento del electrón es

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}(H_x - H_y)\rho - \lambda(x - y) \cdot (\nabla_x - \nabla_y)\rho$$

$$+ \left(D_{qq} |\nabla_x + \nabla_y|^2 - \frac{D_{pp}}{\hbar^2} |x - y|^2 + \frac{2i}{\hbar} D_{pq} (x - y) \cdot (\nabla_x + \nabla_y) \right) \rho, \quad (4.9)$$

donde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + V(x, t) \quad (4.10)$$

es el hamiltoniano del electrón (H_x, H_y representan copias de H actuando sobre las variables x e y , respectivamente), m es la masa efectiva del electrón, \hbar la constante de Planck reducida y, como establecimos anteriormente, V es el potencial eléctrico (o de Hartree). Las constantes positivas $\lambda, D_{pp}, D_{pq}, D_{qq}$ proceden del baño de osciladores (ver [38]):

$$\lambda = \frac{\eta}{2m}, \quad D_{pp} = \eta k_B T, \quad D_{qq} = \frac{\eta \hbar^2}{12m^2 k_B T}, \quad D_{pq} = \frac{\eta \Omega \hbar^2}{12\pi m k_B T}. \quad (4.11)$$

En estas fórmulas, $\eta > 0$ es la constante de acoplamiento (o amortiguamiento) del baño, k_B la constante de Boltzmann, T la temperatura del baño y Ω la frecuencia de los osciladores del medio.

El sistema (4.9)–(4.11) fue derivado en [38] como la aproximación markoviana de la evolución (originalmente no markoviana) del electrón en el baño de osciladores. Esta última se obtiene a partir del modelo completo electrón-oscilador al eliminar (tomando trazas) las coordenadas del oscilador. Referimos a [34] para una derivación algo más fenomenológica.

Las condiciones sobre los parámetros que garantizan la validez de (4.9) pueden encontrarse en [38]. Aquí sólo señalamos que las hipótesis fundamentales son:

- (i) el tiempo de memoria del medio (baño de osciladores) $\frac{1}{\Omega}$ es mucho más pequeño que la escala de tiempo característica de los electrones,
- (ii) acoplamiento débil: $\lambda \ll \Omega$,
- (iii) temperaturas medias/altas: $\Omega \lesssim k_B T / \hbar$.

Introducimos ahora la función de Wigner del conjunto de electrones, definida en el espacio de fases $\mathbf{R}_x^d \times \mathbf{R}_\xi^d$ para $t \geq 0$ como

$$W(x, \xi, t) := \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbf{R}_\eta^d} \rho\left(x + \frac{\hbar}{2m} \eta, x - \frac{\hbar}{2m} \eta, t\right) e^{-i\eta \cdot \xi} d\eta \in L^2(\mathbf{R}_x^d \times \mathbf{R}_\xi^d) \quad (4.12)$$

(ver, por ejemplo, [99], [77], [78], [47], [73], [80]). Observamos que el hecho de que $R(t)$ sea un operador autoadjunto implica que $\rho(x, y, t) = \bar{\rho}(y, x, t)$, que a su vez implica que W toma valores reales.

A partir de (4.9) obtenemos la siguiente ecuación cinética para W :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W + \theta_{\hbar}[V]W = L_{QFP}W, \quad (x, \xi) \in \mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_\xi^d, \quad t > 0, \quad (4.13)$$

donde $\theta_{\hbar}[V]$ es el operador pseudo–diferencial

$$\theta_{\hbar}[V]f(x, \xi, t) = \frac{i}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}_\eta^d} (\delta V)(x, \eta, t) \mathcal{F}_{\xi' \rightarrow \eta} f(\eta) e^{-i\xi \cdot \eta} d\eta \quad (4.14)$$

con símbolo

$$(\delta V)(x, \eta, t) = \frac{V(x + \frac{\hbar}{2m}\eta, t) - V(x - \frac{\hbar}{2m}\eta, t)}{\hbar},$$

y L_{QFP} es el operador cuántico de Fokker–Planck:

$$L_{QFP}W = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi W + 2\gamma \operatorname{div}_\xi(\xi W) + 2 \frac{D_{pq}}{m} \operatorname{div}_x(\nabla_\xi W) + D_{qq} \Delta_x W. \quad (4.15)$$

En el límite clásico $\hbar \rightarrow 0$ tenemos que $D_{qq} \rightarrow 0$, $D_{pq} \rightarrow 0$ y, formalmente,

$$L_{QFP}W \rightarrow \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi W + 2\lambda \operatorname{div}_\xi(\xi W) \quad (4.16)$$

$$\theta_{\hbar}[V]W \rightarrow -\frac{1}{m} \nabla_x V \cdot \nabla_\xi W \quad (4.17)$$

de forma que se recupera la ecuación clásica de Vlasov–Fokker–Planck (consultar, por ejemplo, [22]):

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W - \frac{1}{m} \nabla_x V \cdot \nabla_\xi W = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi W + 2\lambda \operatorname{div}_\xi(\xi W). \quad (4.18)$$

Destacamos que en [38] se utilizó un procedimiento basado en desarrollos asintóticos con respecto al parámetro $\alpha = \lambda \hbar / k_B T$ para obtener (4.9). El error de la aproximación es $\mathcal{O}(\alpha^3)$, por lo que (4.9) y, equivalentemente, (4.13)–(4.15) pueden considerarse como modelos de temperaturas medias/altas. Cuando los términos de $L_{QFP}W$ con coeficientes D_{qq} y D_{pq} (que son ambos de orden $\mathcal{O}(\frac{1}{T})$) son despreciados, entonces obtenemos el operador clásico de Fokker–Planck (ecuación maestra de Caldeira–Leggett en [20]). En [39] se establece que esta aproximación, que proporciona un modelo para altas temperaturas con precisión de orden $\mathcal{O}(\alpha^2)$, es sensata si la longitud de coherencia perteneciente al estado del electrón es mayor que la longitud de onda de De Broglie $l_{dB} = \hbar / \sqrt{4mk_B T}$. Cuando

el término con coeficiente λ también es despreciado, obtenemos un modelo con precisión de orden $\mathcal{O}(\alpha)$ (régimen asintótico de temperaturas muy elevadas) para el que $L_{QFP} = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi$. Entonces, la disipación de la energía del electrón por la acción del baño térmico no aparece descrita. El análisis matemático presentado en las próximas secciones tendrá en cuenta exactamente este caso. Este modelo simplificado requiere el análisis matemático más complejo en la clase de ecuaciones (de Lindblad) (4.13) con operadores (4.15) (debido a la ausencia de términos de segundo orden con respecto a la variable x).

4.2.2 La ecuación para la matriz de densidad en forma de Lindblad

Muchas propiedades matemáticas importantes de los sistemas cuánticos abiertos se verifican si la correspondiente ecuación de evolución markoviana para el operador de densidad $R(t)$ es de la llamada *forma de Lindblad* (ver [72], [28], [40]).

La ecuación de evolución

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H_E, R] + A(R), \quad (4.19)$$

donde H_E es autoadjunto, se dice que es de la forma de Lindblad si existen operadores lineales $L_j, j = 1, 2, 3, \dots$, tales que

$$A(R) = \sum_{j=1}^{\infty} L_j R L_j^* - \frac{1}{2}(LR + RL) \quad (4.20)$$

con

$$L := \sum_{j=1}^{\infty} L_j^* L_j, \quad (4.21)$$

donde $[A, B] := AB - BA$ es el conmutador de los operadores A y B . Además $H_E, L_j, j = 1, 2, \dots$, han de satisfacer algunas hipótesis técnicas adicionales, de forma que

$$-\frac{i}{\hbar}[H_E, \cdot] + A(\cdot)$$

genere un semigrupo fuertemente continuo sobre el espacio de los operadores de clase traza en $L^2(\mathbb{R}^d)$. Para más detalles hacemos referencia a [28].

Las propiedades fundamentales de las ecuaciones de evolución en forma de Lindblad son:

(a) *Conservación de la positividad* (ver [29], [72], [28]):

$$R(0) \geq 0 \Rightarrow R(t) \geq 0, \quad \forall t > 0 \quad (4.22)$$

(en el sentido de los operadores definidos positivos). De hecho, la forma de Lindblad proporciona incluso positividad completa del semigrupo de evolución (ver [72]). La positividad de $R(t)$ implica que la transformada de Husimi $W^H = W^H(x, \xi, t)$ de $R(t)$ es no negativa punto a punto en $\mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_\xi^d$ (ver [73], [47]):

$$W^H(x, \xi, t) := W(x, \xi, t) *_x \Gamma_{\frac{\hbar}{m}}(x) *_\xi \Gamma_{\frac{\hbar}{m}}(\xi) \geq 0 \quad \text{en } \mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_\xi^d, \quad (4.23)$$

donde W es la función de Wigner (4.12) y Γ_σ la función gaussiana

$$\Gamma_\sigma(u) = \frac{1}{(\pi\sigma)^{d/2}} \exp(-|u|^2/\sigma). \quad (4.24)$$

Como consecuencia, un simple cálculo conduce a

$$\int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} W^H(x, \xi, t) d\xi dx = \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} W(x, \xi, t) d\xi dx,$$

ya que

$$n(x, t) *_x \Gamma_{\frac{\hbar}{m}}(x) = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} W^H(x, \xi, t) d\xi \geq 0 \quad (4.25)$$

casi para todo punto $x \in \mathbb{R}^d$. Observamos que $\text{tr}R(t)$, la carga total del conjunto de electrones, se mantiene invariante durante la evolución:

$$\text{tr}R(t) = \text{tr}R(0), \quad \forall t > 0,$$

de forma que

$$Q = \text{tr}R(0) = \int_{\mathbb{R}_x^d} n(x, t) dx = \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} W^H(x, \xi, t) d\xi dx \geq 0. \quad (4.26)$$

(b) *Disipatividad* (en el espacio de los operadores de clase traza, ver §X.8 de [86], [84]):

$$\langle A(R), \text{sgn}(R) \rangle_{HS} \leq 0,$$

donde $\langle A, B \rangle_{HS} = \text{tr}(AB^*)$ es el producto escalar usual en el espacio de operadores de Hilbert–Schmidt en $L^2(\mathbb{R}^d)$. $A(R)$ es, por tanto, un operador disipativo en el sentido de los generadores de semigrupos.

(c) *Crecimiento de la entropía* (ver [9]): si

$$\sum_{j=1}^{\infty} L_j L_j^* \leq \sum_{j=1}^{\infty} L_j^* L_j, \quad (4.27)$$

entonces la entropía cuántica (consultar [97]) $S(R) := -\text{tr}(R \text{tr} R)$ satisface

$$\frac{d}{dt} S(R(t)) \geq 0 \quad (4.28)$$

para todos los operadores $R(t)$ de traza finita.

Obviamente, las propiedades (b) y (c) hacen referencia a la irreversibilidad de la ecuación de evolución (4.19) (para casos no triviales).

Intentaremos ahora escribir la ecuación (4.9) en forma de Lindblad. Para ello, consideramos

$$L_j = r x_j + \delta \partial_{x_j}; \quad r, \delta \in \mathbf{C}, \quad j = 1, \dots, d, \quad (4.29)$$

donde x_j denota aquí al operador que representa la multiplicación por la j -ésima coordenada de posición. Claramente, $L_j^* = \bar{r} x_j - \bar{\delta} \partial_{x_j}$. También establecemos

$$L_{d+j} = w x_j; \quad w \in \mathbf{C}, \quad j = 1, \dots, d, \quad (4.30)$$

y

$$L_{2d+j} = \varphi \partial_{x_j}; \quad \varphi \in \mathbf{C}, \quad j = 1, \dots, d. \quad (4.31)$$

Además, definimos el siguiente hamiltoniano "ajustado" (ver [40]):

$$H_E = H - i \frac{\hbar \mu}{2} \sum_{j=1}^d \{x_j, \partial_{x_j}\}, \quad \mu \in \mathbf{R}, \quad (4.32)$$

donde $\{A, B\} = AB + BA$ es el anticonmutador de los operadores A y B . Obviamente, H_E es (formalmente) autoadjunto. Tras una serie de cálculos largos, aunque sencillos, obtenemos que el núcleo integral $a = a(x, y)$ de

$$-\frac{i}{\hbar} [H_E, R] + \sum_{j=1}^{3d} L_j R L_j^* - \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^{3d} L_j^* L_j R + R \sum_{j=1}^{3d} L_j^* L_j \right)$$

tiene la siguiente forma:

$$a(x, y) = -\frac{i}{\hbar} (H_x - H_y) \rho + d (\text{Re}(\delta \bar{r}) - \mu) \rho$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2}(|r|^2 + |w|^2)|x - y|^2\rho + \frac{1}{2}(|\delta|^2 + |\varphi|^2)|\nabla_x + \nabla_y|^2\rho \\
& - \left((\mu - i\text{Im}(\bar{\delta}r))(x \cdot \nabla_x) - \delta\bar{r}(y \cdot \nabla_x) - \bar{\delta}r(x \cdot \nabla_y) \right. \\
& \quad \left. + (\mu + i\text{Im}(\bar{\delta}r))(y \cdot \nabla_y) \right)\rho.
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Una sencilla comparación nos indica que podemos elegir los parámetros $r, w, \delta, \varphi \in \mathbb{C}$ y $\mu \in \mathbb{R}$ de modo que obtengamos el segundo miembro de (4.9) si y solamente si

$$|r|^2 + |w|^2 = \frac{2D_{pp}}{\hbar^2}, \quad |\delta|^2 + |\varphi|^2 = 2D_{qq}, \tag{4.34}$$

$$\mu = \text{Re}(\bar{\delta}r) = \gamma, \quad \text{Im}(\bar{\delta}r) = \frac{2}{\hbar}D_{pq}. \tag{4.35}$$

Podemos concluir entonces que se pueden encontrar parámetros $r, w, \delta, \varphi, \mu$ que satisfagan estas ecuaciones si y sólo si los parámetros del medio son tales que la siguiente matriz es semidefinida positiva:

$$\begin{pmatrix} D_{qq} & D_{pq} + \frac{i}{2}\hbar\lambda \\ D_{pq} - \frac{i}{2}\hbar\lambda & D_{pp} \end{pmatrix} \geq 0. \tag{4.36}$$

En términos de las constantes originales del baño térmico, esta condición se traduce en (ver (4.11)):

$$\frac{\hbar\Omega}{k_B T} \leq \sqrt{3}\pi \tag{4.37}$$

o bien $\eta = 0$ (que indica que no existe acoplamiento con el baño térmico, lo cual constituye un caso trivial). La relación (4.37) es satisfecha para temperaturas medias/altas. Señalamos también que las relaciones (4.36) y (4.37) pueden encontrarse en [38], [35].

Bajo la condición (4.36), una posible elección de los operadores de Lindblad viene dada por:

$$\begin{aligned}
r &= \frac{\sqrt{2D_{pp}}}{\hbar}, & \delta &= \frac{\hbar\lambda - 2iD_{pq}}{\sqrt{2D_{pp}}}, \\
w &= 0, & \varphi^2 &= 2D_{qq} - |\delta|^2.
\end{aligned}$$

Esto implica que $\sum_{j=1}^{3d} (L_j^* L_j - L_j L_j^*) = -2d\lambda$, de donde podemos concluir el crecimiento de la entropía (para toda matriz de densidad inicial) solamente en el caso sin fricción $\lambda = 0$ (ver (4.27), (4.28)).

A continuación argumentamos que la condición (4.36) es también necesaria para que (4.9) sea de la forma de Lindblad. La representación de Lindblad dada no es (como de costumbre) única. Sin embargo, sólo los términos mixtos x/y en (4.9) son relevantes para garantizar la validez de la forma de Lindblad. Estos surgen de los operadores $L_j R L_j^*$, $j = 1, \dots, 3d$. Como estos operadores son positivos, no es posible la cancelación de los distintos operadores de Lindblad. De la estructura de (4.33) y (4.9) observamos fácilmente que sólo se pueden utilizar operadores de Lindblad de la forma (4.29)–(4.31) para representar al segundo miembro de la ecuación (4.9). Supongamos ahora que la ecuación (4.9) puede ser representada por medio de dos operadores de la forma (4.29) (los otros casos son triviales). Usando (la generalización obvia de) las relaciones (4.34) y (4.35) obtenemos la siguiente estimación:

$$\left| \lambda + \frac{2i}{\hbar} D_{pq} \right|^2 = |\bar{\delta}_1 r_1 + \bar{\delta}_2 r_2|^2 \leq (|\delta_1|^2 + |\delta_2|^2)(|r_1|^2 + |r_2|^2) \leq \frac{4}{\hbar^2} D_{qq} D_{pp},$$

de donde se concluye (4.36).

Puntualizamos que la ecuación de Caldeira–Leggett (con $D_{pq} = D_{qq} = 0$) no es de la forma de Lindblad. El modelo para temperaturas muy altas (λ, D_{pq}, D_{qq} iguales a cero), sin embargo, sí lo es.

4.2.3 Estados de equilibrio

La disipatividad del operador cuántico de Fokker–Planck (suponemos ahora que se satisface la condición de Lindblad (4.36)) plantea de forma inmediata la cuestión de los posibles estados de equilibrio de L_{QFP} . Para su estudio, reescribimos

$$\begin{aligned} L_{QFP} W &= \frac{D_{pp}}{m^2} \operatorname{div}_\xi \left(e^{-\frac{\lambda m^2}{D_{pp}} |\xi|^2} \nabla_\xi \left(e^{\frac{\lambda m^2}{D_{pp}} |\xi|^2} W \right) \right) \\ &\quad + 2 \frac{D_{pq}}{m} \operatorname{div}_x (\nabla_\xi W) + D_{qq} \Delta_x W, \end{aligned} \quad (4.38)$$

multiplicamos esta ecuación por $z := W \exp(\lambda m^2 |\xi|^2 / D_{pp})$ e integramos por partes, tras lo cual obtenemos que

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} e^{\frac{\lambda m^2}{D_{pp}} |\xi|^2} W (L_{QFP} W) d\xi dx &= - \int_{\mathbb{R}_x^d} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} e^{-\frac{\lambda m^2}{D_{pp}} |\xi|^2} \left(\frac{D_{pp}}{m^2} |\nabla_\xi z|^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{2D_{pq}}{m} \nabla_x z \cdot \nabla_\xi z + D_{qq} |\nabla_x z|^2 \right) d\xi dx. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Estimamos ahora, utilizando (4.36),

$$\det \begin{pmatrix} \frac{D_{pp}}{m^2} & \frac{D_{pq}}{m} \\ \frac{D_{pq}}{m} & D_{qq} \end{pmatrix} \geq \frac{\hbar^2 \lambda^2}{4m^2}.$$

Para $\lambda > 0$ deducimos que la expresión (4.39) es estrictamente positiva a menos que $z = \text{const.}$, lo cual nos conduce a que $W_{eq} \equiv 0$ es el único estado que verifica

$$L_{QFP}W_{eq} = 0. \quad (4.40)$$

Para $\lambda = 0$ obtenemos fácilmente la condición necesaria y suficiente

$$\nabla_{\xi}W_{eq} + m\sqrt{\frac{D_{qq}}{D_{pp}}}\nabla_x W_{eq} = 0$$

para que se verifique (4.40). Esto implica que

$$W_{eq}(x, \xi) = h \left(-m\sqrt{\frac{D_{qq}}{D_{pp}}}\xi + x \right)$$

para alguna función escalar h , que de nuevo nos lleva a que $W_{eq} \equiv 0$ es el único estado de equilibrio que satisface $W_{eq} \in L^2(\mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_{\xi}^d)$.

Por consiguiente, la condición de Lindblad excluye estados de equilibrio no triviales del operador cuántico de Fokker–Planck. Esto parece bastante natural, ya que la relajación hacia un estado de equilibrio no trivial del electrón debería manifestarse como consecuencia de la presencia de un potencial externo o a través de la evolución de la función de distribución de cuasi-probabilidad del sistema en un dominio acotado con condiciones de contorno apropiadas (consultar, por ejemplo, [11]).

4.2.4 Propagación de momentos

Otra cuestión importante es la que se refiere al comportamiento de los momentos (con respecto a la velocidad) de órdenes cero, uno y dos de la solución de (4.13)–(4.15). Definimos la densidad de posición del electrón

$$n(x, t) = \int_{\mathbb{R}_{\xi}^d} W(x, \xi, t) d\xi, \quad (4.41)$$

la densidad de corriente del electrón

$$J(x, t) = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} W(x, \xi, t) \xi d\xi, \quad (4.42)$$

la densidad de energía cinética del electrón

$$e(x, t) = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} W(x, \xi, t) \frac{|\xi|^2}{2} d\xi \quad (4.43)$$

y la densidad de momento de inercia del electrón

$$\mathcal{I}(\xi, t) = \int_{\mathbb{R}_x^d} W(x, \xi, t) |x|^2 dx. \quad (4.44)$$

En vez de la ecuación de continuidad “usual”, para este modelo obtenemos

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div}_x J = D_{qq} \Delta_x n, \quad (4.45)$$

y por tanto se conserva la carga total del sistema:

$$\int_{\mathbb{R}_x^d} n(x, t) dx \equiv \int_{\mathbb{R}_x^d} n(x, t=0) dx = Q, \quad \forall t > 0. \quad (4.46)$$

La densidad de corriente satisface

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}_x^d} J(x, t) dx + \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}_x^d} \nabla_x V(x, t) n(x, t) dx = -2\lambda \int_{\mathbb{R}_x^d} J(x, t) dx \quad (4.47)$$

y la densidad de energía

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}_x^d} e(x, t) dx + \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}_x^d} \nabla_x V(x, t) \cdot J(x, t) dx \\ = d \frac{D_{pp}}{m^2} Q - 4\lambda \int_{\mathbb{R}_x^d} e(x, t) dx, \end{aligned} \quad (4.48)$$

mientras que la densidad de momento de inercia verifica

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}_\xi^d} \mathcal{I}(\xi, t) d\xi = 2 \int_{\mathbb{R}_x^d} J(x, t) \cdot x dx + 2D_{qq} Q d. \quad (4.49)$$

Para futuras referencias enunciamos las siguientes identidades (formales) para matrices de densidad positivas $R(t) \geq 0$, que son bien conocidas en la literatura:

$$n(x, t) = \rho\left(x + \frac{\hbar}{2m}\eta, x - \frac{\hbar}{2m}\eta, t\right)\Big|_{\eta=0} \geq 0 \quad (4.50)$$

y

$$\int_{\mathbb{R}_x^d} e(x, t) dx = \frac{1}{2} \text{tr}(-\Delta_x R(t)) \geq 0. \quad (4.51)$$

De la misma forma, por dualidad tenemos que

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^d} \mathcal{I}(\xi, t) d\xi \geq 0. \quad (4.52)$$

Claramente, (4.50) implica

$$\int_{\mathbb{R}_x^d} n(x, t) dx = \text{tr}R(t). \quad (4.53)$$

En el caso de acoplamiento de Poisson:

$$\Delta_x V = -\gamma n \quad (\gamma = \pm 1),$$

la ecuación (4.47) se transforma en

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}_x^d} J(x, t) dx = -2\lambda \int_{\mathbb{R}_x^d} J(x, t) dx, \quad (4.54)$$

que proporciona relajación exponencial de la corriente total:

$$\int_{\mathbb{R}_x^d} J(x, t) dx = e^{-2\lambda t} \int_{\mathbb{R}_x^d} J(x, t=0) dx. \quad (4.55)$$

De forma similar, (4.48) se transforma en

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}_x^d} \left(e(x, t) + \frac{\gamma}{2m} |\nabla_x V(x, t)|^2 \right) dx \\ &= d \frac{D_{pp}}{m^2} Q - 4\lambda \int_{\mathbb{R}_x^d} e(x, t) dx - \frac{\gamma D_{qq}}{m} \int_{\mathbb{R}_x^d} n(x, t)^2 dx. \end{aligned} \quad (4.56)$$

También utilizaremos la energía y el momento de inercia de Husimi, que están relacionados con $e(x, t)$ y $\mathcal{I}(\xi, t)$ por medio de

$$E^H(t) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} W^H \frac{|\xi|^2}{2} d\xi dx = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} W \frac{|\xi|^2}{2} d\xi dx + \frac{dQ\sigma}{4}, \quad (4.57)$$

$$\mathcal{I}^H(t) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} W^H |x|^2 dx d\xi = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} W |x|^2 dx d\xi + \frac{dQ\sigma}{2}. \quad (4.58)$$

Señalamos que las ecuaciones (4.43)-(4.44) y (4.50)-(4.53) sólo se verifican bajo hipótesis de regularidad restrictivas sobre la matriz de densidad $R(t)$. Por el contrario, la energía y el momento de inercia de Husimi están bien definidos para toda matriz de densidad positiva $R(t)$ con traza finita y energía cinética finita $\frac{1}{2}\text{tr}(-\Delta_x R(t))$ o, en su caso, momento de inercia finito (ver [73], [3]).

4.3 Existencia de soluciones locales en tiempo

En esta sección estudiamos el problema de existencia de soluciones locales (para datos iniciales arbitrariamente grandes) del sistema de WFPF. A lo largo de la misma entenderemos por solución “local en tiempo” aquella para la que, dado $T > 0$ fijo, existe una bola de datos iniciales “admisibles” para los cuales la solución en cuestión está definida en $(0, T)$. Además, T se puede elegir arbitrariamente grande si el dato inicial es “suficientemente pequeño” (este comentario será justificado más adelante). Centraremos nuestra atención en el estudio de la ecuación de WFPF sin fricción. Aún así, el análisis matemático del problema de existencia y unicidad de soluciones sigue los mismos pasos en el caso general con fricción, salvo los cambios naturales heredados de la nueva expresión para la solución fundamental asociada al operador cinético lineal de Fokker-Planck con fricción.

Destacamos aquí que el modelo markoviano más simple que incluye disipación (el modelo con fricción más simple) viene descrito por la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W + \theta_{\hbar}[V]W = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_{\xi} W + 2\lambda \text{div}_{\xi}(\xi W) + D_{qq} \Delta_x W. \quad (4.59)$$

Este modelo requiere que la ecuación asociada para el operador matriz de densidad reducido (ver ecuación (3) en [39]) pertenezca a la clase de Lindblad, lo cual garantiza la “consistencia” matemática del problema, es decir, la conservación de la positividad de $R(t)$ para todo dato inicial y todo $t > 0$.

El análisis matemático del modelo de WFPF sin fricción ($\lambda = D_{qq} = 0$) es en cierto sentido más complejo que el modelo con fricción (4.59), como hemos señalado anteriormente, ya que el término de colisión sólo involucra ahora difusión con respecto a la variable de momento ξ . Por tanto, será necesario probar el efecto regularizante de la ecuación con respecto a la variable de posición por medio de un análisis más detallado que el que se lleva a cabo para el modelo con fricción.

De ahora en adelante supondremos $d = 3$ y la condición de normalización $\hbar = m = 1$ por simplicidad en los cálculos. En primer lugar reformularemos la ecuación de WFPF en términos de una ecuación integral equivalente. Entonces, una parte importante de nuestros esfuerzos estará dedicada a demostrar que la densidad $n(x, t)$ regulariza hasta $L^\infty(\mathbb{R}^3 \times (0, T))$, supuesto que el siguiente promedio de densidad inicial

$$\int_{\mathbb{R}^3} W^I(x - t\xi, \xi) d\xi,$$

en el que aparece la variable espacial desplazada $x - t\xi$, pertenece a $L^{p_0}(\mathbb{R}^3)$ para un valor de p_0 apropiado. Por otro lado, si $p_0 > 9/8$ y $W^I \in L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$, veremos que el potencial $V(\cdot, t) \in W^{1,p}(\mathbb{R}^3)$ con $p > p(p_0)$ y, en particular, $V(\cdot, t) \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Además, si $p_0 > 3/2$ probaremos que $\nabla_x V(\cdot, t) \in L^\infty(\mathbb{R}^3)^3$. Entonces, la ecuación integral (equivalente a la de WFPF) admite una única solución $W(x, \xi, t) \in L^\infty((0, T); L^1 \cap L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$, donde T depende del dato inicial y q depende de p_0 y de la regularidad de W^I .

Lo más importante a la hora de obtener estas estimaciones radica en probar la regularidad requerida para el potencial y para la función de Wigner, para así poder formular el término no lineal de la ecuación de WFPF como una convolución con respecto a la variable de momento, a saber:

$$-\theta[V]W(x, \xi, t) = H(x, \xi, t) *_{\xi} W(x, \xi, t), \quad (4.60)$$

donde

$$H(x, \xi, t) = \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \left(V(x + \frac{\eta}{2}, t) - V(x - \frac{\eta}{2}, t) \right) e^{-i\eta \cdot \xi} d\eta. \quad (4.61)$$

De hecho, se puede deducir fácilmente que

$$\begin{aligned} H(x, \xi, t) &= i\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \left(V(x + \frac{\eta}{2}, t) - V(x - \frac{\eta}{2}, t) \right) \\ &= 16\text{Re}[ie^{2i\xi \cdot x} \mathcal{F}_{x \rightarrow \xi}^{-1} V(2\xi, t)]. \end{aligned} \quad (4.62)$$

Por lo tanto, basta con controlar $\|\mathcal{F}_{x \rightarrow \xi}^{-1} V(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3)}$ y $\|W(\cdot, \cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}$ para dar sentido a la convolución. En este caso, la ecuación de WFPF puede escribirse equivalentemente de la siguiente forma:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W - \sigma \Delta_\xi W = H *_\xi W, \quad (4.63)$$

siendo el segundo miembro local en posición y no local en velocidad.

Comenzamos nuestro estudio con algunas notaciones y definiciones.

4.3.1 La solución fundamental y el concepto de solución integral

Damos seguidamente una descripción de la solución fundamental de la ecuación cinética de Fokker-Planck, del mismo modo que establecemos algunas de sus propiedades más relevantes. El concepto de solución integral del problema de WFPF será entonces introducido como una solución de una ecuación integral equivalente que involucra a la solución fundamental del operador lineal de Fokker-Planck.

La función de Green G asociada al problema cinético lineal de Fokker-Planck es la solución fundamental de

$$L[W] \stackrel{def}{=} \frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W - \sigma \Delta_\xi W = 0. \quad (4.64)$$

Esta solución fundamental puede expresarse de la siguiente forma (consultar, por ejemplo, [22] ó [12] para obtener más detalles):

$$G(x, \xi, z, v, t) = G_0(x - z - tv, \xi - v, t), \quad x, \xi, z, v \in \mathbb{R}^3, t \geq 0, \quad (4.65)$$

donde

$$G_0(x, \xi, t) = \frac{(3/4)^{\frac{3}{2}}}{(\pi\sigma)^3 t^6} \exp \left\{ -\frac{3|x|^2 + 3|x - t\xi|^2 - t^2|\xi|^2}{2\sigma t^3} \right\}. \quad (4.66)$$

Como es habitual, las fórmulas (4.65) y (4.66) se obtienen al hacer la transformada de Fourier de la ecuación lineal (4.64) con respecto a las variables x, ξ y luego integrar la ecuación hiperbólica lineal de primer orden resultante a lo largo de las características (consultar [22], [23], [12]). En el siguiente lema listamos algunas de las propiedades de G que nos serán útiles a partir de ahora para obtener regularidad y compacidad para las soluciones integrales del sistema de WFPF.

Lema 4.3.1. *La solución fundamental de la ecuación cinética de Fokker-Planck, definida por las relaciones (4.65) y (4.66), satisface las siguientes propiedades:*

(i) *Para todo $t \geq 0$ y $x, \xi, z, v \in \mathbb{R}^3$ tenemos que*

$$\int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} G(x, \xi, z, v, t) dz dv = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} G(x, \xi, z, v, t) dx d\xi = 1,$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} G(x, \xi, z, v, t) dx = \frac{1}{(4\pi\sigma t)^{\frac{3}{2}}} \exp\left\{-\frac{|\xi - v|^2}{4\sigma t}\right\},$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} G(x, \xi, z, v, t) d\xi = \frac{1}{((4/3)\pi\sigma)^{\frac{3}{2}} t^{\frac{3}{2}}} \exp\left\{-\frac{|x - z - tv|^2}{(4/3)\sigma t^3}\right\}.$$

(ii) *Para todo $h \geq 0$ y para todo $x, \xi, z, v \in \mathbb{R}^3, t \geq 0$, la siguiente igualdad es satisfecha:*

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} G(x - h\xi, \xi, z, v, t) d\xi \\ &= \frac{1}{(4\pi\sigma(t^3/3 + ht^2 + h^2t))^{\frac{3}{2}}} \exp\left\{-\frac{|x - z - (t+h)v|^2}{4\sigma(t^3/3 + ht^2 + h^2t)}\right\}. \end{aligned}$$

(iii) *Para todo $\epsilon > 0$ y para todo $x, \xi \in \mathbb{R}^3, t \geq 0$, la solución fundamental G es invariante (o autosemejante) según el siguiente grupo de escala:*

$$G_0(x, \xi, t) = \epsilon^{-12} G_0(\epsilon^{-3}x, \epsilon^{-1}\xi, \epsilon^{-2}t).$$

Una prueba de las dos primeras afirmaciones puede encontrarse en [22], [12] y [21]. La afirmación (iii) es consecuencia de un cálculo directo.

A partir de ahora consideraremos la ecuación de WFPF como una perturbación no lineal de la ecuación (4.64). Para ello, debemos pensar el término pseudo-diferencial $\theta[V]W$ como un término de fuerza en el segundo miembro de (4.6). Entonces, si suponemos que (W, V) es una solución regular de la ecuación de WFPF, este problema puede reformularse en términos de la ecuación integral

$$\begin{aligned} W(x, \xi, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} G(x, \xi, z, v, t) W^I(z, v) dz dv \\ &- \int_0^t \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} G(x, \xi, z, v, s) \theta[V]W(z, v, t-s) dz dv ds \end{aligned} \quad (4.67)$$

o, de forma equivalente,

$$W(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_{\mathbb{R}_z^3} G(x, \xi, z, v, t) W^I(z, v) dz dv + \int_0^t \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_{\mathbb{R}_z^3} G(x, \xi, z, v, s) (H *_{\xi} W)(z, v, t-s) dz dv ds. \quad (4.68)$$

Por tanto, podemos considerar una descomposición de la solución W en dos partes:

$$W = W^1 + W^2,$$

la primera de las cuales W^1 , la parte lineal, sólo depende del dato inicial W^I , mientras que la segunda W^2 depende básicamente del potencial V , solución de la ecuación de Poisson (4.3), a través del operador pseudo-diferencial $\theta[V]$. Esta descomposición será particularmente interesante cuando la escribamos en términos de productos de convolución, con el objetivo de obtener estimaciones *a priori* y resultados de estabilidad para la función de Wigner W . Un método similar fue propuesto por vez primera por G. H. Cottet y J. Soler en [26] para obtener el mismo tipo de estimaciones en el marco de las ecuaciones de Navier-Stokes. De hecho, adoptaremos la fórmula (4.68) como nuestra definición de solución integral (ver también [23]). El concepto preciso es el siguiente:

Definición 4.3.2. Decimos que el par (W, V) es una solución integral de la ecuación de WFPF (4.6) con dato inicial (4.2) si $\theta[V]W$ es integrable con respecto a la medida de Lebesgue $d(x, \xi, t)$, (W, V) resuelve la ecuación integral (4.68) y se satisface la identidad $V = \frac{\gamma}{4\pi} \frac{1}{|x|} * n$ para $n(\cdot, t) \in L^1(\mathbb{R}^3)$.

Señalamos que $W^1(x, \xi, t)$ en la anterior descomposición resuelve el problema lineal de Wigner-Fokker-Planck $L[W] = 0$ ($V \equiv 0$) con dato inicial W^I . Además, tenemos que

Lema 4.3.3. Si definimos

$$f(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_{\mathbb{R}_z^3} G(x, \xi, z, v, t) g(z, v) dz dv, \quad (4.69)$$

entonces se verifica la siguiente estimación de caída:

$$\|f(\cdot, \cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \leq Ct^{-6(1/p-1/q)} \|g\|_{L^p(\mathbb{R}_z^3 \times \mathbb{R}_v^3)}, \quad 1 \leq p \leq q \leq \infty,$$

donde C es una constante positiva. En particular, para $p = q$ tenemos que

$$\|f(\cdot, \cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \leq \|g\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}.$$

El mismo resultado es cierto cuando

$$f(x, \xi, t) = \int_0^t \int_{\mathbb{R}_z^3} \int_{\mathbb{R}_v^3} G(x, \xi, z, v, t-s) g(z, v, s) dz dv ds. \quad (4.70)$$

En este caso,

$$\|f(\cdot, \cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \leq C \int_0^t (t-s)^{-6(1/p-1/q)} \|g(\cdot, \cdot, s)\|_{L^p(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} ds$$

para todo $1 \leq p \leq q \leq \infty$.

Referimos a [21], [12] y [23] para consultar esta y otras demostraciones relacionadas con estimaciones en L^p de las soluciones. Destacamos también que, bajo algunas condiciones de regularidad para la función de Wigner y el potencial que serán probadas más adelante, los problemas de WFPF y (4.68) son equivalentes.

Ahora, con el propósito de obtener expresiones más simples para las densidades de posición $n^k = n(W^k)$, con $k = 1, 2$, introducimos la siguiente notación:

$$\mathcal{N}(x) = \frac{1}{((4/3)\pi\sigma)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{|x|^2}{2}}, \quad (4.71)$$

$$d_h(t) = \frac{t^3}{3} + ht^2 + h^2t. \quad (4.72)$$

Entonces obtenemos la siguiente representación integral en dos partes para la densidad:

$$\begin{aligned} & n^1(x, t) \\ &= \frac{1}{((4/3)\pi\sigma)^{\frac{3}{2}} t^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}_z^3} \exp\left\{-\frac{|x-z|^2}{(4/3)\sigma t^3}\right\} \int_{\mathbb{R}_v^3} W^I(z-tv, v) dv dz, \end{aligned} \quad (4.73)$$

$$\begin{aligned} n^2(x, t) &= \frac{1}{((4/3)\pi\sigma)^{\frac{3}{2}}} \int_0^t s^{-\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}_z^3} \exp\left\{-\frac{|x-z|^2}{(4/3)\sigma s^3}\right\} \\ &\times \int_{\mathbb{R}_v^3} (H *_{\xi} W)(z-sv, v, t-s) dv dz ds, \end{aligned} \quad (4.74)$$

donde hemos usado el Lema 4.3.1 (i) y el cambio de variable $z = z - tv$. Las fórmulas (4.73) y (4.74) ilustran el hecho de que el operador solución actúa sobre la densidad como una convolución en la variable de posición por una función gaussiana que se dispersa con el tiempo, produciendo un efecto regularizante sobre el sistema (ver [12], [22]). En efecto, las fórmulas (4.73) y (4.74) pueden reescribirse como

$$n^1(x, t) = t^{-\frac{3}{2}} \mathcal{N} \left(\frac{x}{\sqrt{(2/3)\sigma t^3}} \right) *_x \int_{\mathbb{R}^3} W^I(x - tv, v) dv \quad (4.75)$$

y

$$\begin{aligned} & n^2(x, t) \\ &= \int_0^t s^{-\frac{3}{2}} \mathcal{N} \left(\frac{x}{\sqrt{(2/3)\sigma s^3}} \right) *_x \int_{\mathbb{R}^3} (H *_\xi W)(x - sv, v, t - s) dv ds. \end{aligned} \quad (4.76)$$

El siguiente ingrediente crucial estriba en obtener estimaciones *a priori*. Para ello, como se desprende de (4.75) y (4.76), no es suficiente asumir la acotación en L^p de la densidad inicial $n^I = n(W^I)$, ya que necesitaremos controlar también algunas normas L^p de los promedios de densidad

$$n_h^I(x) = n_h(W^I)(x) = \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W^I(x - h\xi, \xi) d\xi \quad (4.77)$$

uniformemente con respecto a h , para todo $h \geq 0$.

Por tanto, conforme al Lema 4.3.1 (ii) podemos expresar los promedios de densidad $n_h^k = n_h(W^k)$, siguiendo la notación introducida en (4.77), de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} n_h^1(x, t) &= \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W^1(x - h\xi, \xi, t) d\xi \\ &= \frac{1}{(3d_h(t))^{\frac{3}{2}}} \mathcal{N} \left(\frac{x}{\sqrt{2\sigma d_h(t)}} \right) *_x \int_{\mathbb{R}^3} W^I(x - (t+h)v, v) dv, \end{aligned} \quad (4.78)$$

$$\begin{aligned} n_h^2(x, t) &= \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W^2(x - h\xi, \xi, t) d\xi = \int_0^t \frac{1}{(3d_h(s))^{\frac{3}{2}}} \mathcal{N} \left(\frac{x}{\sqrt{2\sigma d_h(s)}} \right) \\ & *_x \int_{\mathbb{R}^3} (H *_\xi W)(x - (s+h)v, v, t - s) dv ds. \end{aligned} \quad (4.79)$$

Estas relaciones serán básicas de ahora en adelante cuando intentemos ganar algo de regularidad sobre la densidad y, como consecuencia, sobre el potencial.

4.3.2 Estimaciones a priori

Desarrollamos a continuación las herramientas fundamentales necesarias para obtener una cota para la norma promediada $\|n_h(\cdot, t)\|_{L^r(\mathbb{R}^3)}$ con $r > 3/2$, estimación que será esencial más adelante para deducir la regularización típica del núcleo de Fokker–Planck sobre la densidad y el potencial, así como la regularidad de la función de Wigner $W(x, \xi, t)$. En particular, demostrar que $n_h(\cdot, t)$ está acotada en $L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^p(\mathbb{R}^3)$ para $p > 3/2$ adecuado, uniformemente con respecto a $h \geq 0$, implicará el resultado de regularidad para el potencial $V(\cdot, t) \in W^{1,q}(\mathbb{R}^3)$ con $q > 3$.

Como consecuencia destacamos que, bajo esta propiedad de regularidad para V , que implica $V(\cdot, t) \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ por medio de la desigualdad de Sobolev, y si probamos también que $W(\cdot, \cdot, t) \in L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$, entonces el operador pseudo-diferencial (4.5) puede reescribirse como una convolución y la formulación (4.63) del problema de WFPF adquiere sentido. Notemos que, para el problema de Wigner–Poisson usual sin núcleo de colisión de tipo Fokker–Planck, la propiedad $W(\cdot, \cdot, t) \in L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ no es generalmente satisfecha. De hecho, esta podría ser considerada como una propiedad específica debida al efecto regularizante del operador de Fokker–Planck.

Nuestro primer objetivo consiste en analizar la acotación en L^p de las densidades promediadas n_h^k . Para ello definimos, para $f = f(x, \xi, t)$ arbitraria,

$$S_p(t, f) = \max\{\|n_h(f)(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}, h \geq 0\}$$

para todo $1 \leq p \leq \infty$, y denotamos por

$$S_p^I(f) = \max\{\|n_h^I(f)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}, h \geq 0\}.$$

En lo que sigue, cuando $f = W$ omitiremos la dependencia funcional de S_p , es decir,

$$S_p(t, W) = S_p(t)$$

y $S_p^j(t)$, $1 \leq j \leq 2$, se definirá conforme a (4.78) y (4.79). Las normas S_p son naturales en este contexto, ya que constituyen nuestra única referencia para estimar la densidad de partículas:

$$\|n(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} \leq S_p(t).$$

De ahora en adelante, a no ser que se especifique lo contrario, C denotará varias constantes positivas que dependen, en general, de los parámetros típicos del problema.

Lema 4.3.4. Consideramos f y g relacionadas como en (4.69). Entonces se verifica la siguiente cota de caída:

$$S_q(t, f) \leq Ct^{-9/2(1/p-1/q)} S_p(g),$$

para todo $1 \leq p \leq q \leq \infty$. Como consecuencia,

$$S_q^1(t) \leq Ct^{-9/2(1/p-1/q)} S_p^I. \quad (4.80)$$

El mismo resultado sigue siendo cierto cuando f y g están relacionadas como en (4.70). En ese caso,

$$S_q(t, f) \leq C \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/p-1/q)} S_p(s, g) ds. \quad (4.81)$$

Demostración.- Nos centraremos en la demostración de (4.81), ya que la primera parte del lema se prueba de forma similar. A partir de las propiedades de la solución fundamental G , obtenemos que

$$\begin{aligned} & \|n_h(f)(\cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} \\ &= \left\| \frac{1}{(4\pi\sigma d_h(t))^{3/2}} \exp\left\{-\frac{|x|^2}{4\sigma d_h(t)}\right\} *_{x,t} \int_{\mathbb{R}_v^3} g(x - (t+h)v, v, t) dv \right\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} \\ &\leq C \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/p-1/q)} \left\| \int_{\mathbb{R}_v^3} g(x - (s+h)v, v, s) dv \right\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} ds \end{aligned}$$

con $p \leq q$, donde hemos aplicado la desigualdad de Young para estimar la convolución con respecto a la variable x . Tomando ahora el máximo con respecto al parámetro $h \geq 0$ en ambos miembros de esta desigualdad, la afirmación (4.81) queda probada.

Así pues, este resultado proporciona de forma directa una cota para $n^1(x, t)$ en $L^q(\mathbb{R}^3)$:

$$\|n^1(\cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} \leq S_q^1(t) \leq Ct^{-9/2(1/p-1/q)} S_p^I, \quad 1 \leq p \leq q \leq \infty. \quad (4.82)$$

Procedemos a continuación a estimar S_q^2 y, por tanto, $\|n^2(\cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}^3)}$.

Lema 4.3.5. Sean $1 \leq p \leq q \leq \infty$ y $3/2 < r \leq 2$. Entonces se verifica la siguiente estimación:

$$S_q^2(t) \leq C \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/p-1/q)} S_p(s) S_r(s) ds.$$

Demostración.- Identificamos $f = W^2$ y $g = H *_{\xi} W$ en (4.81). Entonces, tenemos que

$$S_q^2(t) \leq C \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/p-1/q)} S_p(s, H *_{\xi} W) ds, \quad (4.83)$$

para todo $1 \leq p \leq q \leq \infty$. Un sencillo cálculo a partir de (4.62) nos conduce a

$$|n_h(H *_{\xi} W)(x, t)| \leq C |n_h(x, t)| \| \mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} V(\cdot, t) \|_{L^1(\mathbb{R}^3)}. \quad (4.84)$$

Finalmente, tenemos también que

$$\begin{aligned} \| \mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} V(\cdot, t) \|_{L^1(\mathbb{R}^3)} &= \| \mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} \left(\frac{1}{|\cdot|} * n(x, t) \right) (\cdot, t) \|_{L^1(\mathbb{R}^3)} \\ &\leq C \| \frac{1}{|\cdot|^2} (\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} n)(\cdot, t) \|_{L^1(\mathbb{R}^3)}. \end{aligned}$$

Estimamos ahora la norma L^1 de $|\cdot|^{-2} (\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} n)(\cdot, t)$ en el interior y en el exterior de la bola B_R de \mathbb{R}^3 con centro el origen y radio R . Por un lado, para el complemento de B_R encontramos que

$$\| \frac{1}{|\cdot|^2} (\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} n)(\cdot, t) \|_{L^1(B_R^c)} \leq C \| \mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} n(\cdot, t) \|_{L^p(\mathbb{R}^3)}$$

para $2 \leq p < 3$. Por tanto,

$$\| \mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} V(\cdot, t) \|_{L^1(B_R^c)} \leq C \| n(\cdot, t) \|_{L^{p'}(\mathbb{R}^3)} \leq C S_{p'}(t). \quad (4.85)$$

Por otro lado, usando argumentos análogos a los anteriores, se tiene que para B_R :

$$\| \frac{1}{|\cdot|^2} (\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} n)(\cdot, t) \|_{L^1(B_R)} \leq C \| \mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} n(\cdot, t) \|_{L^q(\mathbb{R}^3)}$$

con $3 < q \leq \infty$. Entonces, utilizando la desigualdad de interpolación para espacios L^p obtenemos:

$$\|\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} V(\cdot, t)\|_{L^1(B_R)} \leq C \|n(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}^3)}^\theta \|n(\cdot, t)\|_{L^r(\mathbb{R}^3)}^{1-\theta} \leq C S_r(t)^{1-\theta}, \quad (4.86)$$

donde $1/q = \theta + (1 - \theta)/r$ para $3/2 < r \leq 2$. Además, hacemos notar que para $t \in (0, T)$ la cota dominante es la más singular, por lo que se verifica que $S_r(t)^{1-\theta} \leq S_r(t)$. Por consiguiente, a raíz de (4.85) y (4.86) se puede conseguir una estimación de la norma $L^1(\mathbb{R}^3)$ de $\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} V(\cdot, t)$ de la forma

$$\|\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} V(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} \leq C S_r(t) \quad (4.87)$$

con $r > 3/2$ suficientemente próximo. Entonces, combinando (4.84) y (4.87) obtenemos

$$S_p(t, H *_{\xi} W) \leq C S_p(t) S_r(t) \quad (4.88)$$

con $3/2 < r \leq 2$. La demostración concluye al insertar (4.88) en (4.83).

En el siguiente resultado obtenemos las estimaciones de caída dominantes para $S_q(t)$ en intervalos de tiempo acotados. Para ello, como se deduce fácilmente del Lema 4.3.5, es suficiente controlar alguna norma $S_r(t)$ para $r > 3/2$.

Proposición 4.3.6. Sean $p_0 > 9/8$ fijo y W^I el dato inicial para el problema de WFPF tal que $S_{p_0}^I$ está acotado. Entonces existe $T > 0$ dependiente de $S_{p_0}^I$ tal que, para todo $0 < t < T$, la estimación

$$S_q(t) \leq C(T) t^{-9/2(1/p_0 - 1/q)} \quad (4.89)$$

es satisfecha, donde $q = q(p_0)$ es arbitrariamente próximo y mayor que $3/2$ para p_0 suficientemente próximo a $9/8$. Si $p_0 > 3/2$, entonces $S_q(t)$ verifica (4.89) para $q > 3$. Además, si $p_0 > 9/4$ entonces la estimación (4.89) sigue siendo cierta para $q = \infty$.

Demostración.- (4.80) y el Lema 4.3.5 proporcionan la siguiente estimación para $S_q(t)$:

$$S_q(t) \leq C_1 t^{-9/2(1/p_0 - 1/q)} S_{p_0}^I + C_2 \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/p - 1/q)} S_p(s) S_r(s) ds, \quad (4.90)$$

para $1 \leq p \leq q \leq \infty$, donde C_1 y C_2 son constantes positivas (distintas).

Primer paso. Estimación de $S_{p_0}(t)$ y $S_r(t)$.

(4.90) proporciona la siguiente cota para $q = p_0 = p$:

$$S_{p_0}(t) \leq C_1 S_{p_0}^I + C_2 \int_0^t S_{p_0}(s) S_r(s) ds, \quad (4.91)$$

y esta otra para la elección $q = r$ y $p = p_0$:

$$\begin{aligned} S_r(t) &\leq C_1 t^{-9/2(1/p_0-1/r)} S_{p_0}^I \\ &+ C_2 \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/p_0-1/r)} S_{p_0}(s) S_r(s) ds. \end{aligned} \quad (4.92)$$

Definimos

$$K_p(t) = \begin{cases} t^{9/2(1/p_0-1/p)} S_p(t) & \text{si } p > p_0 \\ S_p(t) & \text{si } p \leq p_0 \end{cases}$$

y denotamos por $K_p := \max\{K_p(t), 0 \leq t \leq T\}$. Entonces, de (4.91) y (4.92) se deduce fácilmente que

$$K_{p_0}(t) \leq C_1 S_{p_0}^I + C_2 B(1, 1 - 9/2(1/p_0 - 1/r)) K_{p_0} K_r \quad (4.93)$$

y

$$\begin{aligned} K_r(t) &\leq C_1 S_{p_0}^I \\ &+ C_2 t^{9/2(1/p_0-1/r)} B(1 - 9/2(1/p_0 - 1/r), 1 - 9/2(1/p_0 - 1/r)) K_{p_0} K_r, \end{aligned} \quad (4.94)$$

donde $B(a, b)$ es la función Beta definida por

$$B(a, b) = \int_0^1 (t-s)^{a-1} s^{b-1} ds.$$

Recordamos que, cuando los argumentos a, b son positivos, entonces la función Beta es convergente e igual a $B(a, b) = C(a, b)t^{a+b-1}$, donde $C(a, b)$ es una constante que depende de a y de b .

Ahora es sencillo comprobar que, para $p_0 > 9/8$ fijo, existe $r = r(p_0) > 3/2$ suficientemente próximo a $3/2$ tal que las funciones Beta que aparecen en (4.93) y (4.94) son convergentes.

Finalmente, si definimos $K := \max\{K_{p_0}, K_r\}$, de (4.93) y (4.94) obtenemos:

$$K \leq C_1 S_{p_0}^I + C_2 T^{1-9/2(1/p_0-1/r)} K^2 \quad (4.95)$$

o, equivalentemente,

$$K \leq \frac{1 - \sqrt{1 - 4C_1C_2S_{p_0}^I T^{1-9/2(1/p_0-1/r)}}}{2C_2T^{1-9/2(1/p_0-1/r)}} < \frac{1}{2C_2T^{1-9/2(1/p_0-1/r)}} \quad (4.96)$$

para $S_{p_0}^I$ "suficientemente pequeño". Para ser precisos, supondremos que

$$S_{p_0}^I < \frac{1}{4C_1C_2T^{1-9/2(1/p_0-1/r)}}. \quad (4.97)$$

Entonces, combinando (4.95) y (4.96) obtenemos que $K \leq 2C_1S_{p_0}^I$, con lo que concluye esta parte de la demostración.

Segundo paso. Estimación de $S_q(t)$.

Probamos en primer lugar una estimación de $S_q(t)$ con q suficientemente próximo y mayor que 3. Si elegimos $p = r$ en la fórmula (4.90), tenemos que

$$S_q(t) \leq C_1 t^{-9/2(1/p_0-1/q)} S_{p_0}^I + C_2 \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/r-1/q)} S_r^2(s) ds.$$

Combinando las condiciones de integrabilidad para los parámetros de la función Beta correspondiente obtenemos $1/p_0 - 1/q < 1/3$ y $1/r - 1/q < 2/9$. Esto implica que si $p_0 > 3/2$ y r toma valores en el intervalo $3/2 < r \leq 2$, entonces q es suficientemente próximo y mayor que 3.

Para obtener una cota para $S_\infty(t)$ consideramos ahora $p = q$ en la fórmula (4.90), la cual se convierte en

$$S_q(t) \leq C_1 t^{-9/2(1/p_0-1/q)} S_{p_0}^I + C_2 \int_0^t S_q(s) S_r(s) ds,$$

o en términos de K_q , definido como en la primera parte de la proposición,

$$K_q(t) \leq C_1 S_{p_0}^I + C_2 S_{\tilde{p}_0}^I T^{9/2(1/p_0-1/q)} \int_0^t K_q(s) s^{-9/2(1/p_0+1/\tilde{p}_0-1/q-1/r(\tilde{p}_0))} ds,$$

donde hemos utilizado que $S_{r(\tilde{p}_0)}(t) \leq C S_{\tilde{p}_0}^I t^{-9/2(1/\tilde{p}_0-1/r(\tilde{p}_0))}$ para $\tilde{p}_0 > 9/8$, $3/2 < r(\tilde{p}_0) \leq 2$ (primer paso de la demostración) y $p_0 > \tilde{p}_0$. Esto es posible por interpolación de $S_{\tilde{p}_0}^I$ entre S_1^I y $S_{p_0}^I$. También hemos utilizado la positividad de $9/2(1/p_0 - 1/q)$ para acotar $t^{9/2(1/p_0-1/q)}$ por $T^{9/2(1/p_0-1/q)}$. Entonces, la relación

$$\frac{2}{p_0} < \frac{1}{p_0} + \frac{1}{\tilde{p}_0} < \frac{2}{9} + \frac{1}{q} + \frac{1}{r(\tilde{p}_0)} < \frac{8}{9} + \frac{1}{q}$$

para $9/8 < \tilde{p}_0 < p_0 \leq q$ y el lema de Gronwall nos conducen a

$$K_q(t) \leq CS_{p_0}^I, \quad \text{con } p_0 \leq q \leq q(p_0) \quad \text{y} \quad \frac{2}{p_0} < \frac{8}{9} + \frac{1}{q}, \quad (4.98)$$

donde C es una constante positiva que depende de T . Por tanto, para $p_0 > 9/4$ conseguimos $q = \infty$. Esto concluye la demostración.

Este resultado será muy útil para discutir el efecto regularizante del sistema sobre la densidad y el potencial en función de la elección de p_0 , a partir de la hipótesis $W^I \in L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3) \cap S_{p_0}$. Estas propiedades de regularidad (o equivalentemente las propiedades de compacidad que estas conllevan) son, por supuesto, las herramientas fundamentales para probar las cotas de caída con respecto al tiempo de las soluciones.

Recordamos ahora un resultado general sobre integrales singulares de tipo convolución cuya demostración puede encontrarse en [93]. Adaptaremos el enunciado de este resultado al caso particular en que $V = \frac{\gamma}{4\pi|x|} * n$ es el potencial de Hartree autoconsistente que resuelve la ecuación de Poisson acoplada con la ecuación de Wigner–Fokker–Planck. La primera parte de este resultado es una consecuencia inmediata de la desigualdad de Hardy–Littlewood–Sobolev. La segunda parte nos da información sobre el ritmo de caída con respecto al tiempo del potencial en L^∞ , en términos de las cotas de caída obtenidas para las normas $S_p(t)$. La última parte se obtiene como consecuencia de la primera y del teorema de regularidad elíptica de Agmon–Douglis–Nirenberg.

Lema 4.3.7. *Las siguientes afirmaciones son satisfechas:*

(i) *Si $1 < p < q < \infty$ son tales que*

$$\frac{1}{q} = \frac{1}{p} - \frac{2}{3}$$

y $n(\cdot, t) \in L^p(\mathbb{R}^3)$, entonces $V(\cdot, t) \in L^q(\mathbb{R}^3)$ y

$$\|V(\cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} \leq C(p, q) \|n(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)},$$

donde $C(p, q)$ es una constante positiva que depende de p y de q . Además, si $n(\cdot, t) \in L^p(\mathbb{R}^3)$ con

$$\frac{1}{q} = \frac{1}{p} - \frac{1}{3},$$

entonces $\nabla_x V(\cdot, t) \in L^q(\mathbb{R}^3)^3$ y

$$\|\nabla_x V(\cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}^3)^3} \leq C(p, q) \|n(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}.$$

(ii) Si $1 \leq p < 3/2 < q \leq \infty$, $1/q + 1/q' = 1$ y $n(\cdot, t) \in L^p(\mathbb{R}^3) \cap L^q(\mathbb{R}^3)$, entonces

$$V = \frac{\gamma}{4\pi} \frac{1}{|x|} * n \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$$

y

$$\|V(\cdot, t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \leq C(p, q) \|n(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}^\theta \|n(\cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}^3)}^{1-\theta},$$

donde

$$\theta = \frac{1/q' - 1/3}{1/p - 1/q}.$$

Además, si $n(\cdot, t) \in L^p(\mathbb{R}^3) \cap L^q(\mathbb{R}^3)$ con $1 \leq p < 3 < q \leq \infty$, entonces

$$\nabla_x V = -\frac{\gamma}{4\pi} \frac{x}{|x|^3} * n \in L^\infty(\mathbb{R}^3)^3$$

y

$$\|\nabla_x V(\cdot, t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)^3} \leq C(p, q) \|n(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}^\theta \|n(\cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}^3)}^{1-\theta}$$

con

$$\theta = \frac{1/q' - 2/3}{1/p - 1/q}.$$

(iii) Si $n(\cdot, t) \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^p(\mathbb{R}^3)$ con $p > 3$, entonces $V(\cdot, t) \in W^{2,p}(\mathbb{R}^3)$. Además se verifica

$$\|V(\cdot, t)\|_{W^{2,p}(\mathbb{R}^3)} \leq C(p) \|n(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}.$$

Algunas propiedades de regularidad *a priori* para la densidad de posición y para el potencial son obtenidas en el siguiente resultado como consecuencia directa de las estimaciones establecidas en la Proposición 4.3.6 y en el Lema 4.3.7. Estas propiedades de regularidad se deducen bajo la hipótesis de que la norma $S_{p_0}^I$ está acotada para algún $p_0 > 9/8$ fijo, de forma que $n^I \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^{p_0}(\mathbb{R}^3)$.

Proposición 4.3.8. Sea $p_0 > 9/8$ fijo tal que $S_{p_0}^I$ está acotado para un dato inicial dado $W^I \in L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3) \cap S_{p_0}$. Entonces, existe $T = T(S_{p_0}^I) > 0$ tal que las siguientes propiedades de regularidad son satisfechas para $0 < t < T$:

- (i) $\|V(\cdot, t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \leq Ct^{3-9/2p_0}$.
- (ii) Si $p_0 > 3/2$, entonces $\nabla_x V \in L^\infty(\mathbb{R}^3)^3$ y
- $$\|\nabla_x V(\cdot, t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)^3} \leq Ct^{3/2-9/2p_0}.$$
- (iii) Si $p_0 > 9/4$, entonces $n \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ y
- $$\|n(\cdot, t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \leq Ct^{-9/2p_0},$$

donde C denota una constante positiva que depende de T .

Este resultado se deduce de forma inmediata a partir del Lema 4.3.7 y la Proposición 4.3.6. Finalmente, como consecuencia del efecto regularizante del núcleo de Fokker-Planck, conseguimos también la siguiente cota para la norma L^q de la función de Wigner, para todo $q \geq 1$.

Proposición 4.3.9. Sea $p_0 > 9/8$ fijo tal que $S_{p_0}^I$ está acotada y se verifica la relación

$$6/p < 6/q + 1 - 9/2(1/p_0 - 1/r) \quad (4.99)$$

para todo $3/2 < r \leq 2$ y $1 \leq p \leq q \leq \infty$. Entonces, la estimación

$$\|W(\cdot, \cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \leq Ct^{-6(1/p-1/q)} \|W^I\|_{L^p(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}$$

es satisfecha en $(0, T)$, donde C es una constante positiva que depende de T .

Demostración.- Una aplicación directa del Lema 4.3.3 nos conduce a

$$\begin{aligned} \|W(\cdot, \cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} &\leq C_1 t^{-6(1/p-1/q)} \|W^I\|_{L^p(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \\ &+ C_2 \int_0^t S_r(s) \|W(\cdot, \cdot, s)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} ds, \end{aligned} \quad (4.100)$$

donde hemos estimado

$$\|(H *_{\xi} W)(\cdot, \cdot, s)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \leq C S_r(s) \|W(\cdot, \cdot, s)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}$$

por medio de la desigualdad de Young. Luego de la Proposición 4.3.6 se deduce que (4.100) se transforma en

$$\|W(\cdot, \cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \leq C_1 t^{-6(1/p-1/q)} \|W^I\|_{L^p(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}$$

$$+ C_2 S_{p_0}^I \int_0^t s^{-9/2(1/p_0-1/r)} \|W(\cdot, \cdot, s)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} ds. \quad (4.101)$$

Definimos

$$N_{p,q}(t) := t^{6(1/p-1/q)} \|W(\cdot, \cdot, t)\|_{L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}.$$

Entonces, a partir de (4.101) se obtiene fácilmente la estimación

$$\begin{aligned} N_{p,q}(t) &\leq C_1 \|W^I\|_{L^p(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \\ &+ C_2 S_{p_0}^I T^{6(1/p-1/q)} \int_0^t s^{-9/2(1/p_0-1/r)-6(1/p-1/q)} N_{p,q}(s) ds. \end{aligned}$$

La demostración acaba como consecuencia de la desigualdad de Gronwall.

4.3.3 Sucesión de soluciones aproximadas y paso al límite

Definimos a continuación una sucesión de problemas linealizados que aproximan formalmente a la ecuación de WFPF. Para cada $n \in \mathbb{N}$ consideramos la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} W^{n+1} + (\xi \cdot \nabla_x) W^{n+1} - \sigma \Delta_\xi W^{n+1} = -\theta[V^n] W^n,$$

con

$$V^n(x, t) = \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W^n(x, \xi, t) d\xi$$

y $W^n(x, \xi, 0) = W^I(x, \xi)$ para todo $n \geq 1$. Como es habitual, consideramos $W^0(x, \xi, t) = W^I(x, \xi)$. En formulación integral, la sucesión W^n se puede definir iterativamente mediante

$$\begin{aligned} W^{n+1}(x, \xi, t) &= \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_{\mathbb{R}_z^3} G(x, \xi, z, v, t) W^I(z, v) dz dv \\ &+ \int_0^t \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_{\mathbb{R}_z^3} G(x, \xi, z, v, s) (H^n *_{\xi} W^n)(z, v, t-s) dz dv ds, \end{aligned} \quad (4.102)$$

donde hemos usado la forma convolutiva del término no lineal, con $H^n = H(W^n)$.

El siguiente paso consiste en calcular el límite cuando $n \rightarrow \infty$. Para ello probaremos en primer lugar que $\{W^n\}_{n \in \mathbb{N}}$ es una sucesión de Cauchy en un espacio adecuado para dar sentido a la solución límite. Observemos que las estimaciones obtenidas en los Lemas 4.3.4 y 4.3.5 y en las Proposiciones 4.3.6 y 4.3.8 siguen siendo válidas independientemente de n .

Lema 4.3.10. *Supongamos que W^I pertenece a $L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3) \cap S_{p_0}$ con $p_0 > 9/8$ fijo. Entonces $\{W^n\}_{n \in \mathbb{N}}$ es una sucesión de Cauchy en $L^\infty((0, T); L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3) \cap S_r)$, con $0 < r - 3/2$ suficientemente pequeño.*

Demostración.- Consideramos la diferencia $W^{n+1} - W^n$ en la norma de los espacios $L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ y S_r , con $3/2 < r \leq 2$. Podemos estimar

$$\begin{aligned} & S_r(W^{n+1} - W^n, t) \\ & \leq C \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/p-1/r)} S_p(H^n *_{\xi} W^n - H^{n-1} *_{\xi} W^{n-1}, s) ds \end{aligned}$$

conforme al Lema 4.3.4. Introduciendo ahora el término $H^n *_{\xi} W^{n-1}$ en la expresión anterior deducimos que

$$\begin{aligned} & S_q(W^{n+1} - W^n, t) \\ & \leq C \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/p-1/q)} \{S_p(W^{n-1}, s) S_r(W^n - W^{n-1}, s) \\ & \quad + S_p(W^n - W^{n-1}, s) S_r(W^n, s)\} ds \end{aligned}$$

con $1 \leq p \leq q \leq \infty$, como en el Lema 4.3.5. Siguiendo un razonamiento similar al de la Proposición 4.3.6, hacemos

$$K_p^n(t) = \begin{cases} t^{9/2(1/p_0-1/p)} S_p(W^n - W^{n-1}, t) & \text{si } p > p_0 \\ S_p(W^n - W^{n-1}, t) & \text{si } p \leq p_0 \end{cases}$$

y denotamos por $K_p^n := \max\{K_p^n(t), 0 \leq t \leq T\}$. Aplicando ahora exactamente las mismas ideas que las utilizadas en la demostración de la Proposición 4.3.6, obtenemos que

$$K^{n+1} \leq C S_{p_0}^I T^{1-9/2(1/p_0-1/r)} K^n.$$

Si iteramos esta cota llegamos a que $K^{n+1} \leq (C S_{p_0}^I T^{1-9/2(1/p_0-1/r)})^{n+1} K^0$, donde puede comprobarse fácilmente que la constante $C S_{p_0}^I T^{1-9/2(1/p_0-1/r)}$ es ≤ 1 a través de la condición (4.97).

Considerando ahora la misma descomposición que antes para el término no lineal y teniendo en cuenta las propiedades de G establecidas en el Lema 4.3.1 (i), tenemos:

$$\begin{aligned} & \|(W^{n+1} - W^n)(\cdot, \cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \\ & \leq C \int_0^t \|(W^n - W^{n-1})(\cdot, \cdot, s)\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} S_r(W^{n-1}, s) ds \end{aligned}$$

$$\leq C(T) \int_0^t s^{-9/2(1/p_0-1/r)} \|(W^n - W^{n-1})(\cdot, \cdot, s)\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} ds,$$

donde hemos utilizado también la estimación dada por la Proposición 4.3.6.

Si finalmente denotamos por

$$J_1^n = \max \{ \|(W^{n+1} - W^n)(\cdot, \cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}, 0 \leq t \leq T \},$$

encontramos que

$$J_1^n \leq C(T) T^{1-9/2(1/p_0-1/r)} J_1^{n-1},$$

con lo que concluye la demostración.

Este resultado garantiza que la sucesión de soluciones aproximadas W^n converge hacia una cierta función W en $L^\infty((0, T); L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3) \cap S_r)$, lo que implica que $n(W^n)$ converge hacia $n(W)$ en $L^\infty((0, T); L^r(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$, con $r > 3/2$. Como consecuencia, utilizando que la norma $\|W^n - W\|_{L^\infty((0, T); L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))}$ está acotada para n suficientemente grande y el Lema 4.3.7, se deduce que la sucesión $V^n = \frac{\gamma}{4\pi} \frac{1}{|x|} * n(W^n)$ converge hacia $V = \frac{\gamma}{4\pi} \frac{1}{|x|} * n(W)$ en $L^\infty(\mathbb{R}_x^3)$, para todo $t > 0$. Como W^{n+1} es una solución de la ecuación integral (4.102), la propiedad de Cauchy probada en el Lema 4.3.10 implica que W verifica la misma ecuación integral, es decir:

$$\begin{aligned} W(x, \xi, t) &= \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} G(x, \xi, z, v, t) W^I(z, v) dz dv \\ &+ \int_0^t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} G(x, \xi, z, v, s) (H *_{\xi} W)(z, v, t-s) dz dv ds \end{aligned}$$

después de pasar al límite en (4.102). Como consecuencia, W es una solución integral del problema de WFPF.

Por consiguiente, el paso al límite cuando n tiende a infinito queda justificado y hemos probado el siguiente resultado de existencia de soluciones:

Teorema 4.3.11. *Sea $W^I \in L^1 \cap L^p(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ la condición inicial asociada al problema de WFPF tal que el promedio de densidad inicial $S_{p_0}^I$ está acotado para algún $p_0 > 9/8$. Entonces el problema de WFPF admite una solución integral $W \in L^\infty((0, T); L^1 \cap L^q(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ definida sobre un intervalo de tiempo maximal $(0, T)$, donde p_0, p y q están relacionados como en (4.99).*

Asímismo, la densidad y el potencial satisfacen las propiedades de regularidad adicionales

$$V(\cdot, t) \in L^\infty(\mathbb{R}^3), \quad \nabla_x V(\cdot, t) \in L^q(\mathbb{R}^3)^3, \quad n(\cdot, t) \in L^p(\mathbb{R}^3),$$

tales que $q = q(p_0)$ y $1/q = 1/p - 1/3$. Además, si $p_0 > 3/2$ entonces $\nabla_x V \in L^\infty(\mathbb{R}^3)^3$ y si $p_0 > 9/4$ entonces $n \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, con las cotas establecidas en la Proposición 4.3.8.

Aquí T depende de σ , p_0 y W^I . Además, T es arbitrariamente grande para datos iniciales W^I con $S_{p_0}^I$ suficientemente pequeño.

Puntualizamos que la condición de “pequeñez” sobre el tamaño del dato inicial que necesitamos para probar la existencia de soluciones en $(0, T)$, con T grande, procede de la cota (4.97) requerida para $S_{p_0}^I$ en la demostración de la Proposición 4.3.6 (y utilizada para conseguir una estimación de caída para las normas $S_q(t)$).

Observación.- También podríamos haber introducido una teoría de existencia de soluciones en el marco más débil representado por los espacios $L_\xi^1(L_x^p) = L^1(\mathbb{R}_\xi^3; L^p(\mathbb{R}_x^3))$, pero esto se escapa de nuestros propósitos generales. De la misma forma, también se dispone de una teoría de semigrupos en L^2 para el problema de WFPF como consecuencia del teorema de Lumer–Phillips, tal como se desprende de la disipatividad del operador cinético lineal de Fokker–Planck. En este caso, considerando el término no lineal como una perturbación lipschitziana de la ecuación cinética de Fokker–Planck, se consigue existencia y unicidad de una solución integral en L^2 (ver [84]).

4.4 Unicidad y estabilidad

Demostramos a continuación un resultado de unicidad. Supongamos que existen dos soluciones distintas W_1 y W_2 del problema de WFPF que satisfacen las cotas probadas en la sección anterior. Definimos

$$w(x, \xi, t) = W_1(x, \xi, t) - W_2(x, \xi, t).$$

Es claro que w resuelve el siguiente problema:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)w + \theta[V_1 - V_2]W_1 + \theta[V_2]w = \sigma \Delta_\xi w, \quad (4.103)$$

$$w(x, \xi, 0) = 0, \quad (4.104)$$

$$n(w)(x, t) = \int_{\mathbb{R}_\xi^3} w(x, \xi, t) d\xi, \quad (4.105)$$

donde $V_1 = V(W_1)$ y $V_2 = V(W_2)$.

Si consideramos ahora el problema (4.103)–(4.105) como una perturbación no lineal de una ecuación del calor, encontramos la siguiente formulación integral para la función de Wigner w :

$$\begin{aligned} w(x, \xi, t) = & - \int_0^t \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_{\mathbb{R}_z^3} G(x, \xi, z, v, s) \theta[V_1 - V_2] W_1(z, v, t - s) dz dv ds \\ & - \int_0^t \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_{\mathbb{R}_z^3} G(x, \xi, z, v, s) \theta[V_2] w(z, v, t - s) dz dv ds, \end{aligned}$$

por lo que la densidad de partículas estará representada por

$$n(w)(x, t) = \int_0^t s^{-\frac{9}{2}} \mathcal{N} \left(\frac{x}{\sqrt{(2/3)\sigma s^3}} \right)$$

$$*_x \int_{\mathbb{R}_v^3} (H(V_1 - V_2) *_\xi W_1 + H(V_2) *_\xi w)(x - sv, v, t - s) dv ds,$$

donde $H(f)$ está definida como en (4.61).

Si ahora aplicamos el Lema 4.3.5 con $p = q = r$ obtenemos que

$$S_r(w, t) \leq C(T) \int_0^t s^{-9/2(1/p_0 - 1/r)} S_r(w, s) ds, \quad (4.106)$$

lo cual implica que $S_r(w, t) = 0$ para todo $t > 0$ por medio del lema de Gronwall. Finalmente podemos aplicar el Lema 4.3.3 con $p = q$ y $g = H(V_1 - V_2) *_\xi W_1 + H(V_2) *_\xi w$ y la desigualdad de Gronwall para deducir, como en la Proposición 4.3.9, que $W_1 = W_2$, y por tanto la existencia de una única solución integral W del sistema de WFPF que satisface las estimaciones probadas en la Sección 3.

Los mismos argumentos utilizados hasta ahora nos proporcionan también la estabilidad de soluciones integrales con respecto a perturbaciones del dato inicial en S_{p_0} , con la salvedad de que en el segundo miembro de (4.106) aparece también un término constante con respecto al tiempo que depende de $S_{p_0}(W_1^I - W_2^I)$, lo que nos permite concluir la estabilidad a través de la desigualdad de Gronwall.

4.5 Comportamiento asintótico cuando $t \rightarrow \infty$

El objetivo de esta sección es dar una descripción del comportamiento asintótico con respecto al tiempo de las soluciones globales del sistema de WFPF sin fricción en tres dimensiones. En particular, demostraremos que la distribución de cuasi-probabilidad del sistema de partículas converge para tiempos grandes (en un sentido que será precisado más adelante) hacia un múltiplo constante de la función de Green G , definida por (4.65) y (4.66), asociada a la ecuación cinética lineal de Fokker-Planck. Concretamente, bajo ciertas hipótesis de regularidad sobre la solución (W, V) del problema de WFPF probaremos que $W(x, \xi, t)$ se comporta como $QG(x, \xi, t)$ cuando $t \rightarrow \infty$, donde la constante Q representa a la carga total del sistema. Esto significa que el efecto cuántico debido al término del potencial coulombiano se desvanece cuando $t \rightarrow \infty$.

En esta sección consideramos una solución $W(t)$ definida para $t \in [0, \infty)$, la cual satisface las siguientes condiciones:

$$\|W\|_{L^\infty((0, \infty); L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))} \leq C \|W^I\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}, \quad (4.107)$$

$$M_{p_0} = \sup\{S_{p_0}(t), 0 \leq t < \infty\} < \infty \quad (4.108)$$

para $p_0 > 9/8$ y

$$M_r = \sup\{t^{9/2(1/p_0-1/r)} S_r(t), 0 \leq t < \infty\} < \infty \quad (4.109)$$

para algún $3/2 < r \leq 2$. En la Sección 3 se demostró que estas cotas son satisfechas localmente en tiempo.

4.5.1 Cambio de escala y estimaciones a priori

Para todo $\epsilon > 0, t \geq 0$ y $x, \xi \in \mathbb{R}^3$ definimos la siguiente sucesión de soluciones reescaladas:

$$W_\epsilon(x, \xi, t) = \epsilon^{-12} W(\epsilon^{-3}x, \epsilon^{-1}\xi, \epsilon^{-2}t), \quad (4.110)$$

que conservan los mismos factores de autosemejanza que la solución fundamental G , como se anunció en el Lema 4.3.1 (iii). También denotamos por $W_\epsilon^I(x, \xi) = W_\epsilon(x, \xi, 0)$. Entonces, después de un simple cambio de variables podemos deducir la siguiente expresión para la densidad reescalada:

$$n_\epsilon(x, t) = n(W_\epsilon)(x, t) = \epsilon^{-9} n(\epsilon^{-3}x, \epsilon^{-2}t). \quad (4.111)$$

Además, hacemos

$$V_\epsilon = \frac{\gamma}{4\pi|x|} * n_\epsilon, \quad (4.112)$$

de donde se deduce que

$$V_\epsilon(x, t) = \epsilon^{-3} V(\epsilon^{-3}x, \epsilon^{-2}t) \quad (4.113)$$

al introducir (4.111) en la ecuación (4.112). De la misma forma, denotamos por W_ϵ^H a la función de Husimi reescalada definida por

$$W_\epsilon^H = W_\epsilon *_{x, \xi} \Gamma_\epsilon(x, \xi),$$

donde Γ_ϵ es la función gaussiana

$$\Gamma_\epsilon(x, \xi) = \epsilon^{-12} \pi^{-3} e^{-(|\epsilon^{-3}x|^2 + |\epsilon^{-1}\xi|^2)},$$

de modo que

$$W_\epsilon^H(x, \xi, t) = \epsilon^{-12} W^H(\epsilon^{-3}x, \epsilon^{-1}\xi, \epsilon^{-2}t).$$

Algunos cálculos mecánicos conducen al siguiente resultado.

Lema 4.5.1. *Para todo $\epsilon > 0, t > 0$ y $1 \leq p \leq \infty$, las siguientes igualdades son satisfechas:*

- (i) $\|W_\epsilon(\cdot, \cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} = \epsilon^{-12/p'} \|W(\cdot, \cdot, \epsilon^{-2}t)\|_{L^p(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}.$
- (ii) $\|n_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} = \epsilon^{-9/p'} \|n(\cdot, \epsilon^{-2}t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}.$
- (iii) $\|V_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} = \epsilon^{9/p-3} \|V(\cdot, \epsilon^{-2}t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}.$

Derivamos ahora la ecuación satisfecha por el par reescalado (W_ϵ, V_ϵ) .

Lema 4.5.2. *Sea el par (W, V) una solución débil de la ecuación de WFPF. Entonces, para todo $\epsilon > 0$ fijo, (W_ϵ, V_ϵ) es una solución débil del problema*

$$\frac{\partial W_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) W_\epsilon + \epsilon \theta_\epsilon[V_\epsilon] W_\epsilon = \sigma \Delta_\xi W_\epsilon \quad (4.114)$$

en $\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3 \times (0, T)$, donde el operador pseudo-diferencial reescalado $\theta_\epsilon[V_\epsilon]$ viene dado por

$$\begin{aligned} \theta_\epsilon[V_\epsilon] W_\epsilon(x, \xi, t) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_y^3} \left(V_\epsilon(x + \epsilon^4 \frac{y}{2}, t) - V_\epsilon(x - \epsilon^4 \frac{y}{2}, t) \right) \\ &\quad \times W_\epsilon(x, \eta, t) e^{-i(\xi - \eta) \cdot y} dy d\eta. \end{aligned} \quad (4.115)$$

Demostración.- Para que (W_ϵ, V_ϵ) sea una solución débil de (4.114) debemos probar la igualdad

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) \varphi + \sigma \Delta_\xi \varphi \right) d\xi dx dt - \epsilon \int_0^T \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \theta_\epsilon[V_\epsilon] W_\epsilon \varphi d\xi dx dt - \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon^I(x, \xi) \varphi(x, \xi, 0) d\xi dx = 0 \quad (4.116)$$

para toda función test $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3 \times (0, T))$. Para ello introducimos la familia de funciones test

$$\Phi(x, \xi, t) = \varphi(\epsilon^{-3}x, \epsilon^{-1}\xi, \epsilon^{-2}t)$$

en la ecuación de WFPF original (en formulación débil), de forma que la ecuación (4.116) se obtiene fácilmente después de hacer el cambio de variables $x \leftarrow \epsilon^{-3}x, \xi \leftarrow \epsilon^{-1}\xi, t \leftarrow \epsilon^{-2}t$.

Denotamos por WFPF $_\epsilon$ al problema reescalado

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) W_\epsilon + \epsilon \theta_\epsilon[V_\epsilon] W_\epsilon &= \sigma \Delta_\xi W_\epsilon, \\ \theta_\epsilon[V_\epsilon] W_\epsilon(x, \xi, t) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_y^3} \left(V_\epsilon(x + \epsilon^4 \frac{y}{2}, t) - V_\epsilon(x - \epsilon^4 \frac{y}{2}, t) \right) \\ &\quad \times W_\epsilon(x, \eta, t) e^{-i(\xi - \eta) \cdot y} dy d\eta, \\ V_\epsilon(x, t) &= \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}_y^3} \frac{n_\epsilon(y, t)}{|x - y|} dy, \\ W_\epsilon(x, \xi, 0) &= W_\epsilon^I(x, \xi), \\ n_\epsilon(x, t) &= \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon(x, \xi, t) d\xi. \end{aligned}$$

Como ocurre para el sistema no reescalado, observamos que W_ϵ admite una representación integral en dos partes:

$$W_\epsilon = W_\epsilon^1 + W_\epsilon^2,$$

con W_ϵ^k ($k = 1, 2$) definidos como en la fórmula (4.68) salvo la acción natural del grupo de escala, para lo que se han tenido en cuenta la autosemejanza de G

establecida en el Lema 4.3.1 (iii) y la expresión (4.115) que define al operador pseudo-diferencial reescalado.

La sucesión de soluciones reescaladas W_ϵ nos informa sobre el comportamiento con respecto a tiempos grandes de las soluciones del problema de WFPF de la siguiente forma: en primer lugar probamos que $\{W_\epsilon\}_\epsilon$ converge hacia una cierta función g en un sentido apropiado cuando $\epsilon \rightarrow 0$. En efecto, después de pasar al límite en el problema reescalado (4.114) cuando el parámetro de escala $\epsilon \rightarrow 0$, vemos cómo el término no lineal es asintóticamente simplificado y podemos identificar g como la única solución distribucional de la ecuación cinética lineal de Fokker-Planck sujeta a la condición inicial $g(x, \xi, 0) = Q\delta_0$, es decir, $g = QG$. Ahora es suficiente observar que la convergencia $W_\epsilon \rightarrow g$ equivale a

$$t^6 W(t^{\frac{3}{2}}x, t^{\frac{1}{2}}\xi, t) \rightarrow g(x, \xi, 1) \quad \text{cuando } t \rightarrow \infty$$

al hacer $t = 1$ y $\epsilon = t^{-\frac{1}{2}}$.

Para desarrollar este esquema necesitaremos de forma esencial estimaciones uniformes con respecto a ϵ que nos permitan pasar al límite. Adoptando la misma notación (afectada por el grupo de escala) que en la Sección 3, las densidades reescaladas $n_\epsilon^k = n(W_\epsilon^k)$ se obtienen de forma análoga que las correspondientes al sistema no reescalado.

En el lema siguiente recogemos algunas extensiones para el problema reescalado WFPF $_\epsilon$ de las propiedades probadas para el problema de WFPF original. Estas propiedades se transfieren de forma directa a la ecuación reescalada salvo los cambios obvios en las demostraciones ya realizadas. Sea

$$S_{p,\epsilon}^k(t) = \max\{\|n_{\epsilon,h}^k(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}, h \geq 0\}$$

para todo $1 \leq p \leq \infty$, y denotemos por

$$S_{p,\epsilon}^I = \max\{\|n_{\epsilon,h}^I\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}, h \geq 0\}.$$

Lema 4.5.3. *Las siguientes afirmaciones son satisfechas:*

(i) *Sea $1 \leq q \leq \infty$. Entonces*

$$S_{q,\epsilon}(t) = \epsilon^{-9/q} S_q(\epsilon^{-2}t).$$

(ii) *Sean $1 \leq p \leq q \leq \infty$. Entonces*

$$S_{q,\epsilon}^1(t) \leq Ct^{-9/2(1/p-1/q)} S_{p,\epsilon}^I.$$

(iii) Sean $1 \leq p \leq q \leq \infty$. Entonces

$$S_{q,\epsilon}^2(t) \leq C\epsilon \int_0^t (t-s)^{-9/2(1/p-1/q)} S_{p,\epsilon}(s) S_{r,\epsilon}(s) ds.$$

(iv) Si $\epsilon S_{p_0,\epsilon}^I$ es suficientemente pequeño para un $p_0 > 9/8$ fijo, entonces existe $T = T(S_{p_0,\epsilon}^I) > 0$ tal que

$$S_{q,\epsilon}(t) \leq C(T)t^{-9/2(1/p_0-1/q)} \quad (4.117)$$

para todo $9/8 < q \leq r$ y $0 < t < T$. Además, si $p_0 > 3/2$ entonces $S_q(t)$ satisface (4.117) para $q > 3$. Asimismo, si $p_0 > 9/4$ entonces la relación (4.117) continúa siendo válida para $q = \infty$.

Demostración.- La afirmación (i) se deduce a partir de un cálculo directo. Las estimaciones (ii), (iii) y (iv) se demuestran exactamente como para el caso no reescalado, cuando consideramos la correspondiente representación integral para W_ϵ :

$$\begin{aligned} W_\epsilon(x, \xi, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} G(x, \xi, z, v, t) W_\epsilon^I(z, v) dz dv \\ &- \epsilon \int_0^t \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} G(x, \xi, z, v, s) \theta_\epsilon[V_\epsilon] W_\epsilon(z, v, t-s) dz dv ds. \end{aligned}$$

Antes de probar las propiedades de convergencia de W_ϵ que nos permitan pasar rigurosamente al límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$, pondremos de manifiesto cómo el término no lineal del problema reescalado $WPF P_\epsilon$ será simplificado asintóticamente. Para ello usaremos esencialmente las propiedades de escala del sistema y las cotas establecidas en el Lema 4.5.3. Sin embargo, en primer lugar necesitamos el siguiente resultado basado en la naturaleza regularizante de la ecuación.

Lema 4.5.4. Sean $p_0 > 9/8$ fijo y $W^I \in L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ tales que las hipótesis (4.107), (4.108) y (4.109) son satisfechas. Entonces se verifica la estimación

$$S_{p_0,\epsilon}(t) \leq C(W^I, t)\epsilon^{-9/p'}$$

para $1 < p < 9/8$, $t > 0$ y ϵ suficientemente pequeño, donde $C(W^I, t)$ es una constante positiva que depende del dato inicial W^I y del tiempo, pero que no depende de ϵ .

Además, para $0 < \delta < t$ se verifica

$$\|\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} V_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} \leq C(W^I, \delta)(t - \delta)^{-9/2(1/p_0 - 1/\tau)} \epsilon^{-9/p'}.$$

Demostración.- En primer lugar estimamos $S_{p_0, \epsilon}(t)$. Para ello elegimos $1 < \tilde{p} < p < p_0$ y utilizamos el Lema 4.5.3 (ii) y (iii), obteniendo la siguiente cota:

$$\begin{aligned} S_{p_0, \epsilon}(t) &\leq C_1 t^{-9/2(1/p - 1/p_0)} S_{p, \epsilon}^I + C_2 \epsilon \int_0^t (t - s)^{-9/2(1/\tilde{p} - 1/p_0)} S_{\tilde{p}, \epsilon}(s) S_{r, \epsilon}(s) ds \\ &\leq C_1 t^{-9/2(1/p - 1/p_0)} S_{p, \epsilon}^I + C_2 \epsilon \int_0^t (t - s)^{-9/2(1/\tilde{p} - 1/p_0)} s^{-9/2(1/p_0 - 1/\tau)} \\ &\quad \times \max\{S_{\tilde{p}, \epsilon}(s), 0 \leq s \leq t\} \max\{s^{9/2(1/p_0 - 1/\tau)} S_{r, \epsilon}(s), 0 \leq s \leq t\} ds. \end{aligned} \quad (4.118)$$

Es fácil observar que

$$\begin{aligned} \max\{S_{\tilde{p}, \epsilon}(s), 0 \leq s \leq t\} &= \epsilon^{-9/\tilde{p}'} \max\{S_{\tilde{p}}(\epsilon^{-2}s), 0 \leq s \leq t\} \\ &= \epsilon^{-9/\tilde{p}'} \max\{S_{\tilde{p}}(\tau), 0 \leq \tau \leq \epsilon^{-2}t\} \stackrel{def}{=} M_{\tilde{p}, \epsilon} \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \max\{s^{9/2(1/p_0 - 1/\tau)} S_{r, \epsilon}(s), 0 \leq s \leq t\} \\ = \epsilon^{-9/p_0'} \max\{\tau^{9/2(1/p_0 - 1/\tau)} S_r(\tau), 0 \leq \tau \leq \epsilon^{-2}t\} \stackrel{def}{=} M_{r, \epsilon}. \end{aligned}$$

Entonces la estimación (4.118) se transforma en

$$S_{p_0, \epsilon}(t) \leq C_1 t^{-9/2(1/p - 1/p_0)} \epsilon^{-9/p'} S_p^I + C_2 \epsilon t^{1 - 9/2(1/\tilde{p} - 1/\tau)} M_{\tilde{p}, \epsilon} M_{r, \epsilon}$$

tras algunos cálculos simples, para lo que se ha utilizado la propiedad de escala enunciada en el Lema 4.5.3 (i).

Estimamos ahora $M_{\tilde{p}, \epsilon}$ y $M_{r, \epsilon}$. Un sencillo argumento de interpolación para la norma $S_{\tilde{p}}$ entre S_1 y S_{p_0} nos proporciona la siguiente cota:

$$M_{\tilde{p}, \epsilon} \leq C \|W^I\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} M_{p_0} \epsilon^{-9/\tilde{p}'},$$

mientras que para $M_{r, \epsilon}$ tenemos que

$$M_{r, \epsilon} \leq M_r \epsilon^{-9/p_0'}.$$

Por tanto,

$$S_{p_0, \epsilon}(t) \leq C_1 t^{-9/2(1/p-1/p_0)} \epsilon^{-9/p'} S_p^I \\ + C_2 t^{1-9/2(1/\bar{p}-1/r)} \|W^I\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} M_{p_0} M_r \epsilon^{1+9(1/p'-1/\bar{p}'-1/p_0')} \epsilon^{-9/p'}$$

y la demostración de la primera afirmación concluye al identificar

$$C(W^I, t) = C_1 t^{-9/2(1/p-1/p_0)} S_p^I + C_2 t^{1-9/2(1/\bar{p}-1/r)} \|W^I\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} M_{p_0} M_r.$$

La demostración de la segunda afirmación resulta de aplicar el Lema 4.5.3 (iv) con condición inicial dada por $W_\epsilon(x, \xi, t - \delta)$ en vez de $W_\epsilon^I(x, \xi)$. Lo primero que hemos de comprobar es que la cantidad $\epsilon S_{p_0, \epsilon}(t - \delta)$ es suficientemente pequeña, lo cual está garantizado ya que

$$\epsilon S_{p_0, \epsilon}(t - \delta) \leq C(W^I, \delta) \epsilon^{1-9/p'}$$

para $1 < p < 9/8$, por lo que $1 - 9/p' > 0$. Como consecuencia, el Lema 4.5.3 (iv) nos conduce a

$$\|\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} V_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} \leq C S_{r, \epsilon}(t) \leq C \delta^{-9/2(1/p_0-1/r)} S_{p_0, \epsilon}(t - \delta).$$

Finalmente, el resultado se sigue como consecuencia de la primera parte del lema.

Estas cotas nos dan el ritmo máximo de caída (con respecto al grupo de escala) del término pseudo-diferencial de la ecuación reescalada (4.114). Si ahora reformulamos este término como un producto de convolución, es decir, $-\theta_\epsilon[V_\epsilon]W_\epsilon = H_\epsilon *_{\xi} W_\epsilon$ con

$$H_\epsilon(x, \xi, t) = i \mathcal{F}_{y \rightarrow \xi}^{-1} \left(V_\epsilon(x + \epsilon^4 \frac{y}{2}, t) - V_\epsilon(x - \epsilon^4 \frac{y}{2}, t) \right) \\ = 16 \epsilon^{-12} \operatorname{Re} \left(i e^{2i \epsilon^{-4} \xi \cdot x} (\mathcal{F}_{x \rightarrow \xi}^{-1} V_\epsilon)(2 \epsilon^{-4} \xi, t) \right)$$

y

$$H_\epsilon(x, \xi, t) = \epsilon^{-6} H(\epsilon^{-3} x, \epsilon^{-1} \xi, \epsilon^{-2} t),$$

tenemos que, usando el mismo tipo de ideas desarrolladas en las secciones anteriores para estimar $\|\mathcal{F}_{x \rightarrow y}^{-1} V(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}^3)}$, la siguiente estimación es satisfecha:

Proposición 4.5.5. *Bajo las hipótesis del Lema 4.5.4, se verifica que*

$$\begin{aligned} & \| (H_\epsilon *_{\xi} W_\epsilon)(\cdot, \cdot, t) \|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \\ & \leq C(W^I, \delta) \|W^I\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} (t - \delta)^{-9/2(1/p_0 - 1/r)} \epsilon^{-9/p'} \end{aligned}$$

para todo $1 < p < 9/8$ y ϵ suficientemente pequeño, donde $C(W^I, \delta)$ es una constante positiva que depende de W^I y de δ pero no de ϵ . Consecuentemente, el término no lineal del problema WFPF $_\epsilon$ decae como $\epsilon^{1-9/p'}$ en $L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$.

La demostración es una consecuencia inmediata de la desigualdad de Young y de la segunda afirmación del Lema 4.5.4.

Por consiguiente, ahora es claro que el término pseudo-diferencial no lineal (4.114) está acotado por una potencia positiva de ϵ que nos permite pasar al límite $\epsilon \rightarrow 0$. De esta forma, hacer ϵ tender a cero se traduce en la simplificación asintótica del término no lineal.

4.5.2 Compacidad en L^1

Para demostrar la convergencia con respecto a tiempos grandes ($t \rightarrow \infty$) de la función de Wigner $W(x, \xi, t)$ hacia $QG(x, \xi, t)$ en $L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$, utilizaremos un resultado de compacidad (ver Apéndice, Lema 7.0.2) debido a F. Bouchut y J. Dolbeault ([13], p. 510). En primer lugar disponemos de la siguiente estimación:

Corolario 4.5.6. *Denotamos por $h_\epsilon(x, \xi, t) = \epsilon \theta[V_\epsilon]W_\epsilon(x, \xi, t)$. Entonces, para ϵ suficientemente pequeño existe $\delta > 0$ tal que*

$$\|h_\epsilon\|_{L^\infty([\eta, T]; L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))} \leq C(W^I, \delta) \epsilon^\delta$$

para todo $0 < \eta < T$.

La demostración es una consecuencia directa de la Proposición 4.5.5. Necesitaremos también las siguientes cotas para la energía cinética

$$E(t) = \int_{\mathbb{R}_x^d} e(x, t) dx$$

y el momento de inercia

$$I(t) = \int_{\mathbb{R}_\xi^d} \mathcal{I}(\xi, t) d\xi.$$

Proposición 4.5.7. *Supongamos que el promedio de densidad inicial $S_{p_0}^I$ está acotado para $36/31 < p_0 \leq 6/5$ y que la energía cinética inicial $E(0)$ y el momento de inercia inicial $I(0)$ son finitos. Entonces existen constantes positivas $C = C(T)$ tales que, para todo $t \geq 1$:*

- (i) $E(t) \leq C(1+t)$.
- (ii) $I(t) \leq C(1+t)^3$.

Demostración.- (i) Del teorema de integración fraccional de Hardy-Littlewood-Sobolev (ver [93]) obtenemos que

$$\|\nabla_x V(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq C \|n(\cdot, t)\|_{L^{6/5}(\mathbb{R}^3)} \leq C(T) t^{15/4-9/2p_0},$$

donde se ha utilizado (4.98) con $q = 6/5$. Entonces el resultado se deduce de la ecuación para la energía

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^d} \left(e(x, t) + \frac{\gamma}{2} |\nabla_x V(x, t)|^2 \right) dx = 3\sigma Q, \quad (4.119)$$

que es una consecuencia directa de (4.56). En efecto, integrando la ecuación (4.119) sobre $(0, t)$ llegamos a

$$E(t) = E(0) + 3\sigma Q t + \frac{\gamma}{2} \left\{ \|\nabla_x V(\cdot, 0)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 - \|\nabla_x V(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \right\}.$$

Usando ahora la cota para la energía potencial obtenemos

$$E(t) \leq C_1(1+t) + C_2(T) t^{15/2-9/p_0},$$

con lo que concluye la demostración de (i).

La afirmación (ii) se obtiene a partir de la ecuación para el momento de inercia

$$\frac{dI}{dt} = 2 \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W(x, \xi, t) (x \cdot \xi) d\xi dx.$$

En efecto, integrando esta ecuación con respecto al tiempo y teniendo en cuenta la identidad

$$\int_0^t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W^H(x, \xi, t) (x \cdot \xi) d\xi dx = \int_0^t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W(x, \xi, t) (x \cdot \xi) d\xi dx,$$

se obtiene que

$$I(t) = I(0) + 2 \int_0^t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W^H(x, \xi, s) (x \cdot \xi) d\xi dx ds.$$

Entonces, aplicando la desigualdad de Hölder tenemos:

$$I(t) \leq I(0) + C \int_0^t I^H(s)^{1/2} E^H(s)^{1/2} ds.$$

La demostración concluye tras emplear las relaciones (4.57) y (4.58).

La Proposición 4.5.7 y la relación existente entre la energía cinética y la energía cinética de Husimi, dada por (4.57), nos proporcionan la siguiente estimación para el crecimiento con respecto al tiempo de la energía cinética asociada a la función de Husimi reescalada:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon^H(x, \xi, t) \frac{|\xi|^2}{2} d\xi dx &= \epsilon^2 \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W^H(x, \xi, \epsilon^{-2}t) \frac{|\xi|^2}{2} d\xi dx \\ &\leq C\epsilon^2(1 + \epsilon^{-2}t) \leq C(1 + t). \end{aligned}$$

De la misma forma, para el momento de inercia asociado a W_ϵ^H se verifica la siguiente estimación:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_x^3} W_\epsilon^H(x, \xi, t) |x|^2 dx d\xi &= \epsilon^6 \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_x^3} W^H(x, \xi, \epsilon^{-2}t) |x|^2 dx d\xi \\ &\leq C\epsilon^6(1 + \epsilon^{-2}t)^3 \leq C(1 + t)^3. \end{aligned}$$

Por consiguiente, para $\eta > 0$ fijo estamos en condiciones de aplicar el Lema 7.0.2 a la familia $\mathcal{F} = \{W_\epsilon(x, \xi, t_0), \epsilon \leq \epsilon_0\}$, con ϵ_0 suficientemente pequeño, y deducir el siguiente resultado:

Teorema 4.5.8. *Sea (W, V) una solución débil de la ecuación de WFPF (4.6) con condición inicial $W^I \in L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$, tal que la energía cinética inicial $E(0)$ y el momento de inercia inicial $I(0)$ son finitos. Supongamos también que la norma $S_{p_0}^I$ está acotada para algún $p_0 > 36/31$ fijo, de forma que las hipótesis (4.107), (4.108) y (4.109) son satisfechas. Entonces*

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|W(\cdot, \cdot, t) - QG(\cdot, \cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} = 0.$$

Demostración.- Fijamos $0 < \eta < T$ y consideramos las familias

$$F = \{W_\epsilon(\cdot, \cdot, \eta), \epsilon \leq \epsilon_0(\eta)\}$$

y

$$H = \{h_\epsilon(\cdot, \cdot, t), \epsilon \leq \epsilon_0(\eta)\}.$$

Entonces, el Lema 7.0.2 implica que \mathcal{F} es compacta en $C([\eta, T]; L^1(\omega))$ para todo $0 < \eta < T$, donde ω es un subconjunto acotado arbitrario de $\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3$. Denotemos su límite por g . Entonces, conforme al Corolario 4.5.6 pasamos al límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$ en el problema reescalado (4.114) y obtenemos que el término no lineal se anula, de forma que g es una solución débil de la ecuación lineal (4.64) con condición inicial $g(\cdot, 0) = Q\delta(x, \xi)$, donde $\delta(x, \xi)$ representa a la masa de Dirac centrada en el origen y Q es la carga total del sistema. Por tanto, $g(x, \xi, t)$ ha de coincidir con $QG(x, \xi, t)$ en el sentido de las distribuciones, ya que G es la solución fundamental del operador lineal L definido en (4.64).

Ahora resulta fácil observar que la sucesión de funciones de Husimi reescaladas $\{W_\epsilon^H\}_\epsilon$ también es compacta en $C([\eta, T]; L^1(\omega))$. Para ello, sea ρ_ϵ^n una sucesión de funciones de clase $C_0^\infty(\mathbb{R}^6)$ tales que $\|\rho_\epsilon^n\|_{L^1(\mathbb{R}^6)} = 1$ y $\rho_\epsilon^n \rightarrow \Gamma_\epsilon$ en $L^1(\mathbb{R}^6)$ cuando $n \rightarrow \infty$, para cada $\epsilon \leq 1$ fijo. Entonces tenemos que

$$\begin{aligned} \|W_\epsilon^H - g\|_{L^1(\omega)} &\leq \|W_\epsilon *_{x,\xi} \rho_\epsilon^n - g\|_{L^1(\omega)} + \|W_\epsilon *_{x,\xi} (\rho_\epsilon^n - \Gamma_\epsilon)\|_{L^1(\omega)} \\ &\leq \|W_\epsilon - g\|_{L^1(\omega + \text{sop}(\rho_\epsilon^n))} + \|g *_{x,\xi} \rho_\epsilon^n - g\|_{L^1(\mathbb{R}^6)} + \|W_\epsilon\|_{L^1(\mathbb{R}^6)} \|\rho_\epsilon^n - \Gamma_\epsilon\|_{L^1(\mathbb{R}^6)}. \end{aligned}$$

Pasando ahora al límite simultáneamente cuando $n \rightarrow \infty$ y $\epsilon \rightarrow 0$ (utilizando el proceso diagonal) se obtiene la compacidad de $\{W_\epsilon^H\}$ en $L^1(\omega)$.

Observamos además que la energía cinética y el momento de inercia asociados a W_ϵ^H satisfacen

$$E(W_\epsilon^H)(t) \leq C(T), \quad I(W_\epsilon^H)(t) \leq C(T).$$

Como consecuencia, podemos afirmar que la sucesión $\{W_\epsilon^H\}$ es compacta en todo el espacio $C([\eta, T]; L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ para todo $0 < \eta < T$, como se desprende de la estimación

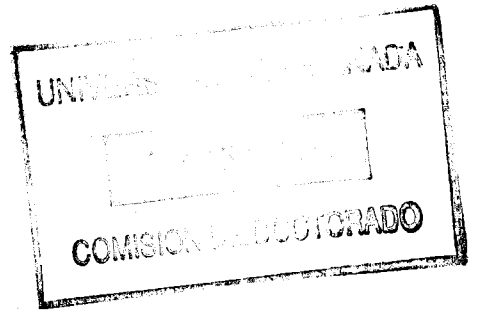
$$\int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} |W_\epsilon^H - g| d\xi dx \leq \int_{B_R} |W_\epsilon^H - g| d\xi dx + \frac{C(T)}{R^2},$$

donde hemos utilizado que $(|\xi|^2 + |x|^2)W_\epsilon^H$ y $(|\xi|^2 + |x|^2)g$ pertenecen a $L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ con cotas independientes de ϵ . Aquí B_R denota la bola euclídea en \mathbb{R}^6 centrada en el origen y de radio R .

Finalmente, la compacidad de la familia \mathcal{F} en $C([\eta, T]; L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ se alcanza a raíz de que

$$\begin{aligned} & \|W_\epsilon - g\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \\ & \leq \|W_\epsilon - W_\epsilon^H\|_{L^1(B_R)} + \text{TV}_{B_R^c}(W_\epsilon *_{x,\xi}(\Gamma_\epsilon - \delta(x, \xi))) + \|W_\epsilon^H - g\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \\ & \leq \|W_\epsilon - g\|_{L^1(B_R)} + 2\|W_\epsilon^H - g\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} + \text{const. TV}_{B_R^c}(\Gamma_\epsilon - \delta(x, \xi)), \end{aligned}$$

ya que el segundo miembro de la desigualdad tiende a cero cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Hemos denotado por $\text{VT}_{B_R^c}(\mu)$ a la variación total de μ sobre el conjunto complementario de la bola B_R . La demostración concluye al hacer la identificación $t = 1$ y $\epsilon = t^{-1/2}$.



Capítulo 5

Comportamiento asintótico de los sistemas de Schrödinger/Hartree–Poisson y Wigner–Poisson

5.1 Introducción

En este capítulo analizaremos el comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes ($t \rightarrow \infty$) de las soluciones del problema de valores iniciales para la ecuación de Schrödinger en las variables $(x, t) \in \mathbb{R}^3 \times (0, \infty)$.

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi + V \psi, \quad (5.1)$$

$$\psi(x, 0) = \varphi(x), \quad (5.2)$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi = 0, \quad (5.3)$$

asociado a un sistema monopartícula en el vacío y acoplado con la ecuación de Poisson

$$\Delta_x V = -\gamma n, \quad (5.4)$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} V = 0, \quad (5.5)$$

para la determinación del potencial $V(x, t)$. En este modelo $n(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ es la densidad de posición en un estado cuántico puro, cuya norma $L^1(\mathbb{R}_x^3)$ (probabilidad de ocupación del estado ψ) se conserva a lo largo de la evolución: $\|\psi(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1$; $V = V(x, t)$ es el potencial de Hartree autoconsistente originado por la carga de la partícula y $\gamma = +1$ ó $\gamma = -1$ en función del carácter repulsivo o atractivo de la fuerza coulombiana, respectivamente. Observamos que las constantes físicas que aparecen usualmente en la formulación de la ecuación de Schrödinger: \hbar , la

constante de Planck; y m, q que denotan respectivamente la masa y la carga de la partícula, han sido normalizadas a la unidad por simplicidad en las notaciones. Observamos también que V es una solución débil de la ecuación de Poisson (5.4) en tres dimensiones espaciales, que responde explícitamente a la siguiente expresión:

$$V(x, t) = \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(y, t)|^2}{|x - y|} dy.$$

Como consecuencia, el potencial tiene un signo definido que depende del valor que tome γ .

El sistema de Schrödinger–Poisson (5.1)–(5.5) gobierna la evolución temporal de la función de onda $\psi(x, t)$ asociada a un estado mecano–cuántico puro, la cual describe el estado de la partícula en el espacio de posiciones bajo la acción del potencial electrostático V en cada instante $t > 0$. Recordamos que los términos primero y segundo del operador hamiltoniano de la ecuación (5.1) representan, respectivamente, a la energía cinética y potencial del sistema.

El objetivo principal de este capítulo consiste en la determinación de algunos aspectos cualitativos referentes al comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes ($t \rightarrow \infty$) de las soluciones del sistema tridimensional de Schrödinger–Poisson (5.1)–(5.5), por medio de las “ecuaciones límite” satisfechas por la función de onda, la densidad y el potencial asintóticos. Este problema resulta de gran interés especialmente en el contexto de dispositivos cuánticos y modelado de semiconductores. En este marco, P. A. Markowich demostró en [77] que un sistema numerable de ecuaciones de Schrödinger–Poisson (el caso de un estado cuántico mixto) es equivalente a la ecuación de Wigner

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W + \theta[V]W = 0, \quad x, \xi \in \mathbb{R}^3, t > 0,$$

a través de la reformulación del problema en términos de la matriz de densidad del sistema (ver Capítulo 1), donde el operador pseudo–diferencial $\theta[V]$ actúa sobre la función de Wigner $W(x, \xi, t)$ de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \theta[V]W(x, \xi, t) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \left(V\left(x + \frac{y}{2}, t\right) - V\left(x - \frac{y}{2}, t\right) \right) \\ &\quad \times W(x, \eta, t) e^{-i(\xi - \eta) \cdot y} dy d\eta. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Esta ecuación sugiere de algún modo la existencia de una dinámica cinética subyacente a la ecuación de Schrödinger, inducida por la distribución estadística de

cuasi-probabilidad (ver [99], [47], [73], [105])

$$W(x, \xi, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}\left(x + \frac{y}{2}, t\right) \psi\left(x - \frac{y}{2}, t\right) e^{-iy \cdot \xi} dy \quad (5.7)$$

(ver también Capítulo 1).

Este resultado de equivalencia motivó un estudio exhaustivo sobre los problemas de existencia, unicidad y regularidad de las soluciones del sistema de Wigner-Poisson. En esta dirección, H. Steinrück probó en [94] la existencia de una única solución del problema unidimensional de Wigner-Poisson mediante su desarrollo en serie de soluciones de la ecuación de Schrödinger. Para el problema bidimensional, A. Arnold y F. Nier probaron en [4] la existencia global de una única solución clásica de la ecuación de Wigner-Poisson a través de su reformulación como un sistema numerable de ecuaciones de Schrödinger acoplado con una ecuación de Poisson. Para ello hubieron de imponer una condición de neutralidad de carga para obtener la acotación del potencial electrostático. Finalmente, F. Brezzi y P. A. Markowich demostraron en [17] la existencia de una única solución clásica global en el espacio de fases $\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3$. Sin embargo, ellos sólo analizaron el caso de una fuerza coulombiana repulsiva. R. Illner, P. F. Zweifel y H. Lange extendieron en [63] los resultados obtenidos en [17] al caso de potenciales tanto repulsivos como atractivos. De hecho, para datos iniciales $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^3)$ demostraron la existencia de una única solución clásica global (ψ, V) del problema de Schrödinger-Poisson que verifica

$$\psi \in C([0, \infty); H^2(\mathbb{R}^3)) \cap L^\infty([0, \infty); H^1(\mathbb{R}^3)) \cap C^1([0, \infty); L^2(\mathbb{R}^3))$$

y

$$V \in C([0, \infty); L^\infty(\mathbb{R}^3)) \cap L^\infty(\mathbb{R}^3 \times [0, \infty)) \cap L^\infty((0, \infty); L^p(\mathbb{R}^3)), \quad 3 < p \leq \infty.$$

A. Arnold extendió en [3] el resultado de existencia y unicidad de [63] para los problemas de Wigner-Poisson y von Neumann-Poisson al caso de datos iniciales pertenecientes a H^1 por medio de una generalización de la desigualdad de Lieb-Thirring, obteniendo la misma regularidad conocida para la densidad y para el potencial. En [24], F. Castella estudia las soluciones en L^2 del sistema de Schrödinger-Poisson. En él demuestra existencia, unicidad y determinadas propiedades asintóticas de caída de las soluciones, así como algunos efectos regularizantes asociados al operador de Schrödinger. En particular, demuestra que existe una única solución ψ del sistema de Schrödinger-Poisson, con dato inicial $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$

tal que $x\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, que satisface

$$\begin{cases} \psi \in C^0(\mathbb{R}, L^2(\mathbb{R}^3)) \cap L^q_{loc}((0, \infty); L^p(\mathbb{R}^3)) \\ V\psi \in L^1_{loc}(\mathbb{R}; L^2(\mathbb{R}^3)) + L^{q'}_{loc}(\mathbb{R}; L^{p'}(\mathbb{R}^3)) \\ \|\psi(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \|\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \quad \forall t \in \mathbb{R} \\ \psi \in L^a_{loc}(\mathbb{R}; L^b(\mathbb{R}^3)) \quad \forall (a, b) \text{ tal que } 2 \leq b < 6, \frac{2}{a} = 3(\frac{1}{2} - \frac{1}{b}), \end{cases} \quad (5.8)$$

donde $3 < p = \frac{2\sigma}{\sigma-1} < 6$ y $2/q = 3/p - 3/2$ con $\sigma \in]\frac{3}{2}, 3[$, y donde p', q' son, respectivamente, los índices conjugados de p, q . Para ello se vale de forma esencial de las desigualdades de Strichartz. También demuestra las siguientes estimaciones:

$$\|V(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} \leq \begin{cases} C|t|^{-(\frac{2}{3}-\frac{1}{p}-\mu)}, & \forall p \in [6, \infty], \forall \mu > 0 \\ C|t|^{-(1-\frac{3}{p}-\mu)}, & \forall p \in]3, 6], \forall \mu > 0 \end{cases} \quad (5.9)$$

para todo $|t| \geq 1$, con $\mu = 0$ cuando $p = 6$, que exhibe las propiedades de caída del potencial cuando $t \rightarrow \infty$ y donde C es una constante positiva que depende de $p, \|\varphi\|_{L^2}$ y $\|x\varphi\|_{L^2}$; y

$$\|V(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} \leq C|t|^{-(1-\frac{3}{p})}, \quad \forall p \in]3, \infty], \quad (5.10)$$

para todo $|t| \leq T$, donde C es una constante positiva que depende de $p, \|\varphi\|_{L^2}, \|x\varphi\|_{L^2}$ y T .

Asímismo, obtiene las siguientes cotas de caída en tiempo para la función de onda $\psi(x, t)$:

$$\|\psi(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} \leq C|t|^{-\frac{3}{2}(\frac{1}{2}-\frac{1}{p})}, \quad (5.11)$$

para todo $|t| \geq 1$ y $2 \leq p \leq 6$, mientras que para $|t| \leq T$ se tiene que

$$\|\psi(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} \leq C|t|^{-3(\frac{1}{2}-\frac{1}{p})}, \quad \forall p \in [2, 6]. \quad (5.12)$$

Como se verá más avanzado el capítulo, nosotros demostramos aquí resultados cualitativos complementarios de las ya bien conocidas estimaciones de caída para la función de onda ψ (consultar, por ejemplo, [37], [17], [24], [63]), que proporcionan una descripción más completa del comportamiento asintótico $t \rightarrow \infty$ de las soluciones de la ecuación de Hartree–Poisson (ecuación de Schrödinger–Poisson para un estado cuántico puro).

En el mismo punto de mira que nuestros resultados pero utilizando técnicas diferentes basadas en teoría de *scattering*, cabe destacar una serie de trabajos

recientes debidos a N. Hayashi, P. I. Naumkin y T. Ozawa [59], [58], [60]. En ellos se da una descripción asintótica de las soluciones en términos del grupo de evolución libre de Schrödinger así como de los estados de *scattering* asociados a este modelo evaluados en la variable dilatada x/t . En particular, los autores demuestran que cuando la función de onda inicial φ es una distribución temperada suficientemente pequeña en un espacio de Sobolev con peso de tipo $H^{0,\alpha} \cap H^{\alpha,0}$ con $1/2 < \alpha < 3/2$, donde

$$H^{m,s} = \{ \varphi \in \mathcal{S}', \|\varphi\|_{m,s} = \|(1 + |x|^2)^{s/2} (1 - \Delta)^{m/2} \varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} < \infty \},$$

entonces existen funciones ψ_{\pm} únicas en $H^{0,\sigma} \cap H^{\sigma,0}$ tales que

$$\begin{aligned} \|\psi(\cdot, t) - \exp\left(\mp iV(\cdot, t) * |\mathcal{F}\psi_{\pm}|^2\right)(x/t) \log(|t|) U(t)\psi_{\pm}\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \\ \leq C(\|\varphi\|_{0,\alpha} + \|\varphi\|_{\alpha,0}) |t|^{C(\|\varphi\|_{0,\alpha} + \|\varphi\|_{\alpha,0}) - \mu} \end{aligned}$$

para todo $|t| \geq 1$, con $1/2 < \sigma < \alpha$ y $\mu = \min(1, \alpha/2)$, donde $U(t)$ es el propagador asociado a la ecuación de Schrödinger. Además, prueban la caída en tiempo de las soluciones en norma L^∞ así como la existencia de estados de *scattering* modificados.

Por otro lado, [92] también está relacionado con técnicas de cambio de escala y comportamiento asintótico de sistemas de partículas cuánticas. En este trabajo, H. Spohn estudia la evolución de una partícula cuántica que se mueve en un potencial periódico. Utilizando el operador de posición escalado $x_\epsilon(t) = \epsilon x(\epsilon^{-1}t)$ y la función estructural de equilibrio escalada $\epsilon^{-1}S(\epsilon q, \epsilon^{-1}t)$, donde q denota la frecuencia espacial, H. Spohn prueba, bajo algunas restricciones físicas sobre el sistema y cuando las bandas de energía no se cruzan (es decir, son aisladas), que esta evolución está asintóticamente bien aproximada, cuando $\epsilon \rightarrow 0$, por las ecuaciones semiclásicas de movimiento. Finalmente, en [48] R. T. Glassey demuestra (para el caso repulsivo) que

$$\psi(x, t) \rightarrow 0 \quad \text{en } L^2_{loc}(\mathbb{R}^3)$$

cuando $t \rightarrow \infty$, es decir, que la densidad de partículas no puede estar localizada, en un régimen de tiempos grandes, en el interior de una bola de cualquier radio arbitrario, ya que se anula asintóticamente supuesto que la solución tiene energía finita.

Para nuestro análisis, nosotros utilizaremos una técnica no lineal basada en una transformación del problema vía un cambio de escala apropiado (relacionado con

la teoría de soluciones autosemejantes) de la ecuación de Hartree. Entonces obtendremos estimaciones *a priori* para las soluciones reescaladas y pasaremos luego al límite en el nuevo parámetro de escala tras una reformulación del problema en términos de la representación de Wigner usual. De hecho, en nuestro contexto no parece lo más adecuado pasar al límite directamente en la ecuación de Schrödinger reescalada, ya que el límite con respecto al parámetro de escala de la sucesión de densidades iniciales es una masa de Dirac y, como consecuencia, no podemos esperar “retroceder” en las variables reescaladas para recuperar información sobre las cantidades originales (no reescaladas). Por tanto, debemos encontrar una ecuación de evolución para la densidad que nos permita pasar al límite adecuadamente. Esto se lleva a cabo introduciendo una ecuación de Wigner reescalada a través de la reformulación del problema en términos de la transformada de Wigner, y pasando entonces al límite en esta nueva ecuación. El último paso consiste en recuperar la ecuación del potencial para la ecuación límite resultante o, equivalentemente, en identificar el potencial límite a través de la ecuación de Poisson. Otros resultados relacionados con técnicas de reescalado y comportamiento asintótico de las soluciones pueden encontrarse, por ejemplo, en [64] y [23].

En primer lugar necesitamos situar nuestro problema en el contexto de soluciones débiles $\psi(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap L^6(\mathbb{R}^3)$ del sistema de Schrödinger–Poisson, regularidad que puede alcanzarse, por ejemplo, a partir de un dato inicial

$$\varphi \in H^1(\mathbb{R}^3) \quad (5.13)$$

como en [3], o a partir de un dato inicial en $L^2(\mathbb{R}^3)$ que satisfaga que el momento de segundo orden de la densidad inicial está acotado en $L^2(\mathbb{R}^3)$ (ver [24]):

$$\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3), \quad x\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3). \quad (5.14)$$

Supondremos también que la condición de normalización

$$\|\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1 \quad (5.15)$$

es satisfecha.

Denotamos por \mathcal{D}_t al operador de dilatación $\mathcal{D}_t f(x) = f(tx)$. Entonces, los resultados más importantes que demostramos en este capítulo para los sistemas de Schrödinger–Poisson y Wigner–Poisson son los siguientes:

Teorema 5.1.1. *Sea φ el dato inicial asociado al sistema de Schrödinger–Poisson (5.1)–(5.5) tal que la condición de normalización (5.15) y la hipótesis (5.13) o bien*

(5.14) son satisfechas. Entonces, el comportamiento con respecto a tiempos grandes del potencial autoconsistente reescalado $tV(tx, t)$ viene descrito por la solución fundamental de la ecuación de Poisson

$$\Delta V_\infty(x) = -\gamma \delta_0(x), \quad (5.16)$$

donde δ_0 denota la masa de Dirac centrada en $x = 0$. Como consecuencia,

$$\frac{V_\infty = \gamma}{4\pi|x|} \quad (5.17)$$

es el potencial de Coulomb usual. Además, existe una función real $\beta(t)$, que satisface que $\beta(t) \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$, tal que se verifica la siguiente estimación:

$$t \beta(t) \|\mathcal{D}_t V(\cdot, t) - \mathcal{D}_t V_\infty\|_{L^p(\Omega)} \leq C \quad \forall t \geq 1, \quad \forall \Omega \text{ compacto en } \mathbb{R}^3, \quad (5.18)$$

donde $1 \leq p < 3$ y C es una constante positiva que sólo depende del dato inicial φ .

En lo concerniente a la derivación de las “ecuaciones límite” con respecto a tiempos grandes tanto para las funciones de onda como para las funciones de Wigner, demostramos el siguiente resultado:

Teorema 5.1.2. *Bajo las hipótesis del Teorema 5.1.1 existe una función real $\alpha(t)$, que satisface que $\alpha(t) \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$, tal que la función de onda $\psi(x, t)$ verifica*

$$\alpha(t) \int_{\mathbb{R}^3_x} [\psi(x, t) - t^{-\frac{3}{2}} \mathcal{D}_{t^{-1}} \psi_\infty(x)] t^{-\frac{3}{2}} \mathcal{D}_{t^{-1}} \Phi(x) dx \leq C$$

para toda función $\Phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ y todo $t \geq 1$, donde C es una constante positiva que sólo depende del dato inicial φ y $\psi_\infty(x) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ es una solución de la ecuación lineal

$$i \frac{3}{2} \psi_\infty + i(x \cdot \nabla_x) \psi_\infty + \frac{\gamma}{4\pi|x|} \psi_\infty = 0$$

en el sentido de las distribuciones.

Por otro lado, existe también una función real $\sigma(t)$, que satisface que $\sigma(t) \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$, tal que el comportamiento con respecto a tiempos grandes de la función de Wigner $W(x, \xi, t)$ asociada a la función de onda $\psi(x, t)$ está descrito por

$$\sigma(t) \int_{\mathbb{R}^3_x} \int_{\mathbb{R}^3_\xi} [W(x, \xi, t) - W_\infty(t^{-1}x, t\xi, t)] \Phi(t^{-1}x, t\xi) d\xi dx \leq C$$

para toda $\Phi \in L^2(\mathbb{R}^6)$ y $t \geq 1$, donde C es una constante positiva que sólo depende del dato inicial φ y $W_\infty(x, \xi) \in L^2(\mathbb{R}^6)$ es una solución de la ecuación lineal

$$(\xi \cdot \nabla_\xi)W_\infty + (x \cdot \nabla_x)W_\infty = 0$$

en el sentido de las distribuciones.

El resto del capítulo está dedicado a demostrar los teoremas que acabamos de presentar y a obtener algunas consecuencias y extensiones de los mismos. En la Sección 2 estudiamos la propiedad de invarianza de escala de la ecuación de Schrödinger–Poisson bajo un grupo de transformaciones adecuado relacionado con posibles soluciones autosemejantes. En la Sección 3 derivamos la ecuación para la densidad reescalada a través de la aproximación de Wigner y pasamos al límite en el parámetro de escala. Entonces, después de identificar la distribución de densidad límite es fácil obtener el potencial asintótico asociado a través de la ecuación de Poisson. En la Sección 4 investigamos el comportamiento con respecto a tiempos grandes de las soluciones del sistema de Schrödinger–Poisson. En la Sección 5 extendemos los resultados anteriores a un sistema numerable de ecuaciones de Schrödinger. Finalmente, en la Sección 6 analizamos el comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes de las soluciones del sistema de Wigner–Poisson.

5.2 Cambio de escala

Uno de los ingredientes principales en nuestro estudio del comportamiento asintótico de las soluciones del problema de Schrödinger–Poisson es la propiedad de invarianza de escala de la función de estado $\psi(x, t)$ en el espacio de configuraciones. A este respecto, introducimos una sucesión de problemas que nos permitirá entender el comportamiento cerca de infinito de las soluciones de (5.1)–(5.5). Para cada $\epsilon \leq 1$, $x \in \mathbb{R}^3$ y $t \geq 0$ definimos

$$\psi_\epsilon(x, t) = \epsilon^{-\frac{3}{2}}\psi(\epsilon^{-1}x, \epsilon^{-1}t). \quad (5.19)$$

A raíz de la introducción de este grupo de escala puede comprobarse fácilmente que

$$\|\varphi_\epsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \|\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \|\psi(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \|\psi_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1, \quad (5.20)$$

y por tanto se conserva la norma $L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}^3))$ de las soluciones reescaladas. Asimismo, si $K(x) = \frac{\gamma}{4\pi|x|}$ definimos

$$V_\epsilon(x, t) \stackrel{\text{def}}{=} V(\psi_\epsilon)(x, t) = (K * |\psi_\epsilon|^2)(x, t) = \epsilon^{-1}V(\epsilon^{-1}x, \epsilon^{-1}t). \quad (5.21)$$

Denotamos por $L^{p,q} = L^p((0, \infty); L^q(\mathbb{R}^3))$. Las propiedades fundamentales de las soluciones reescaladas $(\psi_\epsilon, V_\epsilon)$ en relación con el grupo de escala introducido en (5.19) y (5.21) se recogen en el siguiente

Lema 5.2.1. *Para todo $t > 0$, $\epsilon \leq 1$ y $1 \leq p \leq \infty$, se verifican las siguientes propiedades:*

- (i) $\|\psi_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} = \epsilon^{\frac{3}{p}-\frac{3}{2}}\|\psi(\cdot, \epsilon^{-1}t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}$. En particular, la norma $L^{\infty,2}$ se conserva con respecto al grupo de escala.
- (ii) $\|V_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)} = \epsilon^{\frac{3}{p}-1}\|V(\cdot, \epsilon^{-1}t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}$. Además, se tiene que la norma $L^\infty((0, \infty); M^3(\mathbb{R}^3))$ se conserva con respecto al grupo de escala, donde M^3 denota el espacio de Marcinkiewicz de orden tres.
- (iii) La sucesión de densidades reescaladas $n_\epsilon = |\psi_\epsilon|^2$ es precompacta en el espacio $L^\infty((0, \infty); W^{-1,s}(\Omega))$ con $1 \leq s < 3/2$, para todo dominio acotado Ω de \mathbb{R}^3 .

Demostración.- La primera afirmación es una consecuencia inmediata del cambio de variable $\epsilon^{-1}x \mapsto x$. Para probar (ii) utilizamos la definición de V_ϵ en (5.21) y obtenemos

$$V_\epsilon(x, t) = \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi_\epsilon(y, t)|^2}{|x-y|} dy.$$

Sustituyendo (5.19) en esta fórmula y haciendo el cambio de variable $\epsilon^{-1}y \mapsto y$ conseguimos probar la primera parte de (ii). Para demostrar la segunda parte observamos que, para todo conjunto medible Ω de \mathbb{R}^3 ,

$$\int_\Omega |V_\epsilon(x, t)| dx = \epsilon^2 \int_{\epsilon^{-1}\Omega} |V(x, \epsilon^{-1}t)| dx \leq |\Omega|^{\frac{2}{3}} \|V(\cdot, \epsilon^{-1}t)\|_{M^3(\mathbb{R}^3)},$$

donde hemos usado que $n(\cdot, t) \in L^1(\mathbb{R}^3)$ implica $V(\cdot, t) \in M^3(\mathbb{R}^3)$ (ver [10]). Aquí $|\Omega|$ denota la medida de Lebesgue de Ω en \mathbb{R}^3 . La afirmación (iii) es consecuencia de un resultado de compacidad clásico para medidas (consultar, por ejemplo, [45] p. 7).

Por tratarse (ψ, V) de una solución débil de la ecuación (5.1), ha de verificar (5.1) en el sentido de las distribuciones, es decir, se satisface la siguiente igualdad:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \left(i\psi \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \frac{1}{2} \psi \Delta_x \Phi + V \psi \Phi \right) dt dx + \int_{\mathbb{R}^3} \Phi(x, 0) \varphi(x) dx = 0 \quad (5.22)$$

para toda $\Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_x^3 \times (0, \infty))$. A continuación derivamos la ecuación satisfecha por ψ_ϵ y V_ϵ .

Lema 5.2.2. *Para todo $\epsilon \leq 1$ fijo, el par $(\psi_\epsilon, V_\epsilon)$ definido por (5.19) y (5.21) es una solución débil del problema*

$$i \frac{\partial \psi_\epsilon}{\partial t} = -\frac{\epsilon}{2} \Delta_x \psi_\epsilon + V_\epsilon \psi_\epsilon, \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad t > 0. \quad (5.23)$$

Demostración.- Definimos la función $\Phi(x, t) = \tilde{\Phi}(\epsilon x, \epsilon t)$ y la utilizamos como función test en (5.22). Entonces, haciendo el cambio de variables $t' = \epsilon^{-1}t$ y $x' = \epsilon^{-1}x$ obtenemos la igualdad

$$\int_{\mathbb{R}^3} \int_0^\infty \left(i\psi_\epsilon \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial t} - \frac{\epsilon}{2} \psi_\epsilon \Delta_x \tilde{\Phi} + V_\epsilon \psi_\epsilon \tilde{\Phi} \right) dt dx + \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Phi}(x, 0) \varphi_\epsilon(x) dx = 0$$

para toda $\tilde{\Phi} \in C_0^\infty(\mathbb{R}_x^3 \times (0, \infty))$, la cual demuestra el lema.

La forma natural de proceder una vez que hemos obtenido la ecuación reescalada (5.23) consiste en pasar al límite en el parámetro de escala ($\epsilon \rightarrow 0$) e intentar simplificar asintóticamente el efecto de la energía cinética $-\frac{\epsilon}{2} \Delta_x \psi_\epsilon$ sobre el sistema reescalado. Observamos que hacer $\epsilon \rightarrow 0$ es equivalente en cierto sentido a hacer $t \rightarrow \infty$ (a través de las identificaciones $t = 1$ y $\epsilon = t^{-1}$). Sin embargo, es sencillo comprobar que la sucesión $n_\epsilon(x, 0) = |\varphi_\epsilon(x)|^2$ converge débilmente como medidas hacia una masa de Dirac centrada en $x = 0$ (a la que denotaremos por $\delta_0(x)$) cuando $\epsilon \rightarrow 0$, y es de esperar también que el comportamiento con respecto a tiempos grandes de la densidad $n_\epsilon(x, t)$ venga descrito nuevamente por una medida de Dirac, lo cual origina un problema de compacidad. Por otro lado, aunque se pueden obtener otro tipo de estimaciones diferentes a la del Lema 5.2.1 (iii) para $|\psi_\epsilon|^2$, por ejemplo en espacios $L^{p,q}$ (ver [74]), todas ellas son incapaces de reconocer una masa de Dirac en el límite. En particular, las desigualdades de

Strichartz proporcionan soluciones $\psi \in L^p_{loc}([0, \infty); L^q(\mathbb{R}^3))$ con $2/p = 3/2 - 3/q$ y $2 \leq q < 6$ (ver [24]). Como consecuencia, pasar al límite en la ecuación (5.23) podría acarrear dificultades debido a la ausencia de compacidad. Es por ello que parece más apropiado y natural en nuestro contexto considerar otra alternativa.

Para concluir esta sección daremos algunas interpretaciones de las situaciones físicas representadas por el límite de escala que pretendemos analizar. Si retenemos algunas de las constantes físicas que aparecen en la formulación usual de la ecuación de Schrödinger (la constante de Planck y la masa de las partículas) en vez de normalizarlas, tenemos que

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x \psi + V\psi.$$

Entonces nos vemos llamados en primer lugar a identificar el límite $\epsilon \rightarrow 0$ con un límite de masa grande (o límite de partícula pesada), de forma que la partícula tiende al reposo ($\hbar = 1$). De hecho, estamos tratando con cierto tipo de “límite dinámico clásico”. Además, si consideramos que \hbar es del mismo orden de magnitud que ϵ en (5.23) y normalizamos la masa de las partículas ($m = 1$), este límite podría ser interpretado también como un límite semiclassical para la función de onda reescalada ψ_ϵ en (5.23) bajo la acción de un potencial dilatado, a saber:

$$i\epsilon \frac{\partial \psi_\epsilon}{\partial t} = -\frac{\epsilon^2}{2} \Delta_x \psi_\epsilon + V(\epsilon^{-1}x, \epsilon^{-1}t)\psi_\epsilon.$$

5.3 La densidad y el potencial asintóticos

Esta sección está dedicada a encontrar una ecuación de evolución cuántica para la densidad de posición reescalada $n_\epsilon(x, t)$ en la cual podamos pasar al límite e identificar una expresión para la densidad asintótica n_∞ . Esta será la clave para obtener información precisa acerca del potencial límite, al que nos referiremos como V_∞ . Concretamente, V_∞ será finalmente identificado como el potencial de Coulomb en una norma $L^p(\Omega)$, con $1 \leq p < 3$, mediante el paso al límite en la ecuación de Poisson reescalada

$$\Delta_x V_\epsilon(x, t) = -\gamma n_\epsilon(x, t). \quad (5.24)$$

Por consiguiente, en primer lugar nos ocuparemos de derivar la ecuación de evolución para la densidad reescalada n_ϵ a partir de la ecuación reescalada (5.23) para

ψ_ϵ , y posteriormente investigaremos el comportamiento límite de las soluciones de esta ecuación cuando ϵ tiende a cero. Para ello consideraremos la formulación del problema reescalado en términos de la correspondiente matriz de densidad reescalada (consultar [80], [73] y el Capítulo 1 de esta memoria)

$$\rho_\epsilon(x, y, t) = \bar{\psi}_\epsilon(x, t)\psi_\epsilon(y, t),$$

lo cual nos conducirá a una nueva ecuación reescalada escrita en términos de la transformada de Wigner asociada. En concreto, aplicaremos la aproximación de Wigner estándar al problema de valores iniciales reescalado de Schrödinger salvo un cambio de escala en la variable ξ , y veremos que se puede obtener una formulación equivalente de esta ecuación.

Recordamos que la función de Wigner $W(\psi)(\cdot, \cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ dada una función de onda $\psi(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Definimos, para la función de onda reescalada ψ_ϵ , su transformada de Wigner asociada:

$$\begin{aligned} W_\epsilon(x, \xi, t) &\stackrel{def}{=} W(\psi_\epsilon)(x, \xi, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_y^3} \bar{\psi}_\epsilon\left(x + \frac{y}{2}, t\right) \psi_\epsilon\left(x - \frac{y}{2}, t\right) e^{-iy \cdot \xi} dy \\ &= W(\psi)(\epsilon^{-1}x, \epsilon\xi, \epsilon^{-1}t) \in L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3), \end{aligned} \quad (5.25)$$

que está relacionada con la transformada de Wigner usual $W(\psi)$, salvo la acción natural del grupo de escala en las variables de espacio y tiempo, mediante un cambio de escala de orden ϵ en ξ . Esta elección de W_ϵ está inspirada en el grupo de escala que actúa sobre las funciones de Wigner a un nivel de descripción semi-clásico, a través de la introducción de una transformación de escala para la que el parámetro de autosemejanza ϵ es del mismo orden de magnitud que \hbar^{-1} y la posterior modificación de la escala de ξ ($\xi \mapsto \hbar\xi$), que sitúa nuestro problema en un contexto de partícula pesada. Referimos a [47], [73], [78], [79] para encontrar una explicación detallada de este tipo de límites.

Nótese que la norma $L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ es un invariante del grupo de escala definido por (5.25), ya que

$$\|W_\epsilon(\cdot, \cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} = \|W(\psi)(\cdot, \cdot, \epsilon^{-1}t)\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \quad (5.26)$$

para todo instante $t \geq 0$ y $\epsilon \leq 1$ fijo. Asimismo, la densidad reescalada se puede expresar como el valor medio de W_ϵ con respecto a la variable ξ , es decir,

$$\int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon(x, \xi, t) d\xi = n_\epsilon(x, t) \in L^1_+(\mathbb{R}_x^3). \quad (5.27)$$

Un desarrollo más exhaustivo de estas descripciones equivalentes que relacionan operadores de densidad con funciones de Wigner asociadas a un estado cuántico puro puede encontrarse, por ejemplo, en [3] -§1 y §2-, [73], [77] y [80].

El siguiente resultado, que se puede obtener de forma simple a partir de la definición de las funciones reescaladas, nos muestra la ecuación satisfecha por (W_ϵ, V_ϵ) . Esta ecuación –que describe estados cuánticos por medio de funciones en el espacio de fases– es la ecuación de evolución para la función de distribución de cuasi-probabilidad de Wigner reescalada W_ϵ en una aproximación de campo medio con interacción coulombiana.

Lema 5.3.1. *Para cada $\epsilon \leq 1$ fijo, la función W_ϵ definida por (5.25) es una solución débil del problema de Wigner–Poisson reescalado*

$$\frac{\partial W_\epsilon}{\partial t} + \epsilon(\xi \cdot \nabla_x)W_\epsilon + H_\epsilon *_\xi W_\epsilon = 0, \quad x, \xi \in \mathbb{R}^3, t > 0, \quad (5.28)$$

donde

$$H_\epsilon(x, \xi, t) = \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \left(V_\epsilon(x + \frac{y}{2}, t) - V_\epsilon(x - \frac{y}{2}, t) \right) e^{-iy \cdot \xi} dy \quad (5.29)$$

y $*_\xi$ denota la convolución con respecto a la variable ξ .

Como usualmente ocurre en el contexto de Wigner de la Mecánica Cuántica, la convolución $H_\epsilon *_\xi W_\epsilon$ se puede escribir de forma equivalente en términos del operador pseudo-diferencial

$$\begin{aligned} \theta[V_\epsilon]W_\epsilon(x, \xi, t) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \left(V_\epsilon(x + \frac{y}{2}, t) - V_\epsilon(x - \frac{y}{2}, t) \right) \\ &\quad \times W_\epsilon(x, \eta, t) e^{-i(\xi - \eta) \cdot y} dy d\eta, \end{aligned} \quad (5.30)$$

que está bien definido en sentido distribucional, como se concluye a raíz de las estimaciones efectuadas en la demostración del siguiente resultado.

Esta formulación del problema reescalado (5.23) en términos de la función de Wigner nos ayudará a dar sentido a la densidad de partículas asintótica n_∞ a través del paso al límite en la ecuación (5.28). Para ello probaremos en primer lugar el siguiente resultado:

Lema 5.3.2. *Para todo $0 \leq t \leq T$, el operador pseudo-diferencial $\theta[V_\epsilon]W_\epsilon(x, \xi, t)$ tiende a cero en el sentido de las distribuciones cuando ϵ tiende a cero.*

Demostración.- El término no lineal $\theta[V_\epsilon]W_\epsilon$, definido por (5.30), puede escribirse equivalentemente como

$$\begin{aligned}\theta[V_\epsilon]W_\epsilon(x, \xi, t) &= \mathcal{F}_{y \rightarrow \xi}^{-1} \left[\left(V_\epsilon(x + \frac{y}{2}, t) - V_\epsilon(x - \frac{y}{2}, t) \right) (\mathcal{F}_{\eta \rightarrow y} W_\epsilon)(x, y, t) \right] (\xi) \\ &= \epsilon^{-1} \mathcal{F}_{y \rightarrow \xi}^{-1} \left[\left(V(\epsilon^{-1}x + \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) - V(\epsilon^{-1}x - \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) \right) \right. \\ &\quad \left. \times \bar{\psi}(\epsilon^{-1}x + \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) \psi(\epsilon^{-1}x - \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) \right].\end{aligned}$$

Entonces se trata de estimar la cantidad

$$\begin{aligned}|\langle \theta[V_\epsilon]W_\epsilon, \Phi \rangle| &= \epsilon^{-1} \left| \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \mathcal{F}_{y \rightarrow \xi}^{-1} \left[\left(V(\epsilon^{-1}x + \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) - V(\epsilon^{-1}x - \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \bar{\psi}(\epsilon^{-1}x + \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) \psi(\epsilon^{-1}x - \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) \right] (\epsilon\xi) \Phi(x, \xi) d\xi dx \right|\end{aligned}$$

por una potencia positiva de ϵ , para toda función $\Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$. En efecto, se tiene que

$$\begin{aligned}|\langle \theta[V_\epsilon]W_\epsilon, \Phi \rangle| &\leq C \epsilon^{-5/2} \int_{\mathbb{R}_x^3} \|V(\epsilon^{-1}x + \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) \\ &\quad \times \bar{\psi}(\epsilon^{-1}x + \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t) \psi(\epsilon^{-1}x - \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t)\|_{L^2(\mathbb{R}_y^3)} \|\Phi(x, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}_\xi^3)}.\end{aligned}$$

Tomando ahora la norma L^p con respecto a la variable x con $p > 2$ y estimando el potencial en norma $L^\infty(\mathbb{R}_y^3)$ (teniendo además en cuenta su ritmo de decrecimiento en $t = 0$ dado por (5.9)) resulta:

$$\begin{aligned}&|\langle \theta[V_\epsilon]W_\epsilon, \Phi \rangle| \\ &\leq \frac{C}{t} \epsilon^{-3/2} \left(\int_{\mathbb{R}_x^3} \left(\int_{\mathbb{R}_y^3} |\bar{\psi}(\epsilon^{-1}x - \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t)|^2 |\psi(\epsilon^{-1}x - \frac{y}{2}, \epsilon^{-1}t)|^2 dy \right)^{p/2} dx \right)^{1/p} \\ &= \frac{C}{t} \epsilon^{-3/2} \left(\int_{\mathbb{R}_x^3} \left(\int_{\mathbb{R}_y^3} |\bar{\psi}(2\epsilon^{-1}x - z, \epsilon^{-1}t)|^2 |\psi(z, \epsilon^{-1}t)|^2 dy \right)^{p/2} dx \right)^{1/p},\end{aligned}$$

donde hemos realizado el cambio de variable $z = \epsilon^{-1}x - y/2$ con respecto a y . Esta última expresión la analizamos en dos partes, según su comportamiento en el interior y en el exterior de la bola B_R de \mathbb{R}_y^3 centrada en el origen y de radio R .

De esta forma, en primer lugar tenemos que

$$\begin{aligned} & \frac{C}{t} \epsilon^{-3/2} \left(\int_{\mathbb{R}_x^3} \left(\int_{B_R} |\bar{\psi}(2\epsilon^{-1}x - z, \epsilon^{-1}t)|^2 |\psi(z, \epsilon^{-1}t)|^2 dz \right)^{p/2} dx \right)^{1/p} \\ & \leq \frac{C}{t} \epsilon^{3/p-3/2} R^{(3p-6)/2p} \|\psi(\cdot, \epsilon^{-1}t)\|_{L^p(\mathbb{R}^3)}^2 \\ & \leq C R^{(3p-6)/2p} t^{6/p-4} \epsilon^{3/2-3/p}, \end{aligned} \quad (5.31)$$

donde hemos empleado la desigualdad de Hölder y las cotas de decrecimiento en tiempo (5.11) para la función de onda probadas en [24].

Por otro lado, para estimar

$$\frac{C}{t} \epsilon^{-3/2} \left(\int_{\mathbb{R}_x^3} \left(\int_{B_R^c} |\bar{\psi}(2\epsilon^{-1}x - z, \epsilon^{-1}t)|^2 |\psi(z, \epsilon^{-1}t)|^2 dz \right)^{p/2} dx \right)^{1/p}$$

utilizamos la desigualdad de Minkowski para integrales (ver Apéndice), de modo que resulta

$$\begin{aligned} & \leq \frac{C}{t} \epsilon^{-3/2} \left(\int_{B_R^c} \left(\int_{\mathbb{R}_x^3} |\bar{\psi}(2\epsilon^{-1}x - z, \epsilon^{-1}t)|^p |\psi(z, \epsilon^{-1}t)|^p dx \right)^{2/p} dz \right)^{1/p} \\ & \leq \frac{C}{t} \epsilon^{3/p-3/2} \|\psi(\cdot, \epsilon^{-1}t)\|_{L^p(\mathbb{R}_x^3)} \left(\int_{B_R^c} |\psi(z)|^2 dz \right)^{1/2} \\ & \leq C t^{3/p-5/2} \left(\int_{B_R^c} |\psi(z)|^2 dz \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (5.32)$$

donde nuevamente hemos utilizado las cotas de caída de ψ en $t = 0$ descritas en (5.11).

Finalmente, como $|\psi|^2$ está uniformemente acotada en $L^1(\mathbb{R}^3)$, podemos afirmar que dado $\delta > 0$ existe $R > R(\delta)$ tal que, para todo $t > 0$ fijo:

$$C t^{3/p-5/2} \left(\int_{B_R^c} |\psi(z)|^2 dz \right)^{1/2} \leq t^{3/p-5/2} \frac{\delta}{2}. \quad (5.33)$$

Además, para este $R(\delta)$ existe también $\epsilon(\delta)$ tal que, para todo $\epsilon \leq \epsilon(\delta)$:

$$C R^{(3p-6)/2p} t^{6/p-4} \epsilon^{3/2-3/p} \leq t^{6/p-4} \frac{\delta}{2}. \quad (5.34)$$

Por tanto, teniendo en cuenta (5.33) y (5.34) en (5.31) y (5.32), respectivamente, se llega a

$$|(\theta[V_\epsilon]W_\epsilon, \Phi)| \leq t^{6/p-4}\delta$$

para $t \in [0, T]$, con lo que concluye la demostración.

En el próximo resultado describimos el comportamiento asintótico de la densidad cuántica de posición (en [74] se propone una aproximación diferente).

Proposición 5.3.3. *La densidad de posición reescalada $n_\epsilon(x, t)$ para el problema de Schrödinger–Poisson en tres dimensiones converge débilmente como medidas hacia la masa de Dirac $\delta_0(x)$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$.*

Demostración.- Este límite existe débilmente como medidas (posiblemente después de la extracción de una subsucesión) debido a la acotación de la sucesión n_ϵ en $L^1(\mathbb{R}_x^3)$ independientemente de ϵ . La idea básica para obtener esta convergencia radica en pasar al límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$ en el problema de Wigner reescalado (5.28), con condición inicial dada por

$$W_\epsilon^0(x, \xi) \stackrel{\text{def}}{=} W_\epsilon(x, \xi, t=0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_y^3} \bar{\varphi}_\epsilon(x + \frac{y}{2}) \varphi_\epsilon(x - \frac{y}{2}) e^{-iy \cdot \xi} dy.$$

Recordamos que este problema está bien planteado en el sentido de las distribuciones, de tal manera que habremos de pasar al límite bajo la siguiente formulación débil:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_0^\infty W_\epsilon(x, \xi, \tau) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + \epsilon(\xi \cdot \nabla_x) \Phi \right) (x, \xi, \tau) d\tau d\xi dx \\ & \quad + \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \Phi(x, \xi, 0) W_\epsilon^0(x, \xi) d\xi dx \\ & \quad - \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_0^\infty (H_\epsilon *_\xi W_\epsilon)(x, \xi, \tau) \Phi(x, \xi, \tau) d\tau d\xi dx = 0, \end{aligned} \quad (5.35)$$

para toda $\Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3 \times \mathbb{R}_\tau^+)$. Ahora utilizamos el hecho de que, para una función suficientemente regular Φ , su transporte lineal reescalado con respecto a la dirección x , descrito por $\partial_\tau \Phi + \epsilon(\xi \cdot \nabla_x) \Phi$, es equivalente a la derivada convectiva

$$\frac{d}{d\tau} (\Phi(x + \epsilon \xi \tau, \xi, \tau)) \quad (5.36)$$

evaluada en coordenadas de posición transportadas a lo largo de las características $x + \epsilon\xi\tau$. Entonces introducimos una familia especial de funciones test en (5.35) dada por la elección de la siguiente sucesión de funciones con variables separadas:

$$\Phi_R(x, \xi, \tau) = \alpha(x)\beta_R(\xi)\gamma_R(\tau), \quad (5.37)$$

donde $\alpha \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, $\beta_R(\xi) = \beta(\xi/R)$ con $\beta \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, $0 \leq \beta \leq 1$, $\beta \equiv 1$ en B_1 y $\beta \equiv 0$ en el conjunto complementario de B_2 , y donde $\gamma_R(\tau) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^+)$ satisface

$$\gamma_R(\tau) = \begin{cases} 1, & \text{si } \frac{1}{R} < \tau < t - \frac{1}{R} \\ 0, & \text{si } \tau \leq 0 \text{ ó } \tau \geq t \end{cases}.$$

Recordamos que aquí B_R representa a la bola euclídea de \mathbb{R}^3 centrada en el origen y de radio R . Sea h la función de Heavyside definida por

$$h(\tau) = \begin{cases} 1, & \text{si } 0 < \tau < t \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases}.$$

Si introducimos entonces la expresión (5.36) y la sucesión (5.37) a modo de función test en (5.35), obtenemos la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_0^t W_\epsilon(x + \epsilon\xi\tau, \xi, \tau) \alpha(x + \epsilon\xi\tau) \beta_R(\xi) \frac{d\gamma_R}{d\tau} d\tau d\xi dx \\ & + \epsilon \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_0^t W_\epsilon(x + \epsilon\xi\tau, \xi, \tau) \beta_R(\xi) \gamma_R(\tau) (\xi \cdot \nabla_x) \alpha(x + \epsilon\xi\tau) d\tau d\xi dx \\ & - \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_0^t (H_\epsilon *_{\xi} W_\epsilon)(x + \epsilon\xi\tau, \xi, \tau) \alpha(x + \epsilon\xi\tau) \beta_R(\xi) \gamma_R(\tau) d\tau d\xi dx = 0. \end{aligned}$$

Usando el teorema de Fubini y haciendo el cambio de variable $x + \epsilon\xi\tau \mapsto x$ tenemos:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_0^t W_\epsilon(x, \xi, \tau) \alpha(x) \beta\left(\frac{\xi}{R}\right) \frac{d\gamma_R}{d\tau} d\tau d\xi dx \\ & + \epsilon \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_0^t W_\epsilon(x, \xi, \tau) \beta\left(\frac{\xi}{R}\right) \gamma_R(\tau) (\xi \cdot \nabla_x) \alpha(x) d\tau d\xi dx \\ & - \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_0^t (H_\epsilon *_{\xi} W_\epsilon)(x, \xi, \tau) \alpha(x) \beta\left(\frac{\xi}{R}\right) \gamma_R(\tau) d\tau d\xi dx = 0. \quad (5.38) \end{aligned}$$

Estudiamos en primer lugar el comportamiento en el límite del primer término de la ecuación (5.38). Para ello, primero observamos que $\frac{d}{d\tau}\gamma_R$ converge débilmente como medidas hacia $\delta(\tau = t) - \delta(\tau = 0)$ cuando $R \rightarrow \infty$ en dualidad con $W_\epsilon(x, \xi, \cdot)$, que es continua con respecto a τ en $[0, t]$. Esta propiedad de continuidad da sentido, al mismo tiempo, a la integral

$$\int_0^t W_\epsilon(x, \xi, \tau) \frac{dh}{d\tau} d\tau.$$

Asímismo, $\beta(\xi/R)$ converge hacia 1 punto a punto (para todo ξ) cuando R tiende a infinito y, como $\alpha \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ no depende de R , usamos la dualidad en $L^2(\mathbb{R}_x^3)$ existente entre α y el resto de términos para pasar al límite. Entonces, después de hacer R tender a infinito, integrar con respecto a las variables τ y ξ y utilizar la fórmula (5.27) para la densidad de posición, obtenemos la expresión

$$\int_{\mathbb{R}_x^3} n_\epsilon(x, t) \alpha(x) dx - \int_{\mathbb{R}_x^3} n_\epsilon(x, 0) \alpha(x) dx. \quad (5.39)$$

Como $n_\epsilon(x, 0) = \epsilon^{-3} n(\epsilon^{-1}x, 0)$ tenemos que

$$\int_{\mathbb{R}_x^3} n_\epsilon(x, 0) \alpha(x) dx = \int_{\mathbb{R}_x^3} n(x, 0) \alpha(\epsilon x) dx,$$

de forma que al pasar al límite $\epsilon \rightarrow 0$ en (5.39) obtenemos

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}_x^3} n_\epsilon(x, t) \alpha(x) dx - \langle \delta_0, \alpha \rangle \quad (5.40)$$

para toda $\alpha \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, donde hemos tenido en cuenta que $\|n(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} = 1$ para todo $t \geq 0$.

Ahora, como β tiene soporte compacto en el interior de B_2 , observamos que ha de verificarse la condición $|\xi| < 2R$ para que β no se anule. Entonces el segundo término de (5.38) está acotado por la cantidad

$$2t\epsilon R^{\frac{5}{2}} \|W_\epsilon\|_{L^\infty((0,t); L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))} \|\nabla_x \alpha\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \|\beta\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}, \quad (5.41)$$

que podemos hacerla tan pequeña como deseemos al considerar R del mismo orden de magnitud que ϵ^c con $c > -\frac{2}{5}$. De la misma forma, conforme a las estimaciones dadas en la demostración del Lema 5.3.2, se deduce fácilmente que el término no lineal está acotado por

$$\left| \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_0^t (H_\epsilon *_{\xi} W_\epsilon)(x, \xi, t) \alpha(x) \beta\left(\frac{\xi}{R}\right) \gamma_R(\tau) d\tau d\xi dx \right| \leq \delta \int_0^t \tau^{6/p-4} \gamma_R(\tau) d\tau, \quad (5.42)$$

con δ arbitrariamente pequeño y $t > 0$ fijo, para $p > 2$.

Finalmente, teniendo en cuenta las contribuciones de (5.41) y (5.42), si hacemos $\epsilon = \epsilon(R)$ adecuado observamos que el segundo y el tercer término de (5.38) se anulan cuando R tiende a infinito (o, equivalentemente, cuando $\epsilon \rightarrow 0$, $\delta \rightarrow 0$). Por tanto, a raíz de (5.40) obtenemos finalmente que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3} n_\epsilon(x, t) \alpha(x) dx = \langle \delta_0, \alpha \rangle \quad (5.43)$$

para toda $\alpha \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, con lo cual concluye la demostración.

Observación.- Existe un método alternativo para demostrar que n_ϵ converge débilmente como medidas hacia una masa de Dirac centrada en el origen. Este nuevo método consiste en aplicar la versión generalizada del teorema de compacidad de Ascoli-Arzelá al conjunto $\{|\psi_\epsilon(\cdot, t)|^2, \epsilon \leq 1\}$, usando la acotación del momento de segundo orden de $|\psi_\epsilon|^2$ (en el contexto de [63], Lema 5.6) junto con el teorema de Prohorov (ver Apéndice), que nos proporciona los subconjuntos débil- \star relativamente compactos de $\{\mathcal{M}(\mathbb{R}^3), \|\mu\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^3)} = 1\}$, donde $\mathcal{M}(\mathbb{R}^3)$ representa a la clase de medidas de Radon no negativas en \mathbb{R}^3 . En esta situación obtenemos la misma conclusión que en la Proposición 5.3.3 (en [23] se puede encontrar una demostración similar para el caso del sistema de Vlasov-Poisson-Fokker-Planck).

Es significativo que no podamos obtener información sobre las soluciones del sistema de Schrödinger-Poisson original (no reescalado) directamente a partir del límite de la densidad reescalada, ya que no es posible “retroceder en el parámetro de escala” cuando tratamos con una masa de Dirac. Sin embargo, el límite de la sucesión de densidades reescaladas nos permite identificar el límite del potencial reescalado. Para ello, una vez que hemos reconocido la densidad asintótica como una delta de Dirac retornamos a la ecuación de Poisson (5.24) para deducir de forma inmediata el acoplamiento elíptico asociado al problema límite, como quedó establecido en el Teorema 5.1.1.

Demostración del Teorema 5.1.1.- La ecuación (5.16) se obtiene después de pasar al límite $\epsilon \rightarrow 0$ en la ecuación (lineal) de Poisson reescalada (5.24). Respecto del segundo miembro acabamos de probar que n_ϵ tiende débilmente como medidas hacia una masa de Dirac centrada en $x = 0$ o, equivalentemente, fuertemente en $W^{-1,s}(\Omega)$ con $1 \leq s < 3/2$ (ver Lema 5.2.1 (iii)). Por consiguiente, la convergencia para el primer miembro es fuerte en $W^{1,s}(\Omega)$ para el mismo rango de s , lo cual proporciona compacidad en $L^p(\Omega)$ para $1 \leq p < 3$. Entonces, V_∞ es una solución

débil de (5.16) que responde a la fórmula

$$V_\infty(x) = K(x) * \delta_0(x) = K(x), \quad (5.44)$$

donde el núcleo de la convolución K es el potencial de Coulomb en tres dimensiones. La demostración concluye al hacer $t = 1$ y $\epsilon = t^{-1}$.

5.4 Compacidad débil de la sucesión de funciones de onda

La conservación de la norma L^2 para la sucesión de funciones de onda reescaladas $\{\psi_\epsilon(\cdot, t)\}_\epsilon$ es utilizada de forma esencial en esta sección para deducir su compacidad débil. De hecho, como

$$\|\psi_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \|\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1,$$

el teorema de Banach–Alaoglu garantiza que, para todo instante fijo t , la sucesión $\psi_\epsilon(\cdot, t)$ es compacta en la topología débil de $L^2(\mathbb{R}^3)$. Además, es posible probar también que $\{\psi_\epsilon\}_\epsilon$ es débilmente equicontinua con respecto al tiempo, como se muestra en el siguiente resultado:

Lema 5.4.1. *Sea $\Phi \in C_0^2(\mathbb{R}^3)$. Entonces, el conjunto de funciones definido por*

$$t \longrightarrow \Psi_\epsilon(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_\epsilon(x, t) \Phi(x) dx$$

es equicontinuo en $[0, T]$.

Demostración.- Fijamos $R > 0$ de forma que $\text{supp}(\Phi) \subset B_R$. Multiplicando la ecuación reescalada (5.23) por Φ e integrando con respecto a las variables x y t obtenemos:

$$\Psi_\epsilon(t) - \Psi_\epsilon(s) = i \int_s^t \int_{\mathbb{R}^3} \psi_\epsilon(x, \tau) \left(\frac{\epsilon}{2} \Delta \Phi(x) - V_\epsilon(x, \tau) \Phi(x) \right) dx d\tau.$$

Como $\Phi \in C_0^2(\mathbb{R}^3)$, la desigualdad de Hölder nos proporciona

$$|\Psi_\epsilon(t) - \Psi_\epsilon(s)| \leq C|t - s| \left(\|\Delta \Phi\|_{L^2(B_R)} + \|\Phi\|_{L^\infty(B_R)} \|V_\epsilon\|_{L^\infty((0, \infty); L^2(B_R))} \right),$$

donde C es una constante positiva que no depende de ϵ y donde hemos usado la identidad (5.20) y el hecho de que $\|V_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^2_{loc}} \leq C\|V_\epsilon(\cdot, t)\|_{M^3}$. Como consecuencia, el conjunto es equicontinuo.

Entonces la versión generalizada del teorema de Ascoli–Arzelá nos permite obtener, de cada sucesión $\{\epsilon_n\} \rightarrow 0$, una subsucesión (que denotaremos con el mismo índice) tal que

$$\psi_{\epsilon_n} \rightharpoonup \psi_\infty \quad \text{en } C_w([0, T]; L^2(\mathbb{R}^3)),$$

donde $C_w([0, T]; L^2(\mathbb{R}^3))$ denota el espacio de funciones continuas de $[0, T]$ en $L^2(\mathbb{R}^3)$ en la topología débil de $L^2(\mathbb{R}^3)$. En lo que resta de capítulo omitiremos el subíndice n cuando nos refiramos a estas subsucesiones.

Para identificar la función límite observamos en primer lugar que ψ_∞ no es la función idénticamente nula en L^2 debido a la conservación con respecto a ϵ y a t de la norma $L^{\infty, 2}$ de la sucesión ψ_ϵ , y consecuentemente en virtud de la ecuación lineal satisfecha por el potencial límite V_∞ , que nos conduce a (5.44). Recordemos también que en principio no podemos obtener información alguna sobre el comportamiento asintótico (cuando $t \rightarrow \infty$) de la función de onda ψ a partir del hecho de que la densidad límite se comporte como una medida de Dirac. Para superar esta dificultad reescribiremos las propiedades de convergencia obtenidas para las sucesiones ψ_ϵ y V_ϵ de la siguiente forma: fijamos $t = 1$ y hacemos $\epsilon = t^{-1}$ con lo cual obtenemos, para todo conjunto compacto $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ y cuando $t \rightarrow \infty$,

$$t\mathcal{D}_t V(x, t) \longrightarrow \frac{\gamma}{4\pi|x|} \quad \text{fuertemente en } L^p(\Omega), \quad 1 \leq p < 3,$$

y

$$t^{3/2}\mathcal{D}_t \psi(x, t) \longrightarrow \psi_\infty(x) \quad \text{en } C_w([0, T]; L^2(\mathbb{R}^3)).$$

Además, las subsucesiones $\tilde{V}(x, t) = tV(tx, t)$ y $\tilde{\psi}(x, t) = t^{3/2}\psi(tx, t)$ satisfacen la siguiente ecuación en formulación débil:

$$i\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} - i\frac{3}{2t}\tilde{\psi} - i\frac{1}{t}(x \cdot \nabla_x)\tilde{\psi} = -\frac{1}{2t^2}\Delta_x \tilde{\psi} + \frac{1}{t}\tilde{V}\tilde{\psi}. \quad (5.45)$$

Para obtener la ecuación satisfecha por ψ_∞ igualamos los términos del mismo orden en t en la ecuación (5.45) y luego pasamos al límite cuando $t \rightarrow \infty$, con lo que tenemos en primer lugar que $\partial_t \psi_\infty = 0$ en la aproximación de orden cero

(lo cual ya es conocido a partir de la propia construcción del límite). Asimismo tenemos que $\psi_\infty \in L^2(\mathbb{R}^3)$ es una solución de la ecuación

$$i\frac{3}{2}\psi_\infty + i(x \cdot \nabla_x)\psi_\infty + \frac{\gamma}{4\pi|x|}\psi_\infty = 0 \quad (5.46)$$

en una aproximación de orden t^{-1} . Esta ecuación tiene infinitas soluciones que pueden obtenerse como una perturbación de la solución singular radial $Cr^{-3/2}e^{-i\gamma/4\pi r}$, donde $r = |x|$ y C es una constante independiente de r , aunque podría depender de x cuando buscamos posibles soluciones del problema de Schrödinger–Poisson que verifiquen (5.46). Por tanto, acabamos de demostrar el siguiente resultado:

Teorema 5.4.2. *Supongamos que la hipótesis (5.13) o bien (5.14) es satisfecha. Entonces, el comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes de la función de onda escalar ψ está determinado por la función $\psi_\infty \in L^2(\mathbb{R}^3)$, que es una solución de orden t^{-1} de la ecuación (5.46) en el sentido de las distribuciones. Además, existe una función real $\alpha(t)$ que satisface que $\alpha(t) \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$, tal que se verifica la siguiente estimación para t suficientemente grande:*

$$\alpha(t) \int_{\mathbb{R}_x^3} [\psi(x, t) - t^{-\frac{3}{2}}\mathcal{D}_{t^{-1}}\psi_\infty(x)]t^{-\frac{3}{2}}\mathcal{D}_{t^{-1}}\Phi(x) dx \leq C$$

para toda $\Phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, donde C es una constante positiva que sólo depende del dato inicial φ .

5.5 Comportamiento asintótico de un sistema de ecuaciones de Schrödinger–Poisson

El resultado que acabamos de demostrar para el caso de un estado cuántico puro se puede extender fácilmente al caso de una superposición de los mismos (estado cuántico mixto). Para ello consideraremos ahora un sistema numerable de ecuaciones de Schrödinger

$$\begin{cases} i\frac{\partial\psi^m}{\partial t} = -\frac{1}{2}\Delta_x\psi^m + V\psi^m, & m \in \mathbb{N} \\ \psi^m(x, 0) = \varphi^m(x), \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi^m = 0, \end{cases} \quad (5.47)$$

acoplado con la ecuación de Poisson

$$\Delta_x V = -\gamma n, \quad (5.48)$$

donde la densidad de posición viene dada ahora por

$$n(x, t) = \sum_{m \in \mathbb{N}} \lambda_m |\psi^m(x, t)|^2, \quad \text{con} \quad \sum_{m \in \mathbb{N}} \lambda_m = 1,$$

y donde λ_m representa, para cada $m \in \mathbb{N}$, la probabilidad de ocupación del estado ψ^m . Para estudiar su comportamiento asintótico volvemos a reescalar el sistema según el siguiente grupo de transformaciones:

$$\psi_\epsilon^m(x, t) = \epsilon^{-\frac{3}{2}} \psi^m(\epsilon^{-1}x, \epsilon^{-1}t), \quad V_\epsilon(x, t) = \epsilon^{-1}V(\epsilon^{-1}x, \epsilon^{-1}t)$$

y

$$n_\epsilon(x, t) = \sum_{m \in \mathbb{N}} \lambda_m |\psi_\epsilon^m(x, t)|^2.$$

Observamos en primer lugar que $\|n_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} = 1$. Usando los mismos argumentos de compacidad que para el caso de la ecuación de Hartree vemos que, para todo $m \in \mathbb{N}$, $|\varphi_\epsilon^m(x, t)|^2$ converge débilmente como medidas hacia una masa de Dirac $\delta_0(x)$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Aplicando la aproximación usual de Wigner a la sucesión ψ_ϵ^m y las mismas ideas de la Sección 3, deducimos que $|\psi_\epsilon^m(x, t)|^2$ converge también como medidas hacia $\delta_0(x)$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Usando que $\sum_{m \in \mathbb{N}} \lambda_m = 1$ y la ecuación de Poisson reescalada $\Delta_x V_\epsilon = -\gamma n_\epsilon$, encontramos como antes que $V_\infty = \frac{\gamma}{4\pi|x|}$. Es de destacar que el efecto del límite $\epsilon \rightarrow 0$ con respecto a las variables reescaladas se manifiesta a través del desacoplamiento de los estados superpuestos al nivel de la densidad de partículas. Por consiguiente, el comportamiento con respecto a tiempos grandes de la solución (correspondiente a un estado mixto) de un sistema numerable de ecuaciones de Schrödinger–Poisson (5.47)–(5.48), con dato inicial φ^m que satisface (5.13) ó (5.14), viene descrito por las soluciones del sistema lineal

$$i\frac{3}{2}\psi_\infty^m + i(x \cdot \nabla_x)\psi_\infty^m + \frac{\gamma}{4\pi|x|}\psi_\infty^m = 0, \quad m \in \mathbb{N}, \quad (5.49)$$

en una aproximación de orden t^{-1} .

5.6 Comportamiento asintótico de la ecuación de Wigner–Poisson

Los argumentos desarrollados en las Secciones 3 y 4 son también de gran utilidad para estudiar el comportamiento asintótico de las soluciones de la ecuación de Wigner–Poisson. De hecho, la convergencia débil de W_ϵ en $C_w([0, T]; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ está garantizada, después de la posible extracción de una subsucesión, conforme a la ley de conservación verificada por la norma L^2 :

$$\|W_\epsilon(\cdot, \cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} = \|W(\psi)(\cdot, \cdot, \epsilon^{-1}t)\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}.$$

Si fijamos en primer lugar $t = 1$ e identificamos $\epsilon = t^{-1}$ en las expresiones (5.25) y (5.21) para W_ϵ y V_ϵ , respectivamente, entonces las funciones $\tilde{V}(x, t) = tV(tx, t)$ y $\tilde{W}(x, \xi, t) = W(tx, t^{-1}\xi, t)$ satisfacen la siguiente ecuación en formulación débil:

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial t} + \frac{1}{t^2}(\xi \cdot \nabla_x) \tilde{W} - \frac{1}{t}(x \cdot \nabla_x) \tilde{W} + \frac{1}{t}(\xi \cdot \nabla_\xi) \tilde{W} + \frac{1}{t}\theta[\tilde{V}]\tilde{W} = 0, \quad (5.50)$$

donde \tilde{W} está relacionada con $\tilde{\psi}$ mediante la fórmula

$$\tilde{W}(x, \xi, t) = W(\tilde{\psi})(x, \xi, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_y^3} \tilde{\psi}(x + \frac{y}{2}, t) \tilde{\psi}(x - \frac{y}{2}, t) e^{-iy \cdot \xi} dy$$

con $\tilde{\psi} = t^{3/2}\psi(tx, t)$, y donde

$$\begin{aligned} \theta[\tilde{V}]\tilde{W}(x, \xi, t) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_y^3} \left(\tilde{V}(x + \frac{y}{2}, t) - \tilde{V}(x - \frac{y}{2}, t) \right) \\ &\quad \times \tilde{W}(x, \eta, t) e^{-i(\xi - \eta) \cdot y} dy d\eta = t\theta[V]W(tx, t^{-1}\xi, t). \end{aligned}$$

Entonces, como la sucesión $\tilde{\psi}$ está acotada en $L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}^3))$ y es débilmente equicontinua con respecto al tiempo, la sucesión \tilde{W} también está acotada en el espacio $L^\infty([0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ y converge débilmente en $C_w([0, T]; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ hacia W_∞ .

Al igualar nuevamente términos del mismo orden en t en la ecuación (5.50) y pasar luego al límite cuando $t \rightarrow \infty$, podemos observar en primer lugar que $\partial_t W_\infty = 0$ en una aproximación de orden cero (lo cual ya era conocido a partir de la propia construcción del límite). Asimismo, en la aproximación de orden t^{-1} el

comportamiento asintótico de la función de Wigner W viene dado, en el sentido de las distribuciones, en términos del comportamiento de las soluciones de la ecuación lineal

$$(\xi \cdot \nabla_\xi)W_\infty + (x \cdot \nabla_x)W_\infty = 0. \quad (5.51)$$

Aquí hemos utilizado una reformulación del Lema 5.3.2 en términos de $\theta[\tilde{V}]\tilde{W}$ (haciendo $t = 1$ y $\lambda = t$) para simplificar asintóticamente el término no lineal en (5.50). Por otro lado, el hecho de que el límite W_∞ sea no nulo continúa asegurado, en conformidad con la conservación de la norma $L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ de las funciones de Wigner reescaladas (5.26) con respecto al tiempo y al parámetro de escala, y debido también a la ecuación lineal satisfecha por el potencial. Por tanto, hemos demostrado el siguiente resultado:

Teorema 5.6.1. *Supongamos que la hipótesis (5.13) o bien (5.14) es satisfecha. Entonces existe una función real $\sigma(t)$, que verifica que $\sigma(t) \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$, tal que el comportamiento con respecto a tiempos grandes de la función de Wigner $W(x, \xi, t)$ asociada a la función de onda $\psi(x, t)$, definida por (5.7), está descrito por*

$$\sigma(t) \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} [W(x, \xi, t) - W_\infty(t^{-1}x, t\xi, t)] \Phi(t^{-1}x, t\xi, t) d\xi dx \leq C$$

para toda función $\Phi \in L^2(\mathbb{R}^6)$, donde C es una constante positiva que sólo depende del dato inicial φ y $W_\infty \in L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$ resuelve la ecuación lineal (5.51) en el sentido de las distribuciones, en la aproximación de primer orden t^{-1} .

Con esto concluye la demostración del Teorema 5.1.2.

Capítulo 6

Transformadas de Wigner en espacio-tiempo y límite de altas frecuencias

En este capítulo nos proponemos completar el análisis del comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes del sistema de Schrödinger–Poisson a través del estudio de una familia de soluciones oscilatorias (en tiempo) y el análisis de una sucesión de problemas de Schrödinger–Poisson reescalados. La dificultad ocasionada por la falta de compacidad con respecto al tiempo de esta sucesión de soluciones es superada mediante la introducción de una transformación de Fourier apropiada que afecta no sólo a la variable espacial, como ocurre con la transformada de Wigner usual, sino también a la variable temporal (lo cual conduce a un nuevo concepto de transformada de Wigner), y el posterior análisis de las propiedades de los sistemas de tipo Wigner–Poisson correspondientes. Como detallamos más adelante, este proceso introduce una nueva variable que representa a la frecuencia de las oscilaciones temporales, y proporciona soluciones oscilatorias (con respecto al tiempo) de baja frecuencia para el problema de tipo Wigner asociado, adecuadas para pasar al límite con respecto al parámetro de escala.

Recordamos que la evolución temporal de un electrón en un vacío sujeto a la influencia de un potencial electrostático $V(x, t)$ está gobernada por el problema de valores iniciales de Schrödinger–Poisson para la función de onda escalar $\psi(x, t)$, $x \in \mathbb{R}^3$, $t \geq 0$, que representa a un estado mecano-cuántico puro:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi + V \psi, \quad x \in \mathbb{R}^3, t > 0,$$

$$\psi(x, 0) = \varphi(x),$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x, t) = 0,$$

$$V(x, t) = \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(y, t)|^2}{|x - y|} dy,$$

donde las constantes físicas (la constante de Planck \hbar y la masa del electrón m) han sido nuevamente normalizadas a la unidad por simplicidad en los cálculos. Además el sistema conserva la carga total:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad \forall t \geq 0. \quad (6.1)$$

Las ecuaciones introducidas hasta el momento han de ser entendidas en sentido débil cuando tratamos con soluciones débiles.

La mayor parte de la literatura matemática reciente relacionada con métodos asintóticos para el estudio de modelos de transporte cuántico se apoya en una derivación rigurosa de aproximaciones semiclásicas, para las cuales se emplean métodos de cambio de escala (simple o múltiple) para pasar luego al límite en el/los parámetro/s de escala, con el objetivo de construir soluciones asintóticas que serán interpretadas a la luz del contexto físico subyacente al grupo de transformaciones y el límite de escala elegido. En esta dirección citamos, por ejemplo, los trabajos de P. L. Lions y T. Paul [73], P. A. Markowich y N. J. Mauser [78], P. A. Markowich, N. J. Mauser y F. Poupaud [79], P. Gerard, P. A. Markowich, N. J. Mauser y F. Poupaud [47] y J. C. Guillot, J. Ralston y E. Trubowitz [56].

Como vimos anteriormente, puede establecerse una formulación equivalente al sistema de Schrödinger-Poisson (ver Capítulo 1) en términos de la transformada de Wigner clásica asociada a la matriz de densidad

$$\rho(p, p', t) = \bar{\psi}(p, t)\psi(p', t) \quad \text{c.p.d. } (p, p') \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, t \geq 0,$$

donde $\bar{\psi}$ es el conjugado de la función de onda compleja ψ . Esta transformación da lugar a la ecuación de Wigner

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x)W + \theta[V]W = 0,$$

donde el operador pseudo-diferencial $\theta[V]$ está definido por

$$\begin{aligned} \theta[V]W(x, \xi, t) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \left(V\left(x + \frac{y}{2}, t\right) - V\left(x - \frac{y}{2}, t\right) \right) \\ &\quad \times W(x, \eta, t) e^{-i(\xi - \eta) \cdot y} dy d\eta. \end{aligned}$$

Además, vimos que la densidad de partículas $n(x, t)$ podía recuperarse a partir de la función de Wigner mediante el cálculo de su valor medio con respecto a la variable de momento:

$$n(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} W(x, \xi, t) d\xi,$$

y que esta integración se podía justificar mediante un argumento de regularización (ver Capítulo 1).

Estas relaciones existentes entre los sistemas de Schrödinger–Poisson y Wigner–Poisson han motivado un amplio esfuerzo matemático en los últimos años encaminado hacia la obtención de algunas propiedades de existencia, unicidad y regularidad de sus soluciones (ver referencias en el capítulo anterior), así como a arrojar alguna luz sobre su comportamiento para escalas grandes de tiempo y otros límites de escala. En particular, en lo referente al comportamiento asintótico de partículas cuánticas con respecto a tiempos grandes, en [63] se demuestra que el sistema se expande para el caso de interacciones repulsivas (por medio de la denominada ley pseudo-conforme), y se dan algunas estimaciones de caída con respecto al tiempo para las soluciones del sistema de Wigner–Poisson repulsivo a partir de los correspondientes resultados obtenidos para el sistema de Schrödinger–Poisson. En [24] se observa también la expansión del sistema para estados iniciales más débiles (pertenecientes a $L^2(\mathbb{R}^3)$) e interacciones tanto repulsivas como atractivas, bajo la condición de que las partículas deben tener energía cinética infinita (ya que $\nabla_x \psi$ no pertenece a $L^2(\mathbb{R}^3)$), por lo que instantáneamente se van a infinito ($x\psi$ no pertenece a $L^2(\mathbb{R}^3)$). Estos resultados dejan un hueco abierto en la teoría correspondiente al caso atractivo con energía finita (positiva o negativa), que es el más relevante desde el punto de vista físico. Este caso ha sido recientemente abordado por E. Ruíz Arriola y J. Soler en [88] y [89], quienes demuestran la expansión no acotada del sistema para el caso de energía positiva y la existencia de “modos respiratorios” (soluciones periódicas en tiempo espacialmente localizadas) que bifurcan desde la solución de energía mínima para el caso de energías negativas.

El fundamento de las técnicas que utilizaremos en este capítulo para analizar el comportamiento asintótico de las soluciones del sistema de Schrödinger–Poisson parece no haber sido explotado en la literatura matemática previa. De hecho, el objeto matemático introducido en la siguiente sección, que extiende en cierto sentido (a precisar) el concepto clásico de transformada de Wigner, pudiera ser de gran utilidad para futuras aplicaciones, en particular las relacionadas con el análisis matemático de las ecuaciones que rigen la evolución de las funciones de Green asociadas a sistemas cuánticos fuera de equilibrio formulados en segunda

cuantización. Por simplicidad en la notación consideraremos en primer lugar el caso de un estado cuántico puro. Sin embargo, las técnicas y los resultados que obtendremos en este marco se pueden generalizar de forma sencilla para incluir el caso de un estado cuántico mixto (ver Sección 4).

Consideramos el siguiente grupo de escala que conserva la norma L^2 :

$$\psi_\epsilon(x, t) = \psi(x, \epsilon^{-1}t), \quad (6.2)$$

donde ϵ es un parámetro positivo destinado a tender a cero. Esta función de onda verifica el siguiente sistema reescalado de Schrödinger-Poisson:

$$i\epsilon \frac{\partial \psi_\epsilon}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi_\epsilon + V_\epsilon \psi_\epsilon, \quad (6.3)$$

$$\psi_\epsilon(x, 0) = \varphi(x), \quad (6.4)$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi_\epsilon = 0, \quad (6.5)$$

$$V_\epsilon(x, t) = \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi_\epsilon(y, t)|^2}{|x - y|} dy. \quad (6.6)$$

En lo que sigue denotaremos por SP_ϵ al problema (6.3)–(6.6). Conviene destacar que el estudio del sistema SP_ϵ tiene interés en sí mismo debido a la presencia de soluciones de carácter oscilatorio en tiempo, lo que hace que el análisis del límite $\epsilon \rightarrow 0$ sea particularmente atractivo. En efecto, proponemos el siguiente perfil estacionario reescalado

$$\psi_\epsilon(x, t) = e^{-i\mathcal{E}t/\epsilon} \Phi(x) \quad (6.7)$$

para ilustrar el comportamiento oscilatorio de una clase de soluciones de SP_ϵ y, por tanto, la correspondiente falta de compacidad en tiempo. En esta expresión \mathcal{E} es un valor propio relacionado con la energía total del electrón en el campo coulombiano y $\Phi(x)$ es una función propia asociada al valor propio \mathcal{E} del problema estacionario

$$\mathcal{E}\Phi(x) = -\frac{1}{2} \Delta_x \Phi(x) + \frac{\gamma}{4\pi} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\Phi(y)|^2}{|x - y|} dy \right) \Phi(x).$$

Se deduce, por tanto, que las soluciones de SP_ϵ pueden ser altamente oscilatorias con respecto al tiempo, de forma que el paso al límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$ en SP_ϵ no es evidente y esta es la razón por la que las oscilaciones temporales deben ser, en

cierto sentido, mitigadas. Algunos estudios recientes que involucran medidas de Wigner asociadas a la propagación de ondas de alta frecuencia han sido realizados por L. Ryzhik, G. C. Papanicolaou y J. B. Keller en [90] y L. Miller en [81], aunque bajo diferentes perspectivas y utilizando técnicas distintas a las nuestras.

Para nuestro análisis consideraremos datos iniciales $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^3)$ y trabajaremos en el marco de soluciones débiles en $H^2(\mathbb{R}^3)$ (consultar [63]), es decir:

$$\psi \in C([0, \infty); H^2(\mathbb{R}^3)) \cap C^1([0, \infty); L^2(\mathbb{R}^3)), \quad (6.8)$$

las cuales son también soluciones fuertes del problema de Schrödinger-Poisson en $L^2(\mathbb{R}^3)$. Además,

$$\psi \in L^\infty([0, \infty); H^1(\mathbb{R}^3)). \quad (6.9)$$

Estas propiedades de regularidad son suficientes para cubrir nuestros objetivos, que podrían ser también alcanzados trabajando en un contexto más débil (por ejemplo, el de [24]) que aquí restringimos por claridad en la exposición de las técnicas desarrolladas.

La principal dificultad que encontramos cuando tratamos con la sucesión de funciones de onda $\{\psi_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ es que éstas solamente están acotadas *a priori* en L^∞ con respecto al tiempo. Esta propiedad es heredada por el potencial reescalado a través de la ecuación de Poisson y, como consecuencia, el paso al límite en el término no lineal de (6.3) no es de modo alguno evidente. De hecho, falla para soluciones de tipo (6.7), para las cuales sólo podemos obtener propiedades de acotación uniforme con respecto al tiempo que implican la compacidad débil- \star en $L^\infty(0, \infty)$, sin que ésta sea suficiente para pasar al límite en el término no lineal. Para solventar esta dificultad introducimos una variante de la noción clásica de transformada de Wigner que incluye también una transformación de Fourier con respecto al tiempo, la cual será esencial a la hora de ganar compacidad en la variable temporal para la sucesión de funciones de onda reescaladas y, como consecuencia, el elemento fundamental para pasar al límite. Cuando el sistema SP_ϵ experimenta la transformación temporal referida anteriormente, una nueva variable τ —que representa a la frecuencia temporal de las oscilaciones de las soluciones— entra en juego como la variable dual de Fourier de un cambio de coordenadas en la variable temporal. En efecto, transformamos la sucesión ψ_ϵ de la siguiente forma:

$$W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) \sim \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_y^3} \int_{\mathbb{R}_s} \bar{\psi}_\epsilon(x + \frac{y}{2}, t + \frac{s}{2}) \psi_\epsilon(x - \frac{y}{2}, t - \frac{s}{2}) e^{-iy \cdot \xi} e^{-is\tau} ds dy,$$

donde el símbolo “ \sim ” indica que esta definición ha de ser precisada, entendiéndose que ha de introducirse (como veremos en la próxima sección) una función característica adecuada para la variable de desplazamiento temporal s con el objeto de proporcionar el sentido correcto a las variables temporales desplazadas y al dato inicial. Esto nos conducirá a que $W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) = W(x, \xi, \epsilon^{-1}t, \epsilon\tau)$, donde $W(x, \xi, t, \tau)$ representa ahora a la transformada de Wigner en espacio-tiempo (sin reescalar) asociada a ψ . Por tanto, queda claro ahora que la nueva transformada de Wigner reescalada produce un efecto atenuante sobre las oscilaciones temporales conforme el tiempo crece. En este punto hacemos referencia al trabajo de F. A. Buot y K. L. Jensen [18], donde se define una función de distribución cuántica general que incluye transformaciones espacio-temporales por medio de la denominada transformación de Weyl. Sin embargo, nuestra motivación, que se adhiere a un marco más cercano al de las ecuaciones en derivadas parciales, es bastante diferente. En particular, está basada en la búsqueda de una ecuación asintótica válida para tiempos grandes que describa globalmente el conjunto de atractores de los sistemas de Schrödinger/Wigner-Poisson, siendo ésta posiblemente adecuada para el estudio, por ejemplo, de soluciones periódicas.

El siguiente paso consiste en estudiar las propiedades de la sucesión $\{W_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ de funciones de Wigner reescaladas (estimaciones *a priori*), que han de permitirnos pasar al límite en el parámetro de escala ϵ y obtener una función límite W_∞ y la correspondiente ecuación límite por ella satisfecha. Finalmente, identificamos el límite “retrocediendo” sobre las variables reescaladas, eligiendo $t = 1$ y luego $\epsilon^{-1} = t$ con objeto de conseguir información sobre los observables originales (no reescalados) asociados a la evolución, tales como la densidad cuántica de posición. De hecho, en el límite ésta se obtendrá a partir de W_∞ de la forma natural:

$$n_\infty(x, t) = \int_{\mathbb{R}^r} \int_{\mathbb{R}^s} W_\infty(x, \xi, t, \tau) d\xi d\tau.$$

Esta integración será justificada en la sección 3.

Comenzamos introduciendo en detalle la formulación de Wigner extendida basada en transformaciones de Fourier espacio-temporales y estableciendo el correspondiente problema de valores iniciales reescalado sobre el que pasaremos al límite.

6.1 Transformadas de Wigner en espacio-tiempo

En esta sección introducimos las transformadas de Wigner espacio-temporales. Una partícula mecano-cuántica está completamente descrita por una matriz de densidad, es decir, un operador positivo, hermítico y de clase traza actuando sobre $L^2(\mathbb{R}^3)$. Definimos la matriz de densidad asociada al estado cuántico puro ψ como la función de correlación de ψ en dos posiciones e instantes diferentes, es decir:

$$\rho(p, p', r, r') = \bar{\psi}(p, r)\psi(p', r') \quad \text{c.p.d. } (p, p') \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, r, r' \geq 0. \quad (6.10)$$

Claramente,

$$\rho(p, p', r, r') = \bar{\rho}(p', p, r', r). \quad (6.11)$$

Además, de las propiedades de las soluciones de la ecuación de Schrödinger-Poisson deducimos (ver [63])

$$\rho \in C(\mathbb{R}_r^+ \times \mathbb{R}_{r'}^+; H^2(\mathbb{R}_p^3 \times \mathbb{R}_{p'}^3)) \cap C^1(\mathbb{R}_r^+ \times \mathbb{R}_{r'}^+; L^2(\mathbb{R}_p^3 \times \mathbb{R}_{p'}^3)),$$

por lo que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial r} &\in C(\mathbb{R}_r^+; C^1(\mathbb{R}_{r'}^+; L^2(\mathbb{R}_p^3 \times \mathbb{R}_{p'}^3))), \\ \frac{\partial \rho}{\partial r'} &\in C(\mathbb{R}_{r'}^+; C^1(\mathbb{R}_r^+; L^2(\mathbb{R}_p^3 \times \mathbb{R}_{p'}^3))), \end{aligned}$$

y por tanto ρ puede ser considerado como el núcleo de un operador (matriz de densidad) de Hilbert-Schmidt y acotado en $L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$(R(r, r')f)(p) = \int_{\mathbb{R}_{p'}^3} \rho(p, p', r, r')f(p') dp', \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}^3). \quad (6.12)$$

Las propiedades de regularidad no homogéneas

$$\rho \in C(\mathbb{R}_{r'}^+; C^1(\mathbb{R}_r^+; L^2(\mathbb{R}_p^3) \times H^2(\mathbb{R}_{p'}^3))) \cap C(\mathbb{R}_r^+; C^1(\mathbb{R}_{r'}^+; L^2(\mathbb{R}_{p'}^3) \times H^2(\mathbb{R}_p^3)))$$

también se verifican.

El rasgo distintivo de esta construcción con respecto a la descripción en términos de la matriz de densidad usual procede de la evaluación de ψ y $\bar{\psi}$ en dos escalas de tiempo distintas r y r' , dando lugar a una función de correlación temporal la cual contiene, en un contexto físico, la información dinámica sobre la evolución de las excitaciones de las partículas.

Una verificación simple muestra que la matriz de densidad reescalada ρ_ϵ , definida por

$$\rho_\epsilon(p, p', r, r') = \bar{\psi}_\epsilon(p, r)\psi_\epsilon(p', r'),$$

satisface la siguiente ecuación de movimiento reescalada de tipo von Neumann-Poisson:

$$i\epsilon\left(\frac{\partial}{\partial r'} + \frac{\partial}{\partial r}\right)\rho_\epsilon = (H'_p - H_p)\rho_\epsilon,$$

$$\rho_\epsilon^I(p, p') \stackrel{\text{def}}{=} \rho_\epsilon(p, p', 0, 0) = \bar{\varphi}_\epsilon(p)\varphi_\epsilon(p'),$$

$$\Delta_x V_\epsilon = -\gamma n_\epsilon,$$

que gobierna la evolución en “tiempo doble” de la matriz de densidad, donde los subíndices p y p' indican las variables sobre las que actúa el operador hamiltoniano

$$H = -\frac{1}{2}\Delta + V.$$

En el siguiente lema listamos algunas de las propiedades satisfechas por el operador matriz de densidad generalizado (en el sentido de la correlación temporal).

Lema 6.1.1. *Las siguientes afirmaciones son satisfechas:*

- (i) $R(r, r')$ es un operador lineal y acotado en $L^2(\mathbb{R}^3)$.
- (ii) $R(r, r')$ es un operador de clase traza. Además, la carga total del sistema viene dada por la expresión

$$Q = \text{tr}(R(r, r'))|_{r=r'}.$$

- (iii) $R(r, r')$ no es autoadjunto. De hecho, el operador adjunto de $R(r, r')$ es $R(r', r)$. Por tanto, la restricción de $R(r, r')$ a la diagonal temporal $R(r, r')|_{r=r'}$ es un operador autoadjunto.
- (iv) Supongamos que ρ^I es semidefinida positiva. Entonces $R(r, r')$ es no negativa en el sentido de los operadores semidefinidos positivos.

Demostración.- (i) es una consecuencia inmediata de la definición (6.12) del operador matriz de densidad $R(r, r')$. Para probar (ii) observamos en primer lugar que

$$\text{tr}(R(r, r')) = \int_{\mathbb{R}^3} \rho(p, p, r, r') dp = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(p, r)\psi(p, r') dp,$$

de forma que $\text{tr}|R(r, r')| \leq \|\psi\|_{L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}^3))}^2 = 1$. (iii) se deduce de (6.11) de forma inmediata. Finalmente, la afirmación (iv) se prueba utilizando las técnicas de [77]. En particular, ρ admite la siguiente representación en términos del grupo dinámico cuántico de operadores unitarios $\exp(iHt)$:

$$\rho(p, p', r, r') = \sum_{n \in \mathbb{N}} \lambda_n \exp(iH_p r) \Phi_n(p) \exp(-iH_{p'} r') \Phi_n(p'),$$

donde λ_n es la sucesión real de valores propios no negativos de $R^I = R(0, 0)$. Esto concluye la demostración.

Nótese que

$$\frac{\partial \psi_\epsilon}{\partial t}(x, t) = \epsilon^{-1} \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, \epsilon^{-1} t),$$

por lo que

$$\frac{\partial \rho_\epsilon}{\partial r}(p, p', r, r') = \epsilon^{-1} \psi(p', \epsilon^{-1} r') \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial r}(p, \epsilon^{-1} r), \quad (6.13)$$

mientras que una expresión simétrica se verifica para $\partial_{r'} \rho_\epsilon$. Por otro lado, como la densidad de posición reescalada viene dada por

$$n_\epsilon(x, t) = |\psi_\epsilon(x, t)|^2,$$

que claramente pertenece a $L^1(\mathbb{R}^3)$, podemos obtener formalmente n_ϵ a partir de ρ_ϵ por medio de la identificación natural

$$n_\epsilon(x, t) = \rho_\epsilon(x, x, t, t). \quad (6.14)$$

Sin embargo, la restricción de ρ_ϵ a la diagonal espacio-temporal $\{p = p', r = r'\}$ supone la evaluación de la misma en un conjunto de medida cero, y por tanto no es obvio que la identidad (6.14) tenga sentido y que $\rho_\epsilon(x, x, t, t)$ pertenezca a $L^1_+(\mathbb{R}^3)$, al igual que ocurriese para el caso de la función de Wigner usual. Para solventar esta dificultad consideramos en primer lugar la siguiente transformación de coordenadas (cambiando a las variables de centro de masas x, t y relativas η, s):

$$x = \frac{p + p'}{2}, \quad \eta = p - p', \quad t = \frac{r + r'}{2}, \quad s = r - r'$$

con $x, \eta \in \mathbb{R}^3$, $t \geq 0$ y s variando en el intervalo $[-2t, 2t]$. Esta elección del intervalo de variación de s da coherencia a los desplazamientos temporales en las definiciones de $r(t, s)$ y $r'(t, s)$:

$$r = t + \frac{s}{2}, \quad r' = t - \frac{s}{2},$$

ya que la condición inicial del problema de valores iniciales de Schrödinger original (no reescalado) fue fijada para $t = 0$. Introducimos entonces la siguiente función auxiliar:

$$u_\epsilon(x, \eta, t, s) = \rho_\epsilon\left(x + \frac{\eta}{2}, x - \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}, t - \frac{s}{2}\right)\chi^t(s), \quad (6.15)$$

donde

$$\chi^t(s) = \frac{1}{4t}\chi\left(\frac{s}{2t}\right) \quad (6.16)$$

y

$$\chi(u) = \begin{cases} 1 & \text{si } |u| \leq 1 \\ 0 & \text{si } |u| > 1 \end{cases}$$

es la función característica del intervalo $[-1, 1]$. Ahora la densidad n_ϵ asociada a la matriz de densidad ρ_ϵ puede ser obtenida de la siguiente forma:

$$n_\epsilon(x, t) = 4t u_\epsilon(x, \eta, t, s)|_{\eta=0, s=0}. \quad (6.17)$$

Entonces definimos la “transformada de Wigner extendida” como la transformada inversa de Fourier de u_ϵ con respecto a los argumentos (η, s) . Cuando esta transformación viene asociada al estado cuántico puro ψ_ϵ , obtenemos la siguiente expresión explícita:

$$\begin{aligned} W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_s} u_\epsilon(x, \eta, t, s) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{4t} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{-2t}^{2t} \bar{\psi}_\epsilon\left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}\right) \psi_\epsilon\left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}\right) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Observamos que nuestra formulación extendida se reduce a la formulación de Wigner usual promediando con respecto a τ :

$$w_\epsilon(x, \xi, t) = 4t \int_{\mathbb{R}_\tau} W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) d\tau, \quad (6.19)$$

donde w denota la transformada de Wigner asociada a la matriz de densidad usual:

$$w(x, \xi, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \bar{\psi}\left(x + \frac{\eta}{2}, t\right) \psi\left(x - \frac{\eta}{2}, t\right) e^{-i\eta \cdot \xi} d\eta.$$

Entonces, si denotamos por $W = W(\psi)$ a la transformada de Wigner en espacio-tiempo (no reescalada) asociada a la función de onda ψ , es decir,

$$W(x, \xi, t, \tau)$$

6.1 Transformadas de Wigner en espacio-tiempo

$$= \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{4t} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{-2t}^{2t} \bar{\psi}(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}) \psi(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta \quad (6.20)$$

y

$$W^I(x, \xi) \stackrel{def}{=} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \bar{\varphi}(x + \frac{\eta}{2}) \varphi(x - \frac{\eta}{2}) e^{-i\eta \cdot \xi} d\eta, \quad (6.21)$$

la definición (6.18) proporciona el siguiente resultado:

Lema 6.1.2. *Las siguientes afirmaciones son satisfechas:*

- (i) $W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) = W(x, \xi, \epsilon^{-1}t, \epsilon\tau)$. Como consecuencia, la carga total del sistema se conserva.
- (ii) W_ϵ puede expresarse como un producto de convolución de la siguiente forma:

$$W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) = \frac{1}{(2\pi)^5} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_s} \bar{\psi}_\epsilon(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}) \psi_\epsilon(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta$$

$$*_{\tau} \frac{\text{sen}(2t\tau)}{2t\tau}.$$

Demostración.- (i) se consigue al hacer actuar el grupo de escala sobre la transformada de Wigner espacio-temporal (6.20), después de hacer el cambio de variable $s \mapsto \epsilon^{-1}s$. Entonces, conforme a (6.19) la ley de conservación para la carga total establecida en (6.1) se traduce en

$$4t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) d\tau d\xi dx = \int_{\mathbb{R}_x^3} |\psi_\epsilon(x, t)|^2 dx = 1 \quad (6.22)$$

para todo $t \geq 0$, en términos de la función de Wigner reescalada W_ϵ . (ii) es el resultado de un cálculo directo.

Como en el caso clásico, W es una función real como consecuencia de la propiedad (6.11). Es también destacable el hecho de que el soporte de la función χ^t varía con la escala de tiempo. De hecho, se verifica que

$$(\chi^t(s), \Phi(s)) \longrightarrow (\delta_0, \Phi) \quad \text{cuando } t \rightarrow 0$$

para toda $\Phi \in C_0(\mathbb{R})$, donde δ_0 denota a la masa de Dirac evaluada en $s = 0$. Por tanto, al pasar al límite cuando $t \rightarrow 0$ en (6.20) recuperamos la expresión (6.21)

(que es independiente de τ) como condición inicial del problema de evolución de tipo Wigner satisfecho por W . Como consecuencia, la continuidad en el instante inicial $t = 0$ se conserva a través de esta construcción.

Como es bien sabido, las oscilaciones provocan que las funciones de Wigner asociadas a matrices de densidad arbitrarias positivas y de clase traza no sean no negativas en general (ver, por ejemplo, [73], [78], [80], [96]) por compatibilidad con el principio de incertidumbre. Sin embargo, la formulación extendida presentada con anterioridad tiene en cuenta las oscilaciones correspondientes a diferentes frecuencias (por medio de la variable τ) y localiza el problema, para valores pequeños del parámetro de escala ϵ , bajo nuestra perspectiva de intentar comprender qué ocurre en el límite con respecto a tiempos grandes y número pequeño de oscilaciones.

En el siguiente resultado derivamos la ecuación reescalada de tipo Wigner satisfecha por (W_ϵ, V_ϵ) , donde la función real de cuasi-probabilidad W_ϵ representa ahora el equivalente cuántico de la función de distribución de “tiempo doble” de la mecánica estadística clásica en el espacio de configuraciones.

Proposición 6.1.3. *Sea $(\psi_\epsilon, V_\epsilon)$ una solución débil del problema SP_ϵ . Entonces, para todo $\epsilon > 0$ fijo, el par (W_ϵ, V_ϵ) , con W_ϵ definido por (6.18), es una solución débil del problema*

$$\epsilon \frac{\partial W_\epsilon}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) W_\epsilon + \theta[V_\epsilon] W_\epsilon + \frac{\epsilon}{t} W_\epsilon = \frac{2\epsilon}{\pi} \text{Re} \left(\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} v_\epsilon(x, \xi, t, 2t, \tau) \right) \quad (6.23)$$

en $\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3 \times \mathbb{R}_t^+ \times \mathbb{R}_\tau$, con condición inicial $W^I(x, \xi)$ definida por (6.21), donde

$$v_\epsilon(x, \eta, t, s, \tau) = u_\epsilon(x, \eta, t, s) e^{-is\tau} \quad (6.24)$$

y donde el operador pseudo-diferencial $\theta[V_\epsilon]$ viene dado por la expresión

$$\begin{aligned} & \theta[V_\epsilon] W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) \\ &= \frac{i}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_{\tau'}} \int_{-2t}^{2t} \left(V_\epsilon\left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}\right) - V_\epsilon\left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}\right) \right) \\ & \quad \times W_\epsilon(x, \xi', t, \tau') e^{-i(\xi - \xi') \cdot \eta} e^{-i(\tau - \tau') s} ds d\tau' d\xi' d\eta. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Demostración.- Por simplicidad en la escritura empleamos la siguiente notación:

$$\psi_\epsilon^- = \psi_\epsilon(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}), \quad \bar{\psi}_\epsilon^+ = \bar{\psi}_\epsilon(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2})$$

y

$$V_\epsilon^- = V_\epsilon(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}), \quad V_\epsilon^+ = V_\epsilon(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}).$$

Derivando W_ϵ con respecto al tiempo obtenemos

$$\begin{aligned} & \frac{\partial W_\epsilon}{\partial t}(x, \xi, t, \tau) \\ &= \frac{1}{2i\epsilon} \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{4t} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{-2t}^{2t} (\psi_\epsilon^- \Delta_x \bar{\psi}_\epsilon^+ - \bar{\psi}_\epsilon^+ \Delta_x \psi_\epsilon^-) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta \\ &+ \frac{1}{i\epsilon} \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{4t} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{-2t}^{2t} (V_\epsilon^- \psi_\epsilon^- \bar{\psi}_\epsilon^+ - V_\epsilon^+ \psi_\epsilon^- \bar{\psi}_\epsilon^+) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta \\ &\quad - \frac{1}{4t^2} \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{-2t}^{2t} \bar{\psi}_\epsilon^+ \psi_\epsilon^- e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta \\ &\quad + \frac{2}{(2\pi)^4} \frac{1}{4t} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \bar{\psi}_\epsilon(x + \frac{\eta}{2}, 2t) \varphi_\epsilon(x - \frac{\eta}{2}) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-2it\tau} d\eta \\ &\quad + \frac{2}{(2\pi)^4} \frac{1}{4t} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \bar{\varphi}_\epsilon(x + \frac{\eta}{2}) \psi_\epsilon(x - \frac{\eta}{2}, 2t) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{2it\tau} d\eta. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Entonces, si consideramos la función v_ϵ definida por (6.24), los dos últimos términos de (6.26) contribuyen como

$$\frac{2}{\pi} \text{Re} \left(\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} v_\epsilon(x, \xi, t, 2t, \tau) \right). \quad (6.27)$$

Por otro lado, no es difícil observar que el término que contiene al potencial puede ser identificado como

$$\frac{1}{\epsilon} \theta[V_\epsilon] W_\epsilon, \quad (6.28)$$

donde $\theta[V_\epsilon]$ viene dado por (6.25). Finalmente, los términos primero y tercero del segundo miembro de (6.26) son fácilmente reconocidos como

$$- \frac{1}{\epsilon} (\xi \cdot \nabla_x) W_\epsilon \quad \text{y} \quad - \frac{1}{t} W_\epsilon, \quad (6.29)$$

respectivamente. Agrupando ahora todas las identificaciones obtenidas (6.27)–(6.29) llegamos a la ecuación anunciada.

Observación. La condición inicial W^I , definida por la fórmula (6.21), obviamente no está afectada por nuestro grupo de escala, que sólo actúa sobre la variable temporal. Por tanto, coincide con la transformada de Wigner usual (sin incluir transformaciones temporales), lo cual parece bastante natural en nuestro contexto ya que las oscilaciones aparecen una vez que el sistema evoluciona ($t > 0$).

Bajo esta nueva aproximación de Wigner, la densidad de partículas debe ser entendida como un promedio de frecuencias sobre la imagen de la aplicación

$$\tau \longmapsto \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) d\xi \stackrel{\text{def}}{=} n_{\epsilon, \tau}(x, t),$$

de forma que puede ser recuperada a través de la fórmula

$$n_\epsilon(x, t) = 4t \int_{\mathbb{R}_\tau} n_{\epsilon, \tau}(x, t) d\tau. \quad (6.30)$$

Para justificar esta integración disponemos del siguiente resultado.

Proposición 6.1.4. *La fórmula (6.30), que representa a la densidad cuántica de posición reescalada, está bien definida como función de x y t .*

Demostración.- Consideramos, para cada $\epsilon > 0$, la siguiente regularización:

$$\begin{aligned} & 4t \int_{\mathbb{R}_\tau} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) e^{-\delta|\xi|^2/2} e^{-\delta\tau^2/2} d\xi d\tau \\ &= \frac{1}{(2\pi\delta)^2} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{-2t}^{2t} \bar{\psi}_\epsilon\left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}\right) \psi_\epsilon\left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}\right) e^{-|\eta|^2/2\delta} e^{-s^2/2\delta} ds d\eta. \end{aligned}$$

Entonces, bajo hipótesis de regularidad adecuadas que serán probadas más adelante y en virtud del teorema de la convergencia dominada puede comprobarse fácilmente (después de un simple cambio de variables) que esta expresión converge hacia la densidad reescalada $n_\epsilon(x, t) = |\psi_\epsilon(x, t)|^2$ cuando $\delta \rightarrow 0$.

Un refinamiento bastante útil de la transformada de Wigner usual lo constituyen las funciones de tipo Husimi, comúnmente introducidas en este contexto para

evitar la carencia de positividad exhibida por la función de Wigner. La función de Husimi clásica, como ya sabemos, responde a la siguiente regularización gaussiana:

$$w^H(x, \xi, t) = w(x, \xi, t) *_{x, \xi} \Gamma(x, \xi). \quad (6.31)$$

En nuestro caso definimos

$$W^H(x, \xi, t, \tau) = W(x, \xi, t, \tau) *_{x, \xi} \Gamma(x, \xi), \quad (6.32)$$

de modo que

Lema 6.1.5. W^H es no negativa.

Demostración.- Como el operador matriz de densidad es semidefinido positivo, tenemos:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_y^3} \int_{\mathbb{R}_s} \rho(x, y, t + \frac{s}{2}, t - \frac{s}{2}) \bar{\phi}(y, t - \frac{s}{2}) \phi(x, t + \frac{s}{2}) \chi^t(s) ds dy dx \\ &= \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_y^3} \int_{\mathbb{R}_s} u(x, y, t, s) \bar{\phi}(x - \frac{y}{2}, t - \frac{s}{2}) \phi(x + \frac{y}{2}, t + \frac{s}{2}) ds dy dx \end{aligned} \quad (6.33)$$

para toda $\phi(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}^3)$, $t \in \mathbb{R}$. Entonces, si denotamos por $W(\phi)$ a la función

$$W(\phi)(x, \xi, t, \tau) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_y^3} \int_{\mathbb{R}_s} \bar{\phi}(x + \frac{y}{2}, t + \frac{s}{2}) \phi(x - \frac{y}{2}, t - \frac{s}{2}) e^{-iy \cdot \xi} e^{-is\tau} ds dy$$

y por W a la transformada de Wigner espacio-temporal asociada a ρ :

$$W(x, \xi, t, \tau) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_s} \rho(x + \frac{\eta}{2}, x - \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}, t - \frac{s}{2}) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} \chi^t(s) ds d\eta,$$

se puede observar fácilmente que, como consecuencia de (6.33),

$$\int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} WW(\phi) d\tau d\xi dx \geq 0. \quad (6.34)$$

Finalmente, eligiendo

$$\phi(x, t) = \frac{1}{4\pi^{11/4}} e^{-|x-x_0|^2/2} e^{-i\xi_0 \cdot x} e^{-i\tau_0 t}$$

se obtiene

$$W(\phi)(x, \xi, t, \tau) = \frac{1}{2\pi^4} e^{-|x-x_0|^2 - |\xi-\xi_0|^2} \delta(\tau - \tau_0),$$

de donde se sigue la positividad de W^H al sustituir esta expresión en la fórmula (6.34) (en [73] puede encontrarse un argumento similar).

Observamos en primer lugar que

$$4t \int_{\mathbb{R}_\tau} W^H d\tau = w^H. \quad (6.35)$$

Entonces, en términos de la nueva transformada de Husimi la carga total del sistema viene dada por

$$Q = 4t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} W^H(x, \xi, t, \tau) d\tau d\xi dx.$$

Además, si consideramos

$$\Gamma_\epsilon(x, \xi) = \frac{1}{(\pi\epsilon)^3} e^{-|x|^2/\epsilon - |\xi|^2/\epsilon},$$

entonces la transformada de Husimi reescalada asociada a W_ϵ se define de la siguiente forma:

$$W_\epsilon^H(x, \xi, t, \tau) \stackrel{def}{=} W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) *_{x, \xi} \Gamma_\epsilon(x, \xi) \geq 0.$$

Consecuentemente, para cualquier sucesión $\{\psi_\epsilon\}_\epsilon$ acotada en $L^2(\mathbb{R}^3)$ tenemos que $\{W_\epsilon^H\}_\epsilon$ es una sucesión de funciones no negativas acotada en $L^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3 \times \mathbb{R}_\tau)$ para cada $t > 0$ fijo, por lo que podemos garantizar que converge débil- \star en medidas (salvo extracción de una subsucesión) hacia una medida no negativa W_∞^H .

En lo que sigue nuestro interés se centra en el estudio del comportamiento asintótico de las soluciones del sistema reescalado (6.23)–(6.25) cuando $\epsilon \rightarrow 0$.

6.2 La ecuación límite

Esta sección está dedicada a realizar el paso al límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$ en el problema reescalado (6.23)–(6.25) formulado en la representación del espacio de frecuencias. La densidad de posición de las partículas puede recuperarse a partir

de esta formulación por medio de la equivalencia establecida en la sección anterior, lo cual permite extraer algunas consecuencias asintóticas en el régimen de tiempos grandes sobre el problema de Schrödinger–Poisson original, previa identificación del parámetro de escala ϵ en términos de la variable temporal (en concreto, $t = 1$ y $\epsilon = t^{-1}$). La herramienta fundamental que necesitaremos para pasar al límite $\epsilon \rightarrow 0$ es el teorema de Ascoli–Arzelá generalizado (ver Apéndice).

Comenzamos analizando la regularidad y las propiedades de escala de la sucesión W_ϵ .

Lema 6.2.1. *Para todo $t > 0$ fijo, tenemos que*

$$W_\epsilon(t) \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$$

y

$$\|W_\epsilon(t)\|_{W^{1,\infty}(\mathbb{R}_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))} \leq C_1 + C_2 t,$$

donde C_1, C_2 son constantes positivas independientes de ϵ .

Demostración.— Para todo $t > 0$ fijo, es fácil comprobar que la matriz de densidad auxiliar $u_\epsilon(t)$ pertenece a $L^1(\mathbb{R}_s; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\eta^3))$, ya que

$$\|u_\epsilon(t)\|_{L^1(\mathbb{R}_s; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\eta^3))} \leq \|\psi\|_{L^\infty((0,\infty); L^2(\mathbb{R}_x^3))}^2 = 1.$$

Entonces, por medio de las correspondencias clásicas entre transformadas de Fourier y espacios L^p duales deducimos que

$$W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) = \left(\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \mathcal{F}_{s \rightarrow \tau}^{-1} u_\epsilon \right) (x, \xi, t, \tau) \in L^\infty(\mathbb{R}_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)).$$

Además, por la misma razón

$$i \frac{\partial W_\epsilon}{\partial \tau} (x, \xi, t, \tau) = \mathcal{F}_{s \rightarrow \tau}^{-1} \left(s \chi^t(s) \mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \rho_\epsilon \left(x + \frac{\eta}{2}, x - \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}, t - \frac{s}{2} \right) \right)$$

pertenece a $L^\infty(\mathbb{R}_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$, con

$$\begin{aligned} & \|\partial_\tau W_\epsilon(t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))} \\ & \leq C \|s \chi^t(s) \mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \rho_\epsilon \left(x + \frac{\eta}{2}, x - \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}, t - \frac{s}{2} \right)\|_{L^1(\mathbb{R}_s; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\eta^3))} \leq Ct \end{aligned} \quad (6.36)$$

para todo $t > 0$ fijo, donde C es una constante positiva que no depende de ϵ . Esto concluye la demostración.

Como consecuencia, existe una subsucesión de $\{W_\epsilon(t)\}_{\epsilon \leq 1}$ (a la que denotamos con el mismo índice por simplicidad) y una función $W_\infty(t) \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ tales que

$$W_\epsilon(t) \longrightarrow W_\infty(t) \quad \text{débilmente en } L^\infty(I_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$$

cuando $\epsilon \rightarrow 0$, para todo intervalo acotado $I_\tau \subset \mathbb{R}$. En particular, esta propiedad de convergencia es válida en $L^1(I_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$.

Sin embargo, nosotros demostraremos una propiedad de compacidad más fuerte determinada por la equicontinuidad débil de la sucesión $\{W_\epsilon\}_\epsilon$ con respecto a t y a τ (en un sentido que especificaremos más adelante). Para ello, en primer lugar reformulamos el término pseudo-diferencial no lineal de (6.23) como un producto de convolución:

$$\theta[V_\epsilon]W_\epsilon = H_\epsilon *_{\xi, \tau} W_\epsilon, \quad (6.37)$$

donde

$$\begin{aligned} & H_\epsilon(x, \xi, t, \tau) \\ &= \frac{i}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{-2t}^{2t} \left(V_\epsilon\left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}\right) - V_\epsilon\left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}\right) \right) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta. \end{aligned} \quad (6.38)$$

Esta expresión del término no lineal en forma de convolución está justificada por las propiedades de regularidad del sistema, como veremos en el resultado siguiente. Se puede comprobar fácilmente que

$$\begin{aligned} H_\epsilon(x, \xi, t, \tau) &= i\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \mathcal{F}_{s \rightarrow \tau}^{-1} \left[\left(V_\epsilon\left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}\right) - V_\epsilon\left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}\right) \right) \chi(s) \right] \\ &= 32 \operatorname{Re} [ie^{2i\xi \cdot x} e^{2it\tau} (\mathcal{F}_{x \rightarrow \xi}^{-1} \mathcal{F}_{\tau \rightarrow \tau}^{-1} V_\epsilon \chi_{[0, 2t]}) (2\xi, 2\tau)], \end{aligned} \quad (6.39)$$

donde $\chi_{[0, 2t]}$ es la función característica del intervalo $[0, 2t]$. Por tanto, disponemos de la siguiente cota para el término no lineal:

Lema 6.2.2. *El operador $\theta[V_\epsilon]W_\epsilon$ pertenece a $L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3; L^\infty(\mathbb{R}_\tau)))$. De hecho, se satisface la siguiente estimación:*

$$\|\theta[V_\epsilon]W_\epsilon\|_{L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3; L^\infty(\mathbb{R}_\tau)))} \leq C \|V\|_{L^\infty((0, \infty); L^6(\mathbb{R}^3))} \|\psi\|_{L^\infty((0, \infty); L^3(\mathbb{R}^3))},$$

donde C es una constante positiva independiente de ϵ .

Demostración.- Tenemos que estimar la norma

$$\|\mathcal{F}_{s \mapsto \tau}^{-1} \mathcal{F}_{x \mapsto \xi}^{-1} (V_\epsilon^+ \bar{\psi}_\epsilon^+ \psi_\epsilon^- \chi^t(s))\|_{L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3; L^\infty(\mathbb{R}_\tau)))}.$$

Para ello utilizamos las desigualdades de Hausdorff–Young y de Minkowski para integrales (ver Apéndice) tras lo cual, al deshacer el grupo de escala, se obtiene fácilmente la estimación

$$\begin{aligned} & \|\theta[V_\epsilon]W_\epsilon\|_{L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3; L^\infty(\mathbb{R}_\tau)))} \\ & \leq \frac{\epsilon}{4t} \int_{-2t/\epsilon}^{2t/\epsilon} \left(\int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} |V(z, \frac{t}{\epsilon} + \frac{s}{2})|^2 |\bar{\psi}(z, \frac{t}{\epsilon} + \frac{s}{2})|^2 |\psi(z - \eta, \frac{t}{\epsilon} - \frac{s}{2})|^2 d\eta dz \right)^{1/2} ds \\ & \leq C \|V\|_{L^\infty((0, \infty); L^6(\mathbb{R}^3))} \|\psi\|_{L^\infty((0, \infty); L^3(\mathbb{R}^3))}, \end{aligned}$$

con lo que concluye la demostración.

Ya podemos probar la compacidad débil con respecto al tiempo a través de la siguiente propiedad de equicontinuidad:

Proposición 6.2.3. *Supongamos que $\Phi \in C_0^1(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$. Entonces, los conjuntos de funciones definidos por*

$$t \mapsto F_\epsilon(t) = \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} (W_\epsilon(x, \xi, t, \tau_2) - W_\epsilon(x, \xi, t, \tau_1)) \Phi(x, \xi) d\xi dx$$

$$\tau \mapsto G_\epsilon(\tau) = \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} (W_\epsilon(x, \xi, t_2, \tau) - W_\epsilon(x, \xi, t_1, \tau)) \Phi(x, \xi) d\xi dx$$

son equicontinuos en $[0, T]$ y \mathbb{R}_τ respectivamente, para todo $T > 0$ y $\tau_1, \tau_2 \in \mathbb{R}$, $t_1, t_2 \in [0, \infty)$.

Demostración.- Fijamos $R > 0$ y denotamos por B_R a la bola euclídea en \mathbb{R}^7 centrada en el origen y de radio R , tal que $\text{sop}(\Phi) \subset B_R$. Denotamos también por $\partial_\tau W_\epsilon$ a la derivada débil de W_ϵ con respecto a τ , que por el Lema 6.2.1 sabemos pertenece a $L^\infty(\mathbb{R}_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))$ para cada $t > 0$ fijo.

En primer lugar observamos que

$$F_\epsilon(t_2) - F_\epsilon(t_1) = G_\epsilon(\tau_2) - G_\epsilon(\tau_1)$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \partial_\tau \partial_t W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) \Phi(x, \xi) d\tau dt d\xi dx$$

en sentido débil, para todo $0 \leq t_1 \leq t \leq t_2$. Si ahora utilizamos la ecuación reescalada (6.23) obtenemos la siguiente ecuación equivalente:

$$\begin{aligned} F_\epsilon(t_2) - F_\epsilon(t_1) &= G_\epsilon(\tau_2) - G_\epsilon(\tau_1) \\ &= \frac{1}{\epsilon} \int_{t_1}^{t_2} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \partial_\tau W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) (\xi \cdot \nabla_x) \Phi(x, \xi) d\xi dx d\tau dt \\ &\quad - \frac{1}{\epsilon} \int_{t_1}^{t_2} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \partial_\tau \theta[V_\epsilon] W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) \Phi(x, \xi) d\xi dx d\tau dt \\ &\quad - \int_{t_1}^{t_2} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \frac{1}{t} \partial_\tau W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) \Phi(x, \xi) d\xi dx d\tau dt \\ &\quad + \frac{2}{\pi} \operatorname{Re} \int_{t_1}^{t_2} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \partial_\tau (\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} v_\epsilon)(x, \xi, t, 2t, \tau) \Phi(x, \xi) d\xi dx d\tau dt, \end{aligned} \quad (6.40)$$

donde $\theta[V_\epsilon]W_\epsilon$ está definido por (6.25) y v_ϵ por (6.24).

Denotamos por $I_\epsilon^1, I_\epsilon^2, I_\epsilon^3$ e I_ϵ^4 a los términos primero, segundo, tercero y cuarto, respectivamente, del segundo miembro de (6.40). En primer lugar observamos que I_ϵ^3 puede estimarse de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} |I_\epsilon^3| &\leq |\tau_2 - \tau_1| \|\Phi\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)} \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{t} \|\partial_\tau W_\epsilon(t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}_\tau; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))} dt \\ &\leq C |t_2 - t_1| |\tau_2 - \tau_1|, \end{aligned} \quad (6.41)$$

donde hemos utilizado la estimación (6.36). De ahora en adelante C será una constante positiva que depende de Φ pero no depende de ϵ . El último término está acotado por

$$\begin{aligned} |I_\epsilon^4| &\leq C |t_2 - t_1| |\tau_2 - \tau_1| \\ &\quad \times \|\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \rho(x + \frac{\eta}{2}, x - \frac{\eta}{2}, 2t, 0)\|_{L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))} \|\Phi\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}, \end{aligned} \quad (6.42)$$

donde hemos estimado

$$|\partial_\tau (\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} v_\epsilon)(x, \xi, t, 2t, \tau)| \leq \frac{1}{2\pi} |\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \rho_\epsilon(x + \frac{\eta}{2}, x - \frac{\eta}{2}, 2t, 0)|.$$

Examinamos ahora el término I_ϵ^1 . Para ello hemos de deshacer necesariamente el cambio de escala en la expresión

$$\partial_\tau W_\epsilon(t, \tau) = \epsilon \partial_\tau W(\epsilon^{-1}t, \epsilon\tau)$$

para compensar el factor ϵ^{-1} que aparece delante de la integral. Entonces, en este caso

$$\begin{aligned} |I_\epsilon^1| &\leq \epsilon \frac{R}{8\pi} |\tau_2 - \tau_1| \\ &\times \int_{t_1/\epsilon}^{t_2/\epsilon} \int_{-2t}^{2t} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \frac{|s|}{t} \left| \mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \left(\rho \left(x + \frac{\eta}{2}, x - \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}, t - \frac{s}{2} \right) \right) \right| |\nabla_x \Phi| d\xi dx ds dt \\ &\leq \epsilon C |\tau_2 - \tau_1| \\ &\times \int_{t_1/\epsilon}^{t_2/\epsilon} \int_{-2t}^{2t} \frac{|s|}{t} \|\bar{\psi} \left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2} \right) \psi \left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2} \right)\|_{L^6(\mathbb{R}_x^3; L^2(\mathbb{R}_\eta^3))} \|\nabla_x \Phi\|_{L^{6/5}(\mathbb{R}_x^3; L^2(\mathbb{R}_\xi^3))} ds dt \\ &\leq \epsilon C |\tau_2 - \tau_1| \int_{t_1/\epsilon}^{t_2/\epsilon} \int_{-2t}^{2t} \frac{|s|}{t} \|\psi(\cdot, t + \frac{s}{2})\|_{L^6(\mathbb{R}^3)} ds dt \\ &\leq C |t_2 - t_1| |\tau_2 - \tau_1|, \end{aligned} \tag{6.43}$$

donde hemos utilizado la desigualdad integral de Minkowski para normas L^p (ver Apéndice) para deducir

$$\|\bar{\psi} \left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2} \right) \psi \left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2} \right)\|_{L^6(\mathbb{R}_x^3; L^2(\mathbb{R}_\eta^3))} \leq \|\psi(\cdot, t + \frac{s}{2})\|_{L^6(\mathbb{R}^3)}$$

y la cota de caída obtenida en [24] para la norma L^6 de la función de onda cerca de $t = 0$, a saber:

$$\|\psi(\cdot, t + \frac{s}{2})\|_{L^6(\mathbb{R}^3)} \leq \frac{C}{|t + \frac{s}{2}|} \leq \frac{C}{s}$$

cuando $s \in [0, 2t]$ y

$$\|\psi(\cdot, t - \frac{s}{2})\|_{L^6(\mathbb{R}^3)} \leq \frac{C}{|t - \frac{s}{2}|} \leq \frac{C}{s}$$

cuando $s \in [-2t, 0]$.

Finalmente hemos de estimar el término no lineal I_ϵ^2 , para lo cual hemos de controlar también el potencial. Observamos en primer lugar que

$$\partial_\tau \theta[V_\epsilon] W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) = \epsilon \partial_\tau \theta[V] W(x, \xi, \epsilon^{-1}t, \epsilon\tau).$$

Entonces

$$\begin{aligned}
|I_\epsilon^2| &= \frac{1}{2\pi} \left| \int_{t_1/\epsilon}^{t_2/\epsilon} \int_{\epsilon\tau_1}^{\epsilon\tau_2} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_{\tau'}^3} \int_{-2t}^{2t} s e^{-i(\tau-\tau')s} \right. \\
&\times \mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \left\{ \left(V(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}) - V(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}) \right) (\mathcal{F}_{\xi' \rightarrow \eta} W)(x, \eta, t, \tau') \right\} \\
&\quad \times \Phi(x, \xi) ds d\tau' d\xi dx d\tau dt \Big| \\
&\leq \frac{1}{2\pi} \left| \int_{t_1/\epsilon}^{t_2/\epsilon} \int_{\epsilon\tau_1}^{\epsilon\tau_2} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_{\tau'}^3} \int_{-2t}^{2t} s e^{-i(\tau-\tau')s} \right. \\
&\times \left. \{ (H_1 + H_2)(x, \xi, t, s) *_{\xi} W(x, \xi, t, \tau') \} \Phi(x, \xi) ds d\tau' d\xi dx d\tau dt \right|,
\end{aligned}$$

donde

$$H_1(x, \xi, t, s) = 8e^{2ix \cdot \xi} (\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} V)(2\xi, t + \frac{s}{2})$$

y

$$H_2(x, \xi, t, s) = -8e^{-2ix \cdot \xi} (\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} V)(2\xi, t - \frac{s}{2}).$$

Por tanto, escribiendo la expresión de W e integrando con respecto a τ' obtenemos:

$$\begin{aligned}
|I_\epsilon^2| &\leq C \int_{t_1/\epsilon}^{t_2/\epsilon} \int_{\epsilon\tau_1}^{\epsilon\tau_2} \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{-2t}^{2t} \frac{|s|}{t} \left\{ |(\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} V)(2\xi, t + \frac{s}{2})| \right. \\
&\quad \left. *_{\xi} |\mathcal{F}_{\eta \rightarrow \xi}^{-1} \left(\bar{\psi}(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}) \psi(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}) \right)| \right\} |\Phi(x, \xi)| ds d\xi dx d\tau dt.
\end{aligned}$$

Finalmente, empleando la desigualdad de Young y el mismo tipo de cotas (en $L^6(\mathbb{R}^3)$) que se usaron para la estimación de la función de onda en el término I_ϵ^1 tenemos que

$$|I_\epsilon^2| \leq C \|\Phi\|_{L^{6/5}(\mathbb{R}_x^3; L^1(\mathbb{R}_\xi^3))} \|V\|_{L^\infty((0, \infty); L^2(\mathbb{R}_x^3))} |t_2 - t_1| |\tau_2 - \tau_1|. \quad (6.44)$$

La demostración concluye recopilando todas las estimaciones anteriores (6.41)–(6.44), ya que se tiene

$$|F_\epsilon(t_2) - F_\epsilon(t_1)| = |G_\epsilon(\tau_2) - G_\epsilon(\tau_1)| \leq C |t_2 - t_1| |\tau_2 - \tau_1|, \quad (6.45)$$

donde C es una constante positiva que depende de la función test y del potencial.

Veamos, por tanto, cómo se aplica en nuestro caso el teorema generalizado de Ascoli–Arzelá: sea

$$T_\epsilon(t, \tau) = \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) \Phi(x, \xi) d\xi dx.$$

Entonces se verifica

$$T_\epsilon(t_2, \tau) = G_\epsilon^{t_2}(\tau) + T_\epsilon(t_1, \tau),$$

donde el superíndice t_2 indica que consideramos $t_1 \in [0, T]$ fijo y t_2 variable.

- (i) Lo primero que observamos es que, como consecuencia del Lema 6.2.1, la familia de funciones $T_\epsilon(t_1, \tau)$ es equicontinua con respecto a la variable τ , y por tanto (en particular) es relativamente compacta en $L^1_{loc}(\mathbb{R}_\tau)$.
- (ii) En virtud de la Proposición 6.2.3, la familia $G_\epsilon^{t_2}(\tau)$ es equicontinua con respecto a τ para t_2 fijo, y por tanto (en particular) es relativamente compacta en $L^\infty([0, T]; L^1(\mathcal{T}))$, donde \mathcal{T} es un compacto de \mathbb{R}_τ . Como consecuencia, se tiene que la sucesión $\{W_\epsilon\}$ es débilmente relativamente compacta en $L^\infty([0, T]; L^1_{loc}(\mathbb{R}_\tau))$.
- (iii) Finalmente, también se verifica que la familia $G_\epsilon^{t_2}(\tau)$ es equicontinua con respecto a t_2 en la norma $L^1(\mathcal{T})$ respecto de τ . En efecto:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{T}} |G_\epsilon^{t_2}(\tau) - G_\epsilon^{t'_2}(\tau)| d\tau &= \int_{\mathcal{T}} \left| \int_{t'_2}^{t_2} \langle \partial_t W_\epsilon(x, \xi, t, \tau), \Phi(x, \xi) \rangle dt \right| d\tau \\ &= \int_{\mathcal{T}} \left| \int_{t'_2}^{t_2} \int_{\tau'}^\tau \langle \partial_\tau \partial_t W_\epsilon(x, \xi, t, \omega), \Phi(x, \xi) \rangle d\omega dt \right| d\tau, \end{aligned} \quad (6.46)$$

donde τ' es tal que $\langle \partial_t W(x, \xi, t, \tau'), \Phi(x, \xi) \rangle = 0$ (que existe porque, en caso contrario, se violaría la conservación de la norma L^2 de W) y se ha tenido en cuenta que $\langle \partial_t W(x, \xi, t, \tau), \Phi(x, \xi) \rangle \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}_\tau)$ para dar sentido a la expresión (6.46) (ver [16], Teorema VIII.2). Entonces se tiene que

$$\int_{\mathcal{T}} |G_\epsilon^{t_2}(\tau) - G_\epsilon^{t'_2}(\tau)| d\tau \leq C|T| |t_2 - t'_2| \sup_{\tau \in \mathcal{T}} |\tau - \tau'|,$$

lo que significa que la familia $G_\epsilon^{t_2}(\tau)$ es relativamente compacta en $C_w([0, T]; L^1(\mathcal{T}))$ para todo compacto \mathcal{T} de \mathbb{R}_τ .

Por tanto, podemos aplicar el teorema de Ascoli-Arzelá generalizado para concluir que

$$W_\epsilon \longrightarrow W_\infty \quad \text{en } C_w([0, T]; L^1([\tau_1, \tau_2]; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))). \quad (6.47)$$

Observación.- La familia $T_\epsilon(t, \tau)$ no es equicontinua con respecto a la variable t , en el sentido $C([0, T] \times \mathcal{T})$, en intervalos que contengan al cero. Para verlo basta con evaluar la familia de funciones en $\tau = 0$ (la elección de este punto no es esencial) y construir las sucesiones ϵt_2 y ϵt_1 para cualesquiera $t_1, t_2 \in [0, T]$. Es obvio que la diferencia de estas dos sucesiones tiende a cero cuando $\epsilon \rightarrow 0$, mientras que por otro lado $T_\epsilon(\epsilon t_2, 0) - T_\epsilon(\epsilon t_1, 0)$ converge hacia $T(t_2, 0) - T(t_1, 0)$, que es distinto de cero a no ser que $T(\cdot, 0)$ sea constante en t .

Veamos ahora que los puntos de acumulación (en sentido débil) de la sucesión W_ϵ son también puntos de acumulación de W_ϵ^H .

Lema 6.2.4. *Se tiene que $W_\infty^H = W_\infty$. En particular, para todo $\tau_1, \tau_2 \in \mathbb{R}$ se verifica que*

$$W_\infty^H \in C([0, T]; L^1([\tau_1, \tau_2]; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))).$$

Demostración.- Se trata de probar que, para toda función $\Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)$, la expresión

$$\left| \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} (W_\epsilon - W_\epsilon^H)(x, \xi, t, \tau) \Phi(x, \xi) d\xi dx \right| \quad (6.48)$$

tiende a cero cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Pero (6.48) puede escribirse de forma equivalente como

$$\left| \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) (\Phi - \Phi *_{x, \xi} \Gamma_\epsilon)(x, \xi) d\xi dx \right|,$$

por lo que bastaría con estimar la norma $\|\Phi - \Phi *_{x, \xi} \Gamma_\epsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^6)}$. Para ello es suficiente observar que

$$(\Phi *_{x, \xi} \Gamma_\epsilon - \Phi)(x, \xi) = \int_{\mathbb{R}_{x'}^3} \int_{\mathbb{R}_{\xi'}^3} (\Phi(x - x', \xi - \xi') - \Phi(x, \xi)) \Gamma_\epsilon(x', \xi') d\xi' dx',$$

para lo que hemos utilizado que $\|\Gamma_\epsilon\|_{L^1(\mathbb{R}^6)} = 1$. Por tanto,

$$\|\Phi *_{x, \xi} \Gamma_\epsilon - \Phi\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)}$$

$$\leq \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_{\xi'}^3} \|\Phi(x - \epsilon^{1/2}x', \xi - \epsilon^{1/2}\xi') - \Phi(x, \xi)\|_{L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_{\xi'}^3)} \Gamma(x', \xi') d\xi dx$$

El resultado se deduce finalmente a partir del teorema de la convergencia dominada y del hecho de que, al ser $\Phi \in C_0(\mathbb{R}^6)$, entonces

$$\Phi(x - x_0, \xi - \xi_0) \longrightarrow \Phi(x, \xi) \quad \text{uniformemente cuando } x_0 \rightarrow 0, y_0 \rightarrow 0.$$

Ahora estamos en condiciones de analizar el paso al límite para la sucesión de densidades reescaladas n_ϵ :

Lema 6.2.5. *Después de la posible extracción de una subsucesión,*

$$n_\epsilon(x, t) \longrightarrow n_\infty(x, t) = 4t \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} W_\infty(x, \xi, t, \tau) d\tau d\xi \quad (6.49)$$

*débil-** en medidas, uniformemente en $[0, T]$ cuando ϵ tiende a 0.

Demostración.- Para toda función $\Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ consideramos la siguiente descomposición:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_x^3} n_\epsilon(x, t) \Phi(x) dx &= 4t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) \Phi(x) d\xi d\tau dx \\ &= 4t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} (W_\epsilon - W_\epsilon^H)(x, \xi, t, \tau) \varphi(x) d\xi d\tau dx \\ &\quad + 4t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon^H(x, \xi, t, \tau) \theta_R(\xi) \Phi(x) d\xi d\tau dx \\ &\quad + 4t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\epsilon^H(x, \xi, t, \tau) (1 - \theta_R(\xi)) \Phi(x) d\xi d\tau dx, \end{aligned} \quad (6.50)$$

donde $\theta_R(u) = \theta(u/R)$, siendo θ una función C^∞ con soporte compacto en \mathbb{R}^3 que vale 1 en la bola B_1 y cero fuera de la bola B_2 y que verifica $0 \leq \theta \leq 1$.

El primer término del segundo miembro de (6.50) se puede escribir también como

$$\int_{\mathbb{R}_x^3} n_\epsilon(x, t) (\Phi - \Phi \star_x \Gamma_\epsilon)(x) dx,$$

donde ahora

$$\Gamma_\epsilon(x) = \frac{1}{(\pi\epsilon)^{3/2}} e^{-|x|^2/\epsilon}.$$

Es fácil observar que este término está acotado por $\|\Phi - \Phi \star_x \Gamma_\epsilon\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)}$, que converge hacia 0 como medidas. Por su parte, el último término de (6.50) converge a cero a partir de una extracción diagonal con respecto a los índices ϵ y R , ya que se comprueba fácilmente, por medio del teorema de la convergencia dominada, que para cada $\epsilon \leq 1$ fijo este término converge a cero cuando $R \rightarrow \infty$.

Por tanto, pasando al límite en el segundo término se deduce fácilmente que

$$\int_{\mathbb{R}_x^3} n_\epsilon(x, t) \varphi(x) dx \longrightarrow 4t \int_{\mathbb{R}_x^3} \int_{\mathbb{R}_\tau^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\infty(x, \xi, t, \tau) \varphi(x) d\xi d\tau dx$$

cuando $\epsilon \rightarrow 0$. O, equivalentemente,

$$n_\epsilon(x, t) \longrightarrow \int_{\mathbb{R}_\tau^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} W_\infty(x, \xi, t, \tau) d\xi d\tau$$

débilmente como medidas cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Esto concluye la demostración.

Una vez identificada la densidad límite n_∞ podemos pasar al límite en la ecuación (lineal) de Poisson reescalada para obtener el comportamiento asintótico del potencial, obteniéndose

$$V_\infty(x, t) = \frac{\gamma}{4\pi} \int_{\mathbb{R}_y^3} \frac{n_\infty(y, t)}{|x - y|} dy = \frac{\gamma}{\pi} t \int_{\mathbb{R}_y^3} \int_{\mathbb{R}_\tau^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \frac{W_\infty(y, \xi, t, \tau)}{|x - y|} d\xi d\tau dy. \quad (6.51)$$

Utilizando ahora la fórmula (6.6) podemos reescribir el término no lineal (6.25) como sigue:

$$\begin{aligned} & \theta[V_\epsilon]W_\epsilon(x, \xi, t, \tau) \\ &= \frac{i}{(2\pi)^4} \frac{\gamma}{\pi} t \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_{\xi'}^3} \int_{\mathbb{R}_{\tau'}^3} \int_{-2t}^{2t} \int_{\mathbb{R}_y^3} \int_{\mathbb{R}_{\tau''}^3} \int_{\mathbb{R}_{\xi''}^3} e^{-i(\xi - \xi') \cdot \eta} e^{-i(\tau - \tau') \cdot s} W_\epsilon(x, \xi', t, \tau') \\ & \times \left\{ \frac{W_\epsilon(y, \xi'', t + \frac{s}{2}, \tau'')}{|x + \frac{\eta}{2} - y|} - \frac{W_\epsilon(y, \xi'', t - \frac{s}{2}, \tau'')}{|x - \frac{\eta}{2} - y|} \right\} d\xi'' d\tau'' dy ds d\tau' d\xi' d\eta. \quad (6.52) \end{aligned}$$

Entonces podemos pasar al límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$ en el término pseudo-diferencial de la ecuación (6.23) (observamos que en los otros términos se pasa al límite linealmente) y obtenemos como ecuación límite el siguiente sistema de tipo Wigner-Poisson:

$$(\xi \cdot \nabla_x)W_\infty + \theta[V_\infty]W_\infty = 0, \quad (6.53)$$

con dato inicial

$$W_\infty^I(x, \xi) = w(x, \xi, t = 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \bar{\varphi}(x + \frac{\eta}{2}) \varphi(x - \frac{\eta}{2}) e^{-i\eta \cdot \xi} d\eta, \quad (6.54)$$

donde

$$\begin{aligned} & \theta[V_\infty]W_\infty(x, \xi, t, \tau) \\ &= \frac{i}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_{\tau'}} \int_{-2t}^{2t} \left(V_\infty\left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}\right) - V_\infty\left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}\right) \right) \\ & \quad \times W_\infty(x, \xi', t, \tau') e^{-i(\xi - \xi') \cdot \eta} e^{-i(\tau - \tau')s} ds d\tau' d\xi' d\eta \end{aligned} \quad (6.55)$$

y V_∞ viene dado por (6.51).

Por otro lado, la propiedad de convergencia para W_ϵ establecida en (6.47) puede interpretarse en términos de un límite con respecto a tiempos grandes en función de la identificación $t = 1$ y $\epsilon = t^{-1}$, es decir:

$$\|W(x, \xi, t, \frac{\tau}{t}) - W_\infty(x, \xi, 1, \tau)\|_{L^\infty([0, T]; L^1([\tau_1, \tau_2]; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)))} \longrightarrow 0$$

cuando $t \rightarrow \infty$. Podemos decir, por tanto, que el problema límite para tiempos grandes (6.53)–(6.55) incorpora un “proceso de memoria”, en el sentido en que aún “recuerda” la condición inicial, además de conservar el carácter no lineal de las ecuaciones originales. Por tanto, acabamos de demostrar el siguiente resultado:

Teorema 6.2.6. *Sea el par (ψ, V) una solución débil en H^2 del problema de Schrödinger–Poisson. Entonces, el comportamiento asintótico con respecto a tiempos grandes del sistema de Schrödinger–Poisson está determinado a través de las soluciones del problema límite no lineal de tipo Wigner–Poisson (6.53)–(6.55) en el sentido dado por*

$$\|W(x, \xi, t, \frac{\tau}{t}) - W_\infty(x, \xi, 1, \tau)\|_{L^\infty([0, T]; L^1([\tau_1, \tau_2]; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)))} \longrightarrow 0$$

cuando $t \rightarrow \infty$, donde W viene dada por (6.20), W_∞ es una medida no negativa tal que

$$W_\infty \in L^\infty([0, T]; L^1([\tau_1, \tau_2]; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3))),$$

el potencial asintótico V_∞ viene determinado por la fórmula (6.51) y la densidad límite n_∞ es una medida no negativa dada por

$$n_\infty(x, t) = 4t \int_{\mathbb{R}_\tau^2} \int_{\mathbb{R}_\xi} W_\infty(x, \xi, t, \tau) d\xi d\tau. \quad (6.56)$$

Observación.- El término no lineal $\theta[V_\infty]W_\infty$ admite una expresión equivalente en forma de convolución:

$$\theta[V_\infty]W_\infty = K_\infty *_{\xi, \tau} W_\infty,$$

con

$$\begin{aligned} K_\infty(x, \xi, t, \tau) &= \frac{i}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{-2t}^{2t} \left(V_\infty\left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}\right) - V_\infty\left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}\right) \right) \\ &\quad \times e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta \\ &= 2 \operatorname{Re} \left\{ \frac{i}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{-2t}^{2t} V_\infty\left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}\right) e^{-i\eta \cdot \xi} e^{-is\tau} ds d\eta \right\}. \end{aligned}$$

Por tanto, tras algunos cálculos simples (6.53) puede escribirse de manera equivalente como una ecuación en forma de convolución, a saber:

$$\begin{aligned} &(\xi \cdot \nabla_x) W_\infty(x, \xi, t, \tau) \\ &= -\frac{32}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ i e^{2i\xi \cdot x} e^{2it\tau} \left(\frac{\operatorname{sen}(2t\tau)}{\tau} *_{\tau} \mathcal{F}_{(x,t) \rightarrow (\xi, \tau)}^{-1} V_\infty(2\xi, 2\tau) \right) \right\} \\ &\quad *_{\xi, \tau} W_\infty(x, \xi, t, \tau), \end{aligned}$$

donde hemos utilizado el hecho de que la transformada de Fourier lleva productos en convoluciones.

6.3 Comportamiento asintótico para estados cuánticos mixtos

Nuestro estudio sobre el comportamiento asintótico de un sistema cuántico para una partícula simple puede extenderse de forma directa al caso de una superposición de estados puros, es decir, al caso de un estado cuántico mixto. Para ello, consideramos ahora un sistema numerable de ecuaciones de Schrödinger

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi^m}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \Delta_x \psi^m + V \psi^m, \quad m \in \mathbb{N}, \\ \psi^m(x, 0) &= \varphi^m(x), \end{aligned}$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi^m = 0,$$

acopladas con la ecuación de Poisson

$$\Delta_x V = -\gamma n,$$

donde la densidad de posición del sistema viene dada por

$$n(x, t) = \sum_{m \in \mathbb{N}} \alpha^m |\psi^m(x, t)|^2 \quad \text{con} \quad \sum_{m \in \mathbb{N}} \alpha^m = 1,$$

y donde los coeficientes α^m representan las probabilidades de ocupación de los estados ψ^m . Para llevar a cabo el análisis asintótico correspondiente al comportamiento con respecto a tiempos grandes de las soluciones, nos vemos llamados otra vez a reescalar el sistema mediante el grupo de transformaciones

$$\psi_\epsilon^m(x, t) = \psi^m(x, \epsilon^{-1}t), \quad V_\epsilon(x, t) = V(x, \epsilon^{-1}t)$$

y

$$n_\epsilon(x, t) = \sum_{m \in \mathbb{N}} \alpha^m |\psi_\epsilon^m(x, t)|^2.$$

Lo primero que observamos es que $\|n_\epsilon(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R}_x^3)} = 1$. Entonces, aplicando nuevamente la aproximación de Wigner en espacio-tiempo a ψ_ϵ^m y las mismas ideas desarrolladas en las secciones anteriores, deducimos que

$$\|W_\epsilon^m(x, \xi, t, \frac{\tau}{t}) - W_\infty^m(x, \xi, 1, \tau)\|_{L^\infty([0, T]; L^1([\tau_1, \tau_2]; L^2(\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_\xi^3)))} \longrightarrow 0$$

cuando $t \rightarrow \infty$, donde W_∞^m satisface el siguiente sistema de ecuaciones integro-pseudo-diferenciales:

$$(\xi \cdot \nabla_x) W_\infty^m + \theta[V_\infty] W_\infty^m = 0,$$

con condición inicial dada por

$$W_\infty^m(x, \xi, 0) = w^m(x, \xi, t = 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \bar{\varphi}^m(x + \frac{\eta}{2}) \varphi^m(x - \frac{\eta}{2}) e^{-i\eta \cdot \xi} d\eta,$$

donde

$$\theta[V_\infty] W_\infty^m(x, \xi, t, \tau)$$

$$= \frac{i}{(2\pi)^4} \int_{\mathbb{R}_\eta^3} \int_{\mathbb{R}_{\xi'}^3} \int_{\mathbb{R}_{\tau'}^3} \int_{-2t}^{2t} \left(V_\infty\left(x + \frac{\eta}{2}, t + \frac{s}{2}\right) - V_\infty\left(x - \frac{\eta}{2}, t - \frac{s}{2}\right) \right) \\ \times W_\infty^m(x, \xi', t, \tau') e^{-i(\xi - \xi') \cdot \eta} e^{-i(\tau - \tau')s} ds d\tau' d\xi' d\eta$$

y donde

$$V_\infty(x, t) = \frac{\gamma}{\pi} t \sum_{m \in \mathbb{N}} \alpha^m \int_{\mathbb{R}_y^3} \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbb{R}_\tau} \frac{W_\infty^m(y, \xi, t, \tau)}{|x - y|} d\xi d\tau dy.$$

Resolviendo ahora este sistema e integrando la correspondiente solución vectorial $(W_\infty^m)_{m \in \mathbb{N}}$ con respecto a τ y a ξ obtenemos $(n_\infty^m)_{m \in \mathbb{N}}$, con n_∞^m definida por

$$n_\infty^m(x, \xi, t) = 4t \int_{\mathbb{R}_\tau} \int_{\mathbb{R}_\xi} W_\infty^m(x, \xi, t, \tau) d\xi d\tau.$$

Por tanto, la densidad de posición asintótica viene descrita por

$$n_\infty(x, t) = \sum_{m \in \mathbb{N}} \alpha^m n_\infty^m(x, t),$$

que proporciona una descripción macroscópica de la evolución para escalas grandes de tiempo de un sistema numerable de ecuaciones de Schrödinger-Poisson. En este marco, la justificación de los promedios de la función de Wigner con respecto a las variables (ξ, τ) se hace de forma análoga al caso de un estado cuántico puro.

Capítulo 7

Apéndice

El objetivo de este apéndice consiste en recopilar algunos de los resultados (bien conocidos en la literatura matemática) que se utilizan a lo largo de esta memoria. En particular, se podrá encontrar aquí una guía útil de los enunciados precisos de los teoremas de compacidad y las desigualdades integrales más importantes de los que hacemos uso en los capítulos anteriores.

Recordamos en primer lugar el teorema de Ascoli-Arzelá generalizado (este resultado puede encontrarse en [62]). Para ello, denotaremos por $\sigma(X, X')$ la topología débil para el espacio de Banach X , siendo X' el espacio dual de X .

Teorema 7.0.1. *Supongamos que I es un espacio topológico separable y X un espacio de Banach. Consideremos $\mathcal{F} \subset X^I$, donde X^I es el conjunto de funciones de I en X tales que*

- (i) *El conjunto $\{g(t), g \in \mathcal{F}\}$ es $\sigma(X, X')$ relativamente compacto para todo $t \in I$.*
- (ii) *El conjunto $\{x' \circ g, g \in \mathcal{F}\}$ es equicontinuo para todo $x' \in X'$.*

Entonces, para todo $\{g_n\} \subset \mathcal{F}$ existe una subsucesión $\{g_{\sigma(n)}\}$ y una función $g_0 : I \rightarrow (X, \sigma(X, X'))$ continua tal que $\{x' \circ g_{\sigma(n)}\}$ tiende hacia $x' \circ g_0$ uniformemente en I para todo $x' \in X'$.

El siguiente resultado de compacidad es debido a F. Bouchut y J. Dolbeault ([13], p. 510):

Lema 7.0.2. *Sean $\sigma > 0$, $T > 0$ y $1 \leq p < \infty$ y consideremos la solución*

$$f \in C([0, T]; L^p(\mathbb{R}^{2N}))$$

de

$$L_0 f \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f - \sigma \Delta_\xi f = h \quad \text{en } \mathbb{R}^{2N} \times (0, T),$$

$$f(\cdot, 0) = f_0.$$

Supongamos que $f_0 \in F$, con F un conjunto acotado de $L^p(\mathbb{R}^{2N})$ y que $h \in H$, donde H es un subconjunto acotado de $L^q((0, T); L^p(\mathbb{R}^{2N}))$ con $1 < q \leq \infty$. Entonces, para cualesquiera $\eta > 0$ y ω un subconjunto abierto y acotado de \mathbb{R}^{2N} , f es compacta en $C([\eta, T]; L^p(\omega))$.

El siguiente lema de dispersión clásico es debido a B. Perthame (ver [85]):

Lema 7.0.3. *Supongamos que $g_0 \in L^1(\mathbb{R}^{2d})$ y $h \in L^\infty((0, T); L^1(\mathbb{R}^{2d}))$. Entonces, la solución g de*

$$\frac{\partial g}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) g = h,$$

$$g(t=0) = g_0,$$

satisface que $(1 + |\xi|)g \in L^1(K_x \times \mathbb{R}_\xi^d \times (0, T))$ para todo conjunto compacto K_x de \mathbb{R}^d .

El siguiente teorema, debido a Prohorov, proporciona una caracterización de los subconjuntos de medidas de variación acotada débil- \star relativamente compactos (ver, por ejemplo, [23]).

Teorema 7.0.4. *Sean $c > 0$ una constante y $M \subset \mathcal{M}_c(\mathbb{R}^6)$, donde $\mathcal{M}_c(\mathbb{R}^6)$ es el conjunto de medidas de Radon μ tales que*

$$\|\mu\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^6)} = c.$$

Entonces, M es débil- \star relativamente compacto en $\mathcal{M}_c(\mathbb{R}^6)$ si y sólo si para todo $\delta > 0$ existe un subconjunto compacto $K \subset \mathbb{R}^6$ tal que

$$\mu(K) > c - \delta$$

para toda $\mu \in M$.

Enunciamos a continuación la versión utilizada a lo largo de esta memoria del resultado de compacidad fuerte para los momentos de una función de distribución establecido en [49]. Para ello supondremos, en primer lugar, que μ es una medida positiva finita en \mathbb{R}^d para la cual existen dos constantes $C > 0$ y $0 < \gamma < 2$ tales que

$$\sup \mu(\{\xi \in \mathbb{R}^d : |\xi \cdot e| \leq \epsilon, e \in \mathcal{S}^{d-1}\}) \leq C\epsilon^\gamma. \quad (7.1)$$

Teorema 7.0.5. *Supongamos que se verifica la condición (7.1) y sea f_n una sucesión de funciones débilmente relativamente compacta en $L^2(dx \times d\mu(\xi) \times dt)$ tal que $\partial_t f_n$ y $\xi \cdot \nabla_x f_n$ son relativamente compactas en $L^2(dx \times d\mu(\xi) \times dt)$. Entonces el momento*

$$\int_{\mathbb{R}^d} f_n d\mu(\xi)$$

es fuertemente relativamente compacto en $L^2(dx \times dt)$.

La desigualdad de Minkowski para integrales establece que la norma de una integral es menor o igual que la integral de las correspondientes normas. Para el caso de espacios L^p tenemos el siguiente resultado (ver [93]):

Teorema 7.0.6. *Para toda función medible $F(x, y)$ definida sobre el espacio medible $X \times Y$ dotado de la medida producto σ -finita $dx \times dy$ y para todo $1 \leq p < \infty$, se tiene que*

$$\left(\int_Y \left(\int_X |F(x, y)| dx \right)^p dy \right)^{1/p} \leq \int_X \left(\int_Y |F(x, y)|^p dy \right)^{1/p} dx.$$

Finalmente enunciamos el teorema de Egoroff (ver, por ejemplo, [16]).

Teorema 7.0.7. *Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ tal que $|\Omega| < \infty$. Sea también f_n una sucesión de funciones medibles de Ω en \mathbb{R} tal que*

$$f_n(x) \longrightarrow f(x) \quad \text{c.p.d. en } \Omega,$$

con $|f(x)| < \infty$ c.p.d. en Ω . Entonces, para todo $\epsilon > 0$ existe un subconjunto $A \subset \Omega$ medible tal que $|\Omega \setminus A| < \epsilon$ y

$$f_n \longrightarrow f \quad \text{uniformemente en } A.$$

I

Bibliografía general

- [1] Agmon, S., Douglis, A., Nirenberg, L., *Estimates near the boundary for solutions of elliptic partial differential equations satisfying general boundary value conditions I*, Comm. Pure and Appl. Math. 12 (1959), pp. 623–727.
- [2] Arnold, A. *Self-consistent relaxation-time models in quantum mechanics*, Commun. Part. Diff. Eq. 21 (1996), pp. 473–506.
- [3] Arnold, A., López, J. L., Markowich, P. A., Soler, J., *An analysis of quantum Fokker-Planck models: a Wigner function approach*, sometido a publicación.
- [4] Arnold, A., Nier, F., *The two-dimensional Wigner-Poisson problem for an electron gas in the charge neutral case*, Math. Meth. Appl. Sci. 14 (1991), pp. 595–613.
- [5] Bardos, C., *Problèmes aux limites pour les équations aux dérivées partielles du premier ordre a coefficients réels; théorèmes d'approximation; application a l'équation de transport*, Ann. Scient. Éc. Norm. Sup. 4 (1970), pp. 185–233.
- [6] Bardos, C., Golse, F., Levermore, D. C., *Fluid dynamic limit of kinetic equations 1. Formal derivations*, J. Stat. Phys. 63 (1991), pp. 323–344.
- [7] Bardos, C., Golse, F., Perthame, B., Sentis, R., *The nonaccretive radiative transfer equations: existence of solutions and Rosseland approximation*, J. Funct. Anal. 77 (1988), pp. 434–460.
- [8] Bardos, C., Santos, R., Sentis, R., *Diffusion approximation and computation of the critical size*, Trans. AMS 284 (1984), pp. 617–649.
- [9] Benatti, F., Narnhofer, H., *Entropy behaviour under completely positive maps*, Lett. Math. Phys. 15 (1988), pp. 325–334.
- [10] Bénéilan, Ph., Brezis, H., Crandall, M. G., *A semilinear equation in $L^1(\mathbb{R}^n)$* , Annali della Scuola Norm. Sup. di Pisa 4 (1975), pp. 523–555.
- [11] Bonilla, L. L., Carrillo, J. A., Soler, J., *Asymptotic behavior of an initial-boundary value problem for the Vlasov-Poisson-Fokker-Planck system*, SIAM J. Appl. Math. 57 (1997), pp. 1343–1372.
- [12] Bouchut, F., *Smoothing effect for the non-linear Vlasov-Poisson-Fokker-Planck equation*, J. Diff. Equ. 122 (1995), pp. 225–238.
- [13] Bouchut, F., Dolbeault, J., *On long time asymptotics of the Vlasov-Fokker-Planck equation and of the Vlasov-Poisson-Fokker-Planck system with coulombic and newtonian potentials*, Diff. Int. Equ. 8 (1995), pp. 487–514.
- [14] Bouchut, F., Perthame, B., *A BGK model for small Prandtl number in the Navier-Stokes approximation*, J. Stat. Phys. 71 (1993), pp. 191–207.

- [15] Bourgat, J. F., Desvillettes, L., Le Tallec, P., Perthame, B., *Microreversible collisions for polyatomic gases and Boltzmann's H-theorem*, Eur. Journal of Mechanics B (fluids) 2 (1994), pp. 235–254.
- [16] Brezis, H., *Analyse Fonctionnelle*, Masson, Paris (1983).
- [17] Brezzi, F., Markowich, P. A., *The three-dimensional Wigner–Poisson problem: existence, uniqueness and approximation*, Math. Meth. Appl. Sci. 14 (1991), pp. 35–61.
- [18] Buot, F. A., Jensen, K. L., *Lattice Weyl–Wigner formulation of exact many-body quantum-transport theory and applications to novel solid-state quantum-based devices*, Phys. Rev. B 42 (1990), pp. 9429–9457.
- [19] Caflish, R., *The fluid-dynamic limit of the nonlinear Boltzmann equation*, Comm. Pure and Appl. Math. 33 (1980), pp. 651–666.
- [20] Caldeira, A. O., Leggett, A. J., *Path integral approach to quantum Brownian motion*, Physica A 121 (1983), pp. 587–616.
- [21] Carpio, A., *Long time behavior for solutions of the Vlasov–Poisson–Fokker–Planck equation*, Math. Meth. Appl. Sci. 21 (1998), pp. 985–1014.
- [22] Carrillo, J. A., Soler, J., *On the Vlasov–Poisson–Fokker–Planck equations with measures in Morrey spaces as initial data*, J. Math. Anal. and Appl. 207 (1997), pp. 475–495.
- [23] Carrillo, J. A., Soler, J., Vázquez, J. L., *Asymptotic behaviour and self-similarity for the three dimensional Vlasov–Poisson–Fokker–Planck system*, J. Funct. Anal. 141 (1996), pp. 99–132.
- [24] Castella, F., *L^2 -solutions to the Schrödinger–Poisson system: Existence, uniqueness, time behavior and smoothing effects*, Math. Mod. Meth. Appl. Sci. 7 (1997), pp. 1051–1083.
- [25] Cercignani, C., Illner, R., Pulvirenti, M., *The mathematical theory of dilute gases*, Springer, New York, 1994.
- [26] Cottet, G. H., Soler, J., *Three-dimensional Navier–Stokes equations for singular filament data*, J. Diff. Equ. 74 (1988), pp. 234–253.
- [27] Chapman, S., *The kinetic theory of simple and composite gases: viscosity, thermal conduction and diffusion*, Proc. Roy. Soc. (London) A93 (1916/17), pp. 1–20.
- [28] Chebotarev, A. M., Fagnola, F., *Sufficient conditions for conservativity of quantum dynamical semigroups*, J. Funct. Anal. 118 (1993), pp. 131–153.

- [29] Davies, E. B., *Markovian master equations*, Commun. Math. Phys. 39 (1974), pp. 91–110.
- [30] Davies, E. B., *Quantum Theory of Open Systems*, Academic Press, New-York, 1976.
- [31] Degond, P., López, J. L., Peyrard, P. F., *On the macroscopic dynamics induced by a model wave-particle collision operator*, Cont. Mech. Therm. 10 (1998), pp. 153–178.
- [32] Degond, P., López, J. L., Poupaud, F., Schmeiser, C., *Existence of solutions of a kinetic equation modelling cometary flows*, por aparecer en J. Stat. Phys.
- [33] Degond, P., Peyrard, P. F., *Un modèle de collisions ondes-particules en physique des plasmas: application à la dynamique des gaz*, C. R. Acad. Sci. Paris 323 (1996), pp. 209–214.
- [34] Dekker, H., *Quantization of the linearly damped harmonic oscillator*, Phys. Rev. A 16(5) (1977), pp. 2126–2134.
- [35] Dekker, H., Valsakumar, M. C., *A fundamental constraint on quantum mechanical diffusion coefficients*, Phys. Lett. A 104 (1984), pp. 67–71.
- [36] De Masi, A., Esposito, R., Lebowitz, J. L., *Incompressible Navier-Stokes and Euler limits of the Boltzmann equation*, Comm. Pure and Appl. Math. 42 (1989), pp. 1189–1214.
- [37] Dias, J. P., Figueira, M., *Conservation laws and time decay for the solutions of some nonlinear Schrödinger-Hartree equations and systems*, J. Math. Anal. and Appl. 84 (1981), pp. 486–508.
- [38] Diósi, L., *Caldeira-Leggett master equation and medium temperatures*, Physica A 199 (1993), pp. 517–526.
- [39] Diósi, L., *On high-temperature Markovian equation for quantum Brownian motion*, Europhys. Lett. 22 (1993), pp. 1–3.
- [40] Diósi, L., Gisin, N., Halliwell, J., Percival, I. C., *Decoherent histories and quantum state diffusion*, Phys. Rev. Lett. 74(2) (1995), pp. 203–207.
- [41] DiPerna, R., Lions, P. L., *On the Cauchy problem for Boltzmann equations: global existence and weak stability*, Ann. of Math. 130 (1989), pp. 321–36.
- [42] DiPerna, R., Lions, P. L., *Ordinary differential equations, transport theory and Sobolev spaces*, Invent. Math. 98 (1989), pp. 511–547.
- [43] Earl, J., Jokipii, J. R., Morfill, G., *Cosmic ray viscosity*, The Astrophysical Journal 331 (1988), L91.

- [44] Enskog, D., *Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünntent Gasen, 1*, en Allgemeiner Teil, Almqvist & Wiksell, Uppsala, 1917.
- [45] Evans, L. C., *Weak convergence methods for nonlinear partial differential equations*, Conference Board of the Mathematical Sciences, AMS 74, Providence (1990).
- [46] Frenslley, W. R., *Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium*, Rev. Mod. Phys. 62(3) (1990), pp. 745–791.
- [47] Gerard, P., Markowich, P. A., Mauser, N. J., Poupaud, F., *Homogenization limits and Wigner transforms*, Commun. Pure and Appl. Math. 50 (1997), pp. 323–379.
- [48] Glassey, R. T., *Asymptotic behavior of solutions to certain nonlinear Schrödinger–Hartree equations*, Commun. Math. Phys. 53 (1977), pp. 9–18.
- [49] Golse, F., Lions, P. L., Perthame, B., Sentis, R., *Regularity of the moments of the solution of a transport equation*, J. Funct. Anal. 74 (1988), pp. 110–125.
- [50] Golse, F., Perthame, B., Sentis, R., *Un résultat de compacité pour les équations du transport et application au calcul de la valeur propre principale d’un opérateur de transport*, C. R. Acad. Sci. Paris 301 (1985), pp. 341–344.
- [51] Golse, F., Poupaud, F., *Limite fluide des équations de Boltzmann des semiconducteurs pour une statistique de Fermi-Dirac*, Asymptotic Analysis 6 (1992), pp. 135–160.
- [52] Gombosi, T. I., Powell, K. J., De Zeeuw, D. L., *Axisymmetric modeling of cometary mass loading on an adaptively refined grid: MHD results*, Journal of Geophysical Research 99 (1994), pp. 21525–21539.
- [53] Grad, H., *Principles of the kinetic theory of gases*, en Handbuch der Physik (S. Flügge ed.), vol XII, Springer, Berlin, 1958.
- [54] Grad, H., *Asymptotic equivalence of the Navier–Stokes and non-linear Boltzmann equation*, Proceedings of the American Mathematical Society Symposia on Applied Mathematics 17 (1965), pp. 154–183.
- [55] Greenberg, W., Polewczak, J., *A global existence theorem for the nonlinear BGK equation*, J. Stat. Phys. 331 (1989), pp. 1313–1321.
- [56] Guillot, J. C., Ralston, J., Trubowitz, E., *Semi-classical asymptotics in Solid State Physics*, Commun. Math. Phys. 3 (1988), pp. 401–415.
- [57] Häfner, D., *Régularité Gevrey pour un système Schrödinger–Poisson dissipatif*, C. R. Acad. Sci. Paris 326 (1998), pp. 829–832.

- [58] Hayashi, N., Naumkin, P. I., *Asymptotics for large time of solutions to the nonlinear Schrödinger and Hartree equations*, Amer. J. Math. 120 (1998), pp. 369–389.
- [59] Hayashi, N., Naumkin, P. I., Ozawa, T., *Scattering theory for the Hartree equation*, SIAM J. Math. Anal. 29 (1998), pp. 1256–1267.
- [60] Hayashi, N., Ozawa, T., *Time decay of solutions to the Cauchy problem for time-dependent Schrödinger–Hartree equations*, Commun. Math. Phys. 110 (1987), pp. 467–478.
- [61] Hilbert, D., *Begründung der kinetischen Gastheorie*, Mathematische Annalen 72 (1916/17), pp. 562–577.
- [62] Horst, E., Hunze, R., *Weak solutions of the initial value problem for the unmodified nonlinear Vlasov equation*, Math. Meth. Appl. Sci. 6 (1984), pp. 262–279.
- [63] Illner, R., Zweifel, P. F., Lange, H., *Global existence, uniqueness and asymptotic behaviour of solutions of the Wigner–Poisson and Schrödinger–Poisson systems*, Math. Meth. Appl. Sci. 17 (1994), pp. 349–376.
- [64] Kamin, S., Vázquez, J. L., *Fundamental solutions and asymptotic behaviour for the p -Laplacian equation*, Rev. Mat. Iberoamericana 4 (1988), pp. 339–354.
- [65] Korolev, O., Kruzhkov, S., *On the imbedding theory of anisotropic function spaces*, Sov. Math. Dokl. 32 (1985), pp. 829–832.
- [66] Krall, N. A., Trivelpiece, A. W., *Principles of plasma physics*, McGraw Hill, New York, 1964.
- [67] Kumar, K., Skullerud, H. R., Robson, R. E., *Kinetic theory of charged particle swarms in neutral gases*, Aust. J. Phys. 33 (1980), pp. 343–448.
- [68] Landau, L., Lifshitz, E., *Theoretical Physics, Vol. 10, Physical Kinetics*, Springer, New York.
- [69] Lange, H., Toomire, B., Zweifel, P. F., *Time-dependent dissipation in nonlinear Schrödinger systems*, J. Math. Phys. 36(3) (1995), pp. 1274–1283.
- [70] Lange, H., Zweifel, P. F., *Dissipation in Wigner–Poisson systems*, J. Math. Phys. 35(4) (1994), pp. 1513–1521.
- [71] Levermore, D. C., *Moment closure hierarchies*, preprint, 1990.
- [72] Lindblad, G., *On the generators of quantum dynamical semigroups*, Commun. Math. Phys. 48 (1976), pp. 119–130.

- [73] Lions, P. L., Paul, T., *Sur les mesures de Wigner*, Rev. Mat. Iberoamericana 9 (1993), pp. 553–618.
- [74] López, J. L., Soler, J., *Scaling limits in the 3-D Schrödinger–Poisson system*, Appl. Math. Lett. 10 (1997), pp. 61–65.
- [75] López, J. L., Soler, J., *Asymptotic behavior to the 3-D Schrödinger/Hartree–Poisson and Wigner–Poisson systems*, por aparecer en Math. Mod. Meth. Appl. Sci.
- [76] López, J. L., Soler, J., *Large time asymptotics of solutions to the 3-D Schrödinger–Poisson system: space-time Wigner transforms and high frequency limits*, sometido a publicación.
- [77] Markowich, P. A., *On the equivalence of the Schrödinger and the quantum Liouville equations*, Math. Meth. Appl. Sci. 11 (1989), pp. 459–469.
- [78] Markowich, P. A., Mauser, N. J., *The classical limit of a self-consistent quantum–Vlasov equation in 3-D*, Math. Mod. Meth. Appl. Sci. 3 (1993), pp. 109–124.
- [79] Markowich, P. A., Mauser, N. J., Poupaud, F., *A Wignerfunction approach to (semi)classical limits: electrons in a periodic potential*, J. Math. Phys. 35 (1994), pp. 1066–1094.
- [80] Markowich, P. A., Ringhofer, C., Schmeiser, C., *Semiconductor Equations*, Springer–Verlag, Vienna (1990).
- [81] Miller, L., *Réfraction d’ondes semi-classiques par des interfaces franches*, C. R. Acad. Sci. Paris, Série I, 325 (1997), pp. 371–376.
- [82] Mohammadi, B., Pironneau, O., *Analysis of the K–Epsilon turbulence model*, Masson and Wiley, New York, 1993.
- [83] Müller, I., Ruggeri, T., *Extended Thermodynamics*, Springer, Berlín, 1993.
- [84] Pazy, A., *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*, Springer, segunda edición, 1992.
- [85] Perthame, B., *Global existence to the BGK model of Boltzmann equation*, J. Diff. Equ. 82 (1989), pp. 191–205.
- [86] Reed, M., Simon, B., *Methods of Modern Mathematical Physics II*, Academic Press, sexta edición, 1986.
- [87] Rode, D. L., *Low-field electron transport*, en "Semiconductor and semimetals", Vol. 10, Academic press, New York, 1967.
- [88] Ruíz Arriola, E., Soler, J., *Asymptotic behaviour for the 3-D Schrödinger–Poisson system in the attractive case with positive energy*, por aparecer en Appl. Math. Lett.

- [89] Ruíz Arriola, E., Soler, J., *A variational approach to the Schrödinger–Poisson system: asymptotic behaviour and stability*, sometido a publicación.
- [90] Ryzhik, E., Papanicolaou, G. C., Keller, J. B., *Transport equations for waves in a half space*, Comm. Part. Diff. Eq. 22 (1997), pp. 1869–1910.
- [91] Saint-Raymond, L., *Incompressible hydrodynamic limits for a kinetic model of waves–particles interaction*, sometido a publicación.
- [92] Spohn, H., *Long time asymptotics for quantum particles in a periodic potential*, Phys. Rev. Lett. 77 (1996), pp. 1198–1201.
- [93] Stein, E. M., *Singular Integrals and Differentiability Properties of Functions*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1970.
- [94] Steinrück, H., *The one-dimensional Wigner–Poisson problem and its relation to the Schrödinger–Poisson problem*, SIAM J. Math. Anal. 22 (1991), pp. 957–972.
- [95] Stix, T. H., *Waves in Plasmas*, American Institute of Physics, New York, 1992.
- [96] Tatarskii, V. I., *The Wigner representation of Quantum Mechanics*, Sov. Phys. Usp. 26 (1983), pp. 311–327.
- [97] Thirring, W., *Lehrbuch der Mathematischen Physik 4 — Quantenmechanik großer Systeme*, Springer Wien–New York, 1980.
- [98] von Neumann, J., *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1955.
- [99] Wigner, E. P., *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium*, Phys. Rev., 40 (1932), pp. 749–759.
- [100] Williams, L. L., Jokipii, J. R., *Viscosity and inertia in cosmic-ray transport: effects of an average magnetic field*, The Astrophysical Journal 371 (1991), pp. 639–647.
- [101] Williams, L. L., Jokipii, J. R., *A single-fluid, self-consistent formulation of fluid dynamics and particle transport*, The Astrophysical Journal 417 (1993), pp. 725–734.
- [102] Williams, L. L., Schwadron, N., Jokipii, J. R., Gombosi, T. I., *A unified transport equation for both cosmic rays and thermal particles*, The Astrophysical Journal 405 (1993), pp. L79–L81.
- [103] Zeytounian, R. Kh., *Meteorological Fluid Dynamics*, Lecture notes in Physics, Vol. m5, Springer, Berlin, 1991.

-
- [104] Zeytounian, R. Kh., *Modélisation asymptotique en mécanique des fluides newtoniens*, Springer, Paris, 1994.
- [105] Zweifel, P. F., *The Wigner transform and the Wigner-Poisson system*, *Transp. Theory Stat. Phys.* 22 (1993), pp. 459–484.