

**METRICA Y CURVATURA DE SISTEMAS
TERMODINAMICOS SIMPLES**

**TESIS QUE PRESENTA EL
BIOLOGO JOSE GERARDO HERNANDEZ GARCIA
PARA LA OBTENCION DEL GRADO DE
MAESTRO EN MATEMATICAS**

Enero de 1987

074956



**UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA
SERVICIOS DOCUMENTALES
IZTAPALAPA**

**DIRECTOR DE TESIS:
DR. ERNESTO A. IACOMBA ZAMORA**

**UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA
DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA**

42-10-88 B. P. A.
Quizá este trabajo requiera de una justificación, pues como biólogo invado un área propia de físicos y matemáticos. Afortunadamente no cuento con una justificación sino con dos. La primera es que estoy convencido de que el entrenamiento matemático que requiere un biólogo puede adquirirse de forma más adecuada en los campos en donde la matemática es ya una tradición y por lo tanto esta más firmemente establecida, que en las áreas de más reciente acceso como es el caso de la biología. La segunda es que el área física que invado no está en absoluto desligada de la biología. La termodinámica ha sido y será una herramienta indispensable para la comprensión de los fenómenos biológicos; aunque la biología tome de ella su parte menos trivial, es necesaria en principio la comprensión de su forma más elemental. A ella me avoco.

Por otra parte, el hecho de que la geometría diferencial no haya sido hasta el momento usada por la biología, no implica que resulte ajena a ella. En términos reales, la biología no ha obtenido grandes resultados de la matemática que generalmente usa; motiva esto la búsqueda de nuevas opciones. La geometría diferencial es una de estas y a ella me inclino.

074956

AGRADECIMIENTOS

A pesar de la modestia de este trabajo debo señalar que su realización se debe a la colaboración de varias personas. Menciono en primer lugar al Dr. Ernesto Lacomba que, si ello no va en su demérito, es coautor de esta tesis. Sus conocimientos, su paciencia y disposición lo constituyen un verdadero Maestro, algo que puede decirse de muy pocas personas. El Dr. Rolando García fué quien motivó el que me iniciara en el camino de la ciencia, además de apoyarme no sólo en la realización de este trabajo, sino también durante mis estudios de maestría. El Dr. Pedro Armendáriz me guió en mis primeros pasos en el campo de la geometría diferencial y me facilitó el acceso a una amplia bibliografía. Mi amigo y maestro el M. en C. Joaquín Delgado me ayudó en más de una ocasión para aclarar mis confusas ideas; su ayuda me fué particularmente útil en la presentación de algunos resultados preliminares en el XIX Congreso Nacional de Matemáticos.

No puedo prolongar demasiado esta lista. A todos aquellos que contribuyeron a que concluyera esta fase de mi formación, mi gratitud es proporcional a su empeño y disposición.

CONTENIDO

1. INTRODUCCION.....	5
2. GEOMETRIA DE LA n -VARIEDAD DE ESTADOS DE EQUILIBRIO EN R^{n+1}	11
3. GEOMETRIA DE LA n -VARIEDAD DE ESTADOS DE EQUILIBRIO EN R^{2n+1}	19
4. GEOMETRIA ASOCIADA A LA TRANSFORMADA DE LEGENDRE.....	28
BIBLIOGRAFIA.....	33

1. INTRODUCCION

La termodinámica debe sus inicios a los estudios sobre calorimetría realizados en el siglo pasado. Una vez establecido el principio de conservación de la energía pudo postularse la existencia de la energía interna de un sistema. La irreversibilidad de ciertos procesos, como la igualación de temperatura de dos recipientes con diferente temperatura al ponerse en contacto, llevó a la formulación del concepto de entropía. Sin embargo, puede decirse que la termodinámica recibió su forma más completa con los trabajos de Gibbs. El tratamiento gibbsiano, o más propiamente "neo-gibbsiano", que centra su atención a los estados termodinámicos más que a los procesos, sugirió la posibilidad de aplicar métodos geométricos a la termodinámica. Esto recibió un considerable impulso a partir de los trabajos de Weinhold [26], si bien existen algunos antecedentes aislados (como [14]). Aun cuando existen otras formulaciones de la termodinámica que permiten también un enfoque geométrico, predomina el ya mencionado y a él centramos nuestra atención.

El primer supuesto que explicita o implícitamente aparece en los artículos que estudian la geometría de una descripción matemática de los sistemas termodinámicos es: "Los estados de equilibrio de un sistema termodinámico constituyen una variedad C^{∞} de dimensión finita." (ver por ejemplo [7,10,11,20 y 26]) Esto quiere decir que el estado de un sistema —una vez que ha alcanzado el equilibrio macroscópico, i.e., no presenta cambios observables— queda determinado por el valor que adopta una cantidad finita de variables. Las variables son el volumen, las cantidades molares de los compuestos químicos que componen el sistema y otra variable, más bien misteriosa, que es la entropía. Estos valores determinan el estado de un sistema excepto por un factor de escala; es decir, puede existir otro sistema que sea equivalente al primero desde el punto de vista de la termodinámica, siempre que los valores de las variables que lo describen sean, cada una, un múltiplo de aquellos que caracterizan al primero. La equivalencia termodinámica existe si el factor es el mismo para cada variable. De este modo las variables mencionadas son llamadas extensivas, en la medida en que ellas dependen de la magnitud del sistema.

Supongamos que existen n variables extensivas x_i , y consideremos la n -ada $(x_1, \dots, x_n) = (S, V, N_1, \dots, N_{n-2})$, donde S representa a la entropía, V al volumen y las N_i a las cantidades molares. La entropía puede ser considerada en

toda la recta real ó en el intervalo $S_0 < S < \infty$ [15]. Para simplificar la exposición supondremos esto último con $S_0=0$. Como no podemos imaginar que existen volúmenes negativos, ni tampoco cantidades molares negativas, restringiremos nuestra atención al conjunto $M^n \subset (R^+)^n$. Esto es lo que se supone en todas las referencias aquí citadas. Sobre este conjunto supondremos que existe una función U , llamada energía interna, y le pediremos que sea de clase C^∞ ,

$$U: M^n \rightarrow R$$

Existe una descripción equivalente de la termodinámica basada en la entropía. La energía interna juega en este caso el papel de variable independiente y también resulta un tanto "misteriosa", en el sentido de que no es directamente medible. Ambas formulaciones son equivalentes [4]. Adoptaremos la representación de la energía porque resulta más natural en el momento de estudiar las transformadas de Legendre, tan útiles en termodinámica.

Dada la propiedad que mencionamos respecto de las variables extensivas, es deseable extenderla a la función U definida en ellas, lo que hacemos definiéndola como homogénea de grado uno,

$$U(\alpha x_1, \dots, \alpha x_n) = \alpha U(x_1, \dots, x_n), \quad \alpha > 0.$$

Las primeras derivadas parciales de la función U ,

$$y_i = \partial U / \partial x_i$$

tienen un nombre especial en termodinámica,

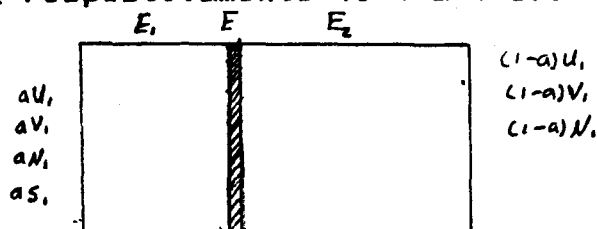
$$T = \partial U / \partial S, \quad -p = \partial U / \partial V, \quad \mu_i = \partial U / \partial N_i; \quad i=1, 2, \dots, n-2.$$

T es la temperatura, p es la presión (el signo es puramente convencional), y μ_i es el potencial químico del i -ésimo compuesto. Dado que U es homogénea de grado 1, sus derivadas parciales son homogéneas de grado 0; esto es, no dependen de la magnitud del sistema en cuestión. Por esta razón, a estas nuevas variables se les denomina intensivas.

Aclaremos antes de iniciar nuestro estudio de la geometría asociada a la termodinámica, que tal estudio sólo se realizará para sistemas termodinámicos simples. Con ello queremos indicar que no existen transiciones de fase, que los efectos de frontera son despreciables, no existen efectos magnéticos o gravitatorios, y todo lo que simplifica la exposición.

Hemos mencionado que la irreversibilidad de ciertos procesos condujo a la formulación del concepto de entropía. Veamos

cómo se postula la segunda ley de la termodinámica en términos de ella [15]. Como hemos visto, la entropía es una función que depende de U , V y N . Supongamos que tenemos un sistema E constituido por un solo compuesto aislado de sus alrededores por una pared impermeable a cualquier forma de energía. Dividimos al sistema en dos subsistemas E_1 , E_2 caracterizados por los valores aU_1 , aV_1 , aN_1 y $(1-a)U_2$, $(1-a)V_2$, $(1-a)N_2$ respectivamente ($0 < a < 1$).



Los subsistemas están aislados uno de otro por una pared que impide la transferencia de energía. Dado que las variables extensivas son aditivas y que el sistema está aislado

$$U_{12} = aU_1 + (1-a)U_2$$

$$V_{12} = aV_1 + (1-a)V_2$$

$$N_{12} = aN_1 + (1-a)N_2$$

Removemos la pared permitiendo la transferencia de masa y de energía entre los subsistemas. La segunda ley se expresa por la relación

$$S_{12} = \sup_{U', U'', V', V'', N', N''} [S_1(U', V', N') + S_2(U'', V'', N'')]]$$

$$U' + U'' = U_{12}$$

$$V' + V'' = V_{12}$$

$$N' + N'' = N_{12}$$

Claramente

$$S_{12} [aU_1 + (1-a)U_2, aV_1 + (1-a)V_2, aN_1 + (1-a)N_2]$$

$$\geq aS_1(U_1, V_1, N_1) + (1-a)S_2(U_2, V_2, N_2)$$

Dado que las funciones S_{12} , S_1 y S_2 son la misma, esta última expresión refleja la concavidad de S .

Como $\partial S / \partial U = 1/T$ es siempre positiva, podemos invertir localmente a la función S en términos de U . Un razonamiento análogo al anterior conduce a

$$U_{12} [aS_1 + (1-a)S_2, aV_1 + (1-a)V_2, aN_1 + (1-a)N_2]$$

$$\leq aU_1(S_1, V_1, N_1) + (1-a)U_2(S_2, V_2, N_2)$$

por lo que U es convexa. Es un hecho bien conocido [9] que si f es una función convexa y de clase C^2 entonces su hessiano es semidefinido positivo en cada punto de su dominio. Resumimos la anterior en el siguiente postulado: La energía interna es una función convexa y por lo tanto, una vez eliminada la homogeneidad de U , su hessiano es definido positivo.

Todos los estudios geométricos que conocemos eliminan la homogeneidad de U manteniendo constante una de las variables, sea el volumen o una de las cantidades molares. Dada la positividad del hessiano $\text{hess}(U)$ de U , y la homogeneidad de U , la gráfica de U sin eliminar la homogeneidad, es un cono convexo.

Podemos estudiar la geometría de la variedad de estados de equilibrio de un sistema termodinámico simple M^n , en principio, dotándola de una métrica riemanniana, o bien estudiar su inmersión en R^{n+1} a través de la carta de Monge

$$(x_1, \dots, x_n) \rightarrow (x_1, \dots, x_n, x_{n+1} = U(x_1, \dots, x_n))$$

y analizar la gráfica de U . Es más natural adoptar este segundo enfoque, ya que la ecuación fundamental, esto es, la expresión de U en términos de las variables extensivas, es distinta para cada sistema termodinámico. Caracterizarlo geoméricamente obliga a considerar esta expresión de U .

Para estudiar la curvatura de esta gráfica es claro que debemos desprendernos de la homogeneidad de U , pues un cono tiene información espúrea, dado que una de las direcciones principales es la asociada a la curvatura cero.

En la sección 2 analizamos las consecuencias que se derivan de ambos enfoques, intentando aclarar las confusiones a que ha conducido su distinción. Encontramos además una forma "natural" de normalizar a una función $f: R^n \rightarrow R$ homogénea de grado 1 y justificamos porqué resulta más apropiada; esto sale como resultado de estudiar su gráfica.

Uno de los aciertos más importantes en termodinámica ha sido el de reformular sus principios, a través de la transformada de Legendre de ϵ -la función U normalizada y dependiendo por lo tanto de $n-1$ variables-, en términos de nuevos potenciales termodinámicos. Por ejemplo, en el caso de un gas monoatómico, partiendo de la representación de la energía interna $\epsilon = \epsilon(S, V)$, se pasa al potencial de Helmholtz $F = \epsilon[T]$, dado por

$$F = \epsilon - TS$$

a la entalpía $H = \epsilon[p]$,

$$H = \epsilon + pV$$

y a la función de Gibbs, o energía libre de Gibbs $G = \epsilon[T, p]$

$$G = \epsilon - TS + pV$$

La notación que se sigue para los potenciales termodinámicos es la de Callen [4], al parecer aceptada internacionalmente. Las transformadas de Legendre de la representación de la entropía son llamadas funciones de Massieu, pero no es muy común encontrarlas en los textos de termodinámica; las que se realizan a partir de la representación de la energía interna son las únicas que tienen nombres especiales. Se acostumbra escribir $f[x]$ para la transformada de Legendre que se aplica sólo para la variable x . La idea de que la transformada de Legendre sólo es una reformulación de la termodinámica se debe también a Callen [4].

No nos detendremos por el momento a analizar estos cambios de potencial termodinámico, lo que haremos posteriormente. Baste hacer notar que si pretendemos estudiar la geometría asociada a estos cambios de potencial, es necesario ampliar el espacio de $n-1$ dimensiones considerado inicialmente, por lo menos a $2n-1$ dimensiones. Esto es necesario porque las variables intensivas pueden ser también variables independientes, indispensables para la determinación de estados del sistema considerado; con esto se duplica el número de variables. La otra variable es la energía interna que aparece como variable. Es intuitivamente necesario el considerar a U dentro de la descripción geométrica, pues es la que da la particularidad y especificidad a los diferentes sistemas.

Varios autores han seguido este camino [7,10,14]. Sin embargo, no conocemos hasta el momento ningún estudio acerca de los cambios en curvatura de la variedad de estados de equilibrio producidos por los cambios de potencial termodinámico. Más aún, no se ha estudiado la geometría de la variedad de estados de equilibrio (de $n-1$ dimensiones) en el espacio de todas las variables extensivas, intensivas y la función de energía.

En la sección 3 consideramos el espacio de todas las variables extensivas, intensivas y la función de energía interna, el espacio natural para estudiar la geometría asociada a las transformadas de Legendre de U ; nos avocamos a encontrar una manera sencilla de normalizar a U en este

espacio usando las estructuras métricas de contacto de Blair[2].

Finalmente en la sección 4 estudiamos la geometría de los estados de equilibrio de las transformada de Legendre de U , usando las estructuras presentadas en la sección 3. El resultado más importante aquí es que las curvaturas y cualquier propiedad geométrica que es invariante bajo isometrías se preserva, pues la transformada de Legendre resulta ser una isometría en los espacios convenientemente definidos.

2. GEOMETRIA DE LA n-VARIEDAD DE ESTADOS DE EQUILIBRIO EN R^{n+1}

Supongamos que normalizamos U manteniendo una de las variables constante, por ejemplo x_n . Denotemos por $\hat{e}$ a la función normalizada,

$$\hat{e}(E_1, \dots, E_{n-1}) = U(x_1/x_n, \dots, x_{n-1}/x_n, 1)$$

donde $E_i = x_i/x_n$. Las primeras derivadas parciales de $\hat{e}$ son representadas ahora por $\hat{e}_i = \partial \hat{e} / \partial E_i$. Sea ahora $M^{n-1} = \{(E_1, \dots, E_{n-1}) / (x_1, \dots, x_n) \in M^n\}$ y sea

$$J: M^{n-1} \rightarrow R^n$$

dada por

$$(E_1, \dots, E_{n-1}) \rightarrow (E_1, \dots, E_{n-1}, E_n = \hat{e}(E_1, \dots, E_{n-1})) \quad (2.1)$$

Supongamos que dotamos a R^n de la métrica euclidiana

$$m = \sum dx_i \otimes dx_i$$

entonces la métrica que hereda la subvariedad dada por este encaje (llamada primera forma fundamental) es, en su representación matricial,

$$m^* = J^*m = (\delta_{ij} + \hat{e}_i \hat{e}_j) \quad (2.2)$$

donde J^*m es la imagen recíproca de m por J . En todo el trabajo no distinguiremos a una aplicación lineal o bilineal de su matriz asociada.

Sea $\tilde{\nabla}: TR^n \times \chi(R^n) \rightarrow TR^n$ la conexión riemanniana asociada a la métrica m , donde TR^n es el espacio tangente al espacio R^n y $\chi(R^n)$ es el espacio de campos vectoriales definidos en R^n . Entonces la acción de $\tilde{\nabla}$ puede descomponerse como [6]

$$\tilde{\nabla}_X Y = \nabla_X Y + h(X, Y)$$

si $X \in TM^{n-1}$, $Y \in \chi(M^{n-1})$, donde ∇ es la conexión asociada a la primera forma fundamental m^* , $\nabla: TM^{n-1} \times \chi(M^{n-1}) \rightarrow TM^{n-1}$ y h es la segunda forma fundamental que es bilineal y simétrica $h: T_p M^{n-1} \times T_p M^{n-1} \rightarrow T_p^\perp M^{n-1}$, con $T_p^\perp M^{n-1}$ espacio normal a $T_p M^{n-1}$ en $T_p R^n$. Esto es $T_p R^n = T_p M^{n-1} \oplus T_p^\perp M^{n-1}$.

Como en este caso, para los vectores tangentes $\partial/\partial E_i, \partial/\partial E_j$,

$$\forall \partial/\partial x_i = \partial/\partial E_i = (0, \dots, 0, \hat{e}_i)$$

la segunda forma fundamental es

$$h(\partial/\partial E_i, \partial/\partial E_j) = (\hat{e}_i, \hat{e}_j / \sqrt{1 + \sum \hat{e}_i^2}) N$$

donde N es un vector normal a M^{n-1} en R^n y que en este caso es

$$N = (-\hat{e}_1, \dots, -\hat{e}_{n-1}, 1) / \sqrt{1 + \sum \hat{e}_i^2}$$

Ahora la curvatura gaussiana en un punto p de M^{n-1} se calcula como el determinante de la matriz asociada al llamado operador de forma $A_N: TM^{n-1} \rightarrow TM^{n-1}$, dado por la relación [6]

$$m^*(A_N(\partial/\partial E_i), \partial/\partial E_j) = m(h(\partial/\partial E_i, \partial/\partial E_j), N)$$

y su matriz viene determinada por

$$A_N^* = H(m^*)^{-1} \quad (2.3)$$

donde la matriz H está dada por

$$H_{ij} = m(h(\partial/\partial E_i, \partial/\partial E_j), N) = (\hat{e}_i, \hat{e}_j / \sqrt{1 + \sum \hat{e}_i^2})$$

$(m^*)^{-1}$ es la matriz inversa de m^* . Aclaremos un poco la terminología. En los libros de geometría diferencial elemental se denomina segunda forma fundamental al operador H ; hemos preferido seguir la terminología de Chen [6]. En cuanto al operador A_N , éste aparece sin nombre en la mayor parte de los textos de geometría diferencial; Chen [6] lo denomina "tensor de la segunda forma fundamental asociado a el vector normal N " pero consideramos más conveniente el nombre dado por O'Neill [19] como apunta también Boothby [3]. Resulta sorprendente que la ecuación (2.3), a pesar de su simplicidad, no aparezca en ninguna de las referencias aquí mencionadas; el único cálculo explícito que conocemos está en [1], pero es mucho más complicado. Existe una alusión al cálculo de ella en [16] pero exige que los vectores a que se aplica sean unitarios.

Dado que la curvatura gaussiana $K(p)$ en el punto p de M^{n-1} , está definida por el determinante de A_N , se tiene

$$K(p) = \det(Hess(\hat{e})) / (\sqrt{1 + \sum \hat{e}_i^2})^{n-2}.$$

Por supuesto es siempre positiva, lo que refleja la convexidad de $\hat{e}$. Dado que h es bilineal y simétrica, el operador de forma es autoadjunto respecto a la métrica m^* , por lo que sus valores propios son reales. El hecho de que sea autoadjunto no implica que su matriz sea simétrica, pues lo sería respecto a una base ortogonal en la métrica

inducida. Por ejemplo, para el caso de una superficie en R^3 , con coeficientes E, F y G de la métrica inducida, y coeficientes l, m y n de la "segunda forma fundamental" (para nosotros la matriz H), la matriz del operador de forma es

$$A_N^t = \begin{pmatrix} Gl-nF & mG-nF \\ nE-lF & En-mF \end{pmatrix}$$

Los valores propios de A_N son llamados curvaturas principales, y los vectores propios correspondientes, que resultan ser ortogonales entre sí, direcciones principales.

Sin embargo, la positividad de la matriz hessiana de ϕ y su simetría hace posible el considerarlo también como una métrica riemanniana para la variedad M^{n-1} . Esto fue precisamente lo que hizo Weinhold en una larga serie de artículos [26 - 31]. La principal aplicación de este enfoque fue la de elaborar un algoritmo para calcular derivadas parciales termodinámicas mixtas y encontrar relaciones entre ellas [5,12,29].

El problema, como lo hizo observar Gilmore [11], es que al calcular el tensor de curvatura Riemanniano $R_{ij,kl}$, y sus auxiliares, los símbolos de Christoffel Γ^i_{jk} , se obtiene una descripción de los símbolos de Christoffel y de la curvatura seccional en términos de terceras derivadas de ϕ . Recordemos que los símbolos de Christoffel están definidos como

$$\Gamma^i_{jk} = 1/2 g^{il} [\partial_j g_{lk} + \partial_k g_{jl} - \partial_l g_{jk}]$$

y el tensor de curvatura Riemanniano

$$R_{ij,kl} = 1/2 [\partial_{jl} g_{ik} - \partial_{il} g_{jk} - \partial_{jk} g_{il} + \partial_{ik} g_{jl}] + g_{rs} (\Gamma^r_{ik} \Gamma^s_{jl} - \Gamma^r_{il} \Gamma^s_{jk})$$

$i, j, k, l = 1, \dots, n$, donde g_{ij} son los coeficientes de una métrica riemanniana dada como

$$g = \sum_{i,j} g_{ij} dE_i \otimes dE_j.$$

y g^{ij} los componentes de la matriz inversa de g dada por $\sum_i g^{ij} g_{ij} = \delta_{ij}$.

La curvatura seccional de un plano generado por los vectores $\partial/\partial E_r, \partial/\partial E_s$ es

$$k(r,s) = -R_{rs,rs} / (g_{rr}g_{ss} - g_{rs}^2) \quad (2.4)$$

Así, para la métrica propuesta por Weinhold,

$$g = \sum_{i,j} \phi_{ij} dE_i \otimes dE_j$$

se obtiene

$$\Gamma^k_{ij} = 1/2 \, \hat{e}^{kl} \hat{e}_{l,j,i}$$

$$R_{ij,kl} = (1/2) \hat{e}^{rs} [\hat{e}_{j,kr} \hat{e}_{i,ls} - \hat{e}_{i,kr} \hat{e}_{j,ls}]$$

por lo que la curvatura seccional sería, para esta métrica de Weinhold

$$k(r,s) = - (1/2) \hat{e}^{1k} [\hat{e}_{rr,1} \hat{e}_{ss,k} - \hat{e}_{rs,1} \hat{e}_{rsk}] / (\hat{e}_{rr} \hat{e}_{ss} - \hat{e}_{rs}^2) \quad (2.5)$$

Tomemos una variedad de dimensión 2 inmersa en R^n . Por ejemplo, en el caso del gas ideal una vez que se ha normalizado manteniendo la masa constante, $\hat{e} = \hat{e}(S,V)$. Entonces la curvatura gaussiana es

$$K(p) = \det(\hat{e}_{ij}) / (1 + \Sigma \hat{e}_{ij}^2) = (2/3) (p/R)^2 / (1 + T^2 + p^2)$$

y de (2.4) la curvatura seccional es $k(1,2) = 35(36 p V)^{-1}$, donde $\hat{e}_{11} = T/C_V$, $\hat{e}_{12} = -T/r_V$, $\hat{e}_{22} = 1/VB_0$, con las relaciones $pV = RT$, $C_V = (3/2)R$, $r_V = (3/2)V$ y $B_0 = (3/5)p^{-1}$. El denominador que aparece en esta ecuación no es considerado por Gilmore, y no sé porqué. En este caso no hay problema con las terceras derivadas, pero en general, la objeción de Gilmore procede como sigue. El afirma que como en este caso la curvatura seccional es igual a la curvatura gaussiana, exige que la expresión (2.5) sea positiva. Como el denominador siempre lo es, entonces parecen existir restricciones en el signo de las terceras derivadas. De aquí que sea inaceptable la métrica de Weinhold, pues no existen en la teoría termodinámica tales restricciones.

Por supuesto que la objeción de Gilmore no es válida. No tiene porqué pedir que la curvatura sea positiva con respecto a la métrica de Weinhold. La curvatura gaussiana es igual a la curvatura seccional siempre que el tensor de curvatura riemanniano se calcule a partir de la primera forma fundamental; esto es, de la métrica inducida por la inmersión, por lo que depende de la forma en que se sumerja a la variedad en la variedad "ambiente". Aunque este es un resultado estándar, me parece particularmente claro en [3, p.389].

De hecho, Gilmore no es el único confundido con estas entidades geométricas. Por ejemplo, Salamon y colaboradores, que aplican extensamente la métrica de Weinhold, manifiestan en un artículo [24] posterior al de Gilmore, que aparece una métrica "fundamentalmente" distinta si se encaja la variedad en otra de dimensión mayor. Pero no tienen empacho en usar a la métrica de Weinhold, como primera y como segunda forma

fundamental [21,24,23,25]. Esto es terriblemente confuso, pues estos términos sólo tienen sentido en el contexto de la geometría de subvariedades. Deberíamos aclarar que si bien toda primera forma fundamental es una métrica riemanniana para la subvariedad en cuestión, no tiene sentido la afirmación contraria. Además, se usa frecuentemente, en un mismo trabajo, a la matriz hessiana de ϵ como primera y como segunda forma fundamental, por definición [21,24,25]; pero esto implica que la variedad de estados de equilibrio es un subconjunto abierto de una esfera, para cualquier sistema termodinámico. A pesar de toda esta confusión, aceptamos la objeción de Gilmore a considerar a $\text{hess}(\epsilon)$ como una métrica aceptable, en la medida en que los cálculos de curvatura implicarían la aparición de terceras derivadas de ϵ que no poseen un significado termodinámico claro.

Antes de iniciar este estudio buscaremos una forma más "natural" de normalizar a la función U a fin de perder la menor "información" posible.

Para hacer visible esta pérdida de información veamos un ejemplo sencillo. Supongamos f homogénea de grado 1 en las variables x e y . Entonces, si consideramos la carta de Monge

$$J: (x, y) \rightarrow (x, y, f(x, y))$$

sabemos, por los cálculos ya efectuados, que el operador de forma es

$$A_N^* = (1/(1+f_x^2+f_y^2))^{3/2} \begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{xy} & f_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1+f_y^2 & -f_x f_y \\ -f_x f_y & 1+f_x^2 \end{pmatrix}$$

pero por la homogeneidad de f ,

$$f = x f_x + y f_y$$

y puede calcularse así

$$f_{xx} = \mu^2 f_{yy}$$

$$f_{xy} = -\mu f_{yy}$$

donde las derivadas se evalúan en el punto (x_0, y_0) y $\mu = y_0/x_0$, siempre que x e y sean distintos de cero, por lo que

$$A_N^* = f_{yy}/r^{3/2} \begin{pmatrix} \mu^2 & -\mu \\ -\mu & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1+f_y^2 & -f_x f_y \\ -f_x f_y & 1+f_x^2 \end{pmatrix}$$

$r = (1 + f_x^2 + f_y^2)$. Así A_n se anula en la dirección $J_*(1, \mu)$, donde J_* es la aplicación derivada; es decir en los rayos del plano (x, y) que pasan por (x_0, y_0) . Esto es natural pues corresponde a la generatriz del cono que representa a la gráfica de f . Esta dirección principal corresponde, por supuesto, a la curvatura principal cero. La otra dirección principal, que es la que nos interesa, es ortogonal a la primera y da lugar a la línea de curvatura (esto es, la línea cuya tangente es dirección principal) que es perpendicular en todo punto a la generatriz del cono.

Una curva en el plano (x, y) es línea de curvatura si satisface [17]:

$$(E_m - lF)dx^2 + (E_n - lG)dxdy + (F_n - mG)dy^2 = 0$$

donde E, F y G son los coeficientes de la primera forma fundamental y l, m y n son los de la matriz H . Esto se traduce en

$$f_{yy}/r[(-\mu^2 f_x f_y - \mu f_x^2 - \mu)dx^2 + (f_x^2 + 1 - \mu^2 - \mu^2 f_y^2)dxdy + (f_x f_y + \mu + \mu f_y^2)] = 0.$$

ó

$$f_{yy}/r[(-y^2 f_x f_y - xy f_x^2 - xy)/x^2]dx^2 + [(x^2 f_x^2 + x^2 - y^2 - y^2 f_y^2)/x^2]dxdy + [(x f_x f_y + y + y f_y^2)/x]dy^2 = 0$$

ya que $y = ax$ es línea de curvatura, la ecuación puede factorizarse como

$$(Adx + Bdy)(ydx - xdy) = 0$$

de donde se obtiene

$$A = (y f_x f_y + x f_x^2 + x)/x^2$$

$$B = (y f_y^2 + y + x f_x f_y)/x^2$$

ó bien la expresión más simple

$$A = (x^2 + f^2 - y f f_y)/x^2$$

$$B = (f f_y + y)/x^2$$

(2.6)

Lo anterior implica

$$(y + f f_y)dy + (x + f f_x)dx = 0$$

Esta ecuación es exacta y su solución es

$$L(x, y) = x^2 + y^2 + f^2(x, y) = c$$

con c constante. Así la curva es la intersección del cono $z=f(x,y)$ imagen de f con la esfera $x^2 + y^2 + z^2 = c$.

Puede buscarse también el vector ortogonal a $J_*(1,\mu)$ y tangente a la superficie. Si suponemos que es de la forma $J_*(1,\theta)$,

$$\langle J_*(1,\theta), J_*(1,\mu) \rangle = 0$$

encontramos que

$$\begin{aligned} \langle J_*(1,\theta), J_*(1,\mu) \rangle &= 1 + \mu\theta + (ff_x)/x + \theta(ff_y)/x \\ &= (x+y\theta+ff_x + \theta ff_y)/x = 0 \end{aligned}$$

de lo que resulta

$$\theta = -(x+ff_x)/(y+ff_y) = -A/B$$

con A y B dadas en (2.6)

La curva intersección de la esfera unitaria con la gráfica de f puede expresarse como

$$t \rightarrow (x(t), y(t), \sqrt{1-x(t)^2-y(t)^2})$$

Tomemos la longitud de arco como parámetro de manera que dada

$$\sigma(s) = (x(s), y(s), z(s) = \sqrt{1-x(s)^2-y(s)^2})$$

se obtenga $\|\sigma'(s)\| = 1$. La gráfica puede representarse entonces a través de la carta

$$(r, s) \rightarrow r\sigma(s)$$

Así el operador de forma es

$$A_N = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & k \cos \theta / r \end{pmatrix}.$$

donde N es el vector unitario normal de la forma

$$N = (yz' - y'z, x'z - z'x, y'x - x'y)$$

$k = \|\sigma''\|$ es la curvatura de la curva, y θ es el ángulo que forman el vector σ'' y N . La curvatura principal distinta de cero es $k_2 = k \cos \theta / r$. Si $r = 1$ esto se traduce en una aplicación de una proposición bien conocida: Si k_0 es la curvatura de una línea de curvatura y θ es el ángulo que

forma con el plano normal entonces $k_2 = k_1 \cos \theta$. Esta formula nos permite calcular fácilmente la curvatura principal distinta de cero para cualquier punto del cono. La normalización de f con x o y constantes no da la misma información.

3. GEOMETRIA DE LA n -VARIEDAD DE ESTADOS DE EQUILIBRIO EN R^{2n+1}

Nuestro primer paso será el buscar una normalización más natural para nuestra función U , en el espacio de $2n+1$ variables. Un punto en este espacio se escribirá como $(x_1, \dots, x_n; y_1, \dots, y_n; U)$. Como hemos establecido que $x_i > 0$ para $i = 1, \dots, n$, el espacio a considerar es $M^{2n+1} \subset (R^+)^n \times R^n \times R$. Dotemos a este espacio de una estructura de contacto con la forma de contacto.

$$\alpha = dU - \sum_i y_i dx_i \quad (3.1)$$

(M^{2n+1}, α) es una variedad de contacto pues se satisface la condición de contacto

$$\alpha \wedge (d\alpha)^n \neq 0$$

con lo que se define una forma de volumen. Consideremos el siguiente teorema [13].

TEOREMA. Sea α una forma de contacto sobre una variedad M , de dimensión $2n+1$. Existe un único campo vectorial Z tal que

$$\alpha(Z) = 1$$

y

$$l_Z(d\alpha) = 0$$

donde $l_Z(d\alpha)$ es el producto interior del campo Z con la 2-forma $d\alpha$. Su acción es como sigue. Dada una n -forma w y un campo vectorial X , $l_X(w)$ es la $(n-1)$ -forma tal que

$$l_X(w)(X_1, \dots, X_{n-1}) = w(X, X_1, \dots, X_{n-1})$$

A este campo Z se le denomina campo de Reeb. Para nuestro caso esta dado por

$$Z = \partial/\partial U$$

El núcleo de α en cada punto es de dimensión $2n$ y escogemos una base para éste dada por los vectores

$$\partial/\partial y_i, \partial/\partial x_i + y_i \partial/\partial U, i = 1, \dots, n. \quad (3.2)$$

Llamaremos D a la distribución de subespacios tangentes definida por el núcleo de α . Aunque es conocida la abundancia de subvariedades integrales de la distribución D asociada a

la forma de contacto α , baste considerar el hecho que no pueden tener dimensión mayor que n y la siguiente proposición [2].

PROPOSICION. Sea $J: N^n \rightarrow M^{n+1}$ una subvariedad de la variedad de contacto con forma de contacto α . Entonces N^n es una subvariedad integral de D si y sólo si α y $d\alpha$ restringidas a N^n son cero.

Así la subvariedad dada por el encaje

$$J: M^n \rightarrow M^{n+1} \quad (3.3)$$

$$(x_1, \dots, x_n) \rightarrow (x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n, U)$$

donde $U = U(x_1, \dots, x_n)$ y $y_i = \partial U / \partial x_i$, es una subvariedad integral de D dada α como en (3.1). De hecho, para X en TM^n ,

$$X = \sum_i a_i \partial / \partial x_i.$$

por lo que

$$\begin{aligned} J_* X &= \sum_i a_i \left[\partial / \partial x_i + \sum_j \partial^2 U / \partial x_i \partial x_j \partial / \partial y_j + y_i \partial / \partial U \right] \\ &= \sum_i a_i \left(\partial / \partial x_i + y_i \partial / \partial U \right) + \sum_j \left(\sum_i a_i \partial^2 U / \partial x_i \partial x_j \right) \partial / \partial y_j \\ &= \sum_i a_i \left(\partial / \partial x_i + y_i \partial / \partial U \right) + \sum_j b_j \partial / \partial y_j \in D \end{aligned}$$

con $b_j = \sum_i a_i \partial^2 U / \partial x_i \partial x_j$. Definimos entonces a la subvariedad $J(M^n)$ de (3.3) como

$$M^n = \{ (x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n, U) \mid U = U(x_1, \dots, x_n), y_i = \partial U / \partial x_i \} \quad (3.4)$$

Sabemos que para estudiar la curvatura de esta subvariedad es necesario inducir una métrica a ella a partir de una métrica dada en M^{n+1} . Como en M^{n+1} las coordenadas son tanto variables extensivas como intensivas, es necesario escoger una métrica que se defina a partir de la estructura de contacto, que describe una cierta asimetría entre ellas. La siguiente proposición permite la construcción de una métrica adecuada [2].

PROPOSICION. Sea (M^{n+1}, α) una variedad de contacto, entonces existen un campo vectorial Z y un campo de endomorfismos S en sus espacios tangentes que satisfacen,

$$\alpha(Z) = 1 \quad (3.5)$$

$$S^2 = -I + \alpha \otimes Z$$

donde I es la transformación identidad, $\alpha \otimes Z$ se aplica a un campo vectorial arbitrario X como

$$\alpha \otimes Z (X) = \alpha(X)Z$$

Además existe una métrica g (llamada métrica compatible con la estructura de contacto) tal que, para todo par de vectores tangentes X, Y

$$g(sX, sY) = g(X, Y) - \alpha(X)\alpha(Y) \quad (3.6)$$

La demostración aparece en la referencia citada. Aquí veremos que es posible deducir, a partir de (3.5), que

$$sZ = 0 \quad (3.7')$$

$$\alpha \circ s = 0 \quad (3.7'')$$

pues de las ecuaciones (3.5) $s^2Z = 0$ por lo que $sZ = 0$ ó sZ es un vector propio no trivial de s asociado al valor propio cero. Ahora evaluamos

$$s^2sZ = -sZ + \alpha(sZ)Z = 0$$

de donde $s(Z) = \alpha(sZ)Z$. Si suponemos $s(Z)$ distinto de cero entonces $\alpha(sZ) \neq 0$ y es un valor propio de s con Z como vector propio. Pero

$$0 = s^2Z = (\alpha(sZ))sZ$$

una contradicción. Concluimos $sZ = 0$.

Para ver que $\alpha(sX) = 0$ para todo campo vectorial X , basta calcular

$$\alpha(sX)Z = -s^2X + sX = -sX + s(\alpha(X)Z) + sX = 0$$

La importancia de la demostración de la existencia de una métrica g como en la proposición radica en que muestra la abundancia de métricas compatibles. Sea h' cualquier métrica riemanniana sobre M^{2n+1} y definimos h por

$$h(X, Y) = h'(s^2X, s^2Y) + \alpha(X)\alpha(Y)$$

Ahora sea g definida como

$$g(X, Y) = 1/2 (h(X, Y) + h(sX, sY) + \alpha(X)\alpha(Y))$$

Esta g satisface la condición (3.6), pero es evidente la falta de unicidad. Es importante notar que para todo campo vectorial X

$$g(Z, X) = \alpha(X) \quad (3.8)$$

A fin de aclarar nuestras ideas respecto a esta estructura métrica, analicemos la expresión matricial del campo de endomorfismos s y de la métrica g . Como $sZ = 0$ y $\alpha \cdot s = 0$, entonces

$$s = \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & 0 \\ s_3 & s_4 & 0 \\ y^t s_1 & y^t s_2 & 0 \end{pmatrix} \quad .$$

Donde s_i son matrices de orden $n \times n$, mientras que y es un vector columna de componentes y_i . De la condición (3.8) vemos que

$$s_1^2 + s_2 s_3 = -I$$

$$s_1 s_2 + s_2 s_4 = 0$$

$$s_3 s_1 + s_4 s_3 = 0$$

$$s_3 s_2 + s_4^2 = -I$$

Si n es impar, $s_2 \neq 0$ ó $s_3 \neq 0$. Supongamos que s_2 es invertible, entonces

$$s_3 = -s_2^{-1}(I + s_1^2)$$

$$s_4 = -s_2 s_1 s_2$$

Por lo que

$$s = \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & 0 \\ -s_2^{-1}(I + s_1^2) & -s_2^{-1}s_1 s_2 & 0 \\ y^t s_1 & y^t s_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

y simétricamente para s_3 invertible. El único caso en que no es claro qué ocurre es cuando ninguna de las matrices es invertible.

Si n es par, entonces puede suceder que s_2 ó s_3 sean cero. si $s_2 = 0$

$$s = \begin{pmatrix} s_1 & 0 & 0 \\ s_3 & s_1 & 0 \\ y^t s_1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

con $s_3 = s_1 s_2 s_1$, ya que $s_1^2 = -I$ tenemos $\det(s_1) = 1$ y

$$s_1^{-1} = s_1^t = -s_1$$

Además

$$s_3^m = (-1)^{m-1} s_1 s_2 s_1$$

Por otra parte, como $g(Z, X) = \alpha(X)$

$$g = \begin{pmatrix} g_1 & g_2 & -y \\ g_2^t & g_3 & 0 \\ -y^t & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

donde g_i son matrices de orden $n \times n$ y el vector y es como antes. La condición (3.6) muestra la dependencia de g respecto de s (de hecho la construcción de g en la prueba es un indicador más claro de esta dependencia), por que la simplificación de s es una paso inicial en el análisis de las estructuras métricas de contacto.

Analicemos el caso del gas ideal. Aquí $U = U(S, V, N)$. Como $n=3$, s debe ser de la forma (3.9). Recordemos que el encaje está dado por

$$(S, V, N) \rightarrow (S, V, N, T, -p, \mu, U)$$

de manera que el vector y es el transpuesto de $(y_1, y_2, y_3) = (T, -p, \mu)$. Simplifiquemos s tomando $s_1 = 0$ y $s_2 = I$. En este caso se tiene

$$s = \begin{pmatrix} 0 & I & 0 \\ -I & 0 & 0 \\ 0 & y^t & 0 \end{pmatrix}$$

por lo que, dada la condición (3.6), g está dado por

$$g = \begin{pmatrix} g_3 + yy^t & g_2 & -y \\ g_2^t & g_3 & 0 \\ -y^t & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

con $g_2 = -g_2^t$. Simplifiquemos esta matriz sin violar la positividad requerida escogiendo $g_3 = I$ y $g_2 = 0$. Así,

$$g = \begin{pmatrix} I + yy^t & 0 & -y \\ 0 & I & 0 \\ -y^t & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Obsérvese que la primera submatriz reproduce la forma de la primera forma fundamental en la inmersión de una variedad de dimensión n en otra de dimensión $n+1$ (2.2) bajo la carta de Monge (2.1). Con esta elección, $\det(g) = 1$, y su matriz inversa es extremadamente simple

$$g^{-1} = \begin{pmatrix} I & 0 & y \\ 0 & I & 0 \\ y^t & 0 & 1+y^ty \end{pmatrix}$$

Esto facilita los cálculos de los símbolos de Christoffel. Antes de continuar veremos que esta métrica (3.12) resulta natural dada la base (3.2) de D . En general si $X, Y \in D$, la ecuación (3.6) implica

$$g(sX, sY) = g(X, Y)$$

De manera que s es una isometría de D en D (pues $sX \in D$ para todo campo vectorial (3.7')). Además

$$g(sX, X) = g(s^2X, sX) = g(-X + \alpha(X)Z, sX) = -g(X, sX)$$

lo que implica que

$$g(X, sX) = 0$$

Así X y sX en D son ortogonales con respecto a g . Finalmente si X está en D

$$g(X, Z) = 0$$

y

$$g(sX, Z) = 0$$

De esta forma podemos construir una base (llamada una s -base [2]) para TM^{n+1} como sigue. Dados X_1 en D y Z , (Z, X_1, sX_1) son ortogonales entre sí. Escogemos X_2 en D ortogonal a este conjunto y construimos el conjunto $\{Z, X_1, sX_1, X_2, sX_2\}$, continuamos hasta completar la base $\{Z, X_1, \dots, X_n, sX_1, \dots, sX_n\}$.

Puede verificarse sin problema que la base (3.2) es una s -base para la métrica (3.12).

Ahora bien, para el estudio de la curvatura de una subvariedad M^n , deben calcularse los operadores de forma que determinan a las direcciones principales. Cada uno de los operadores está asociado a un vector unitario normal a la subvariedad. En el caso de codimensión 1 esto no resulta problemático pues sabemos que el vector unitario queda determinado de manera única (salvo el signo). Como aquí tenemos codimensión igual a 4, la elección es más bien arbitraria. Podemos, sin embargo, eliminar cierto grado de arbitrariedad ya que tenemos un campo vectorial bien definido y en cierto modo privilegiado: El campo de Reeb Z . Obsérvese que dada cualquier métrica compatible con la estructura de contacto se tiene $g(Z, Z) = \alpha(Z) = 1$, por lo que Z es unitario. De hecho, si quiere calcularse por ejemplo el tensor de curvatura media, deben calcularse los operadores de forma para una base del espacio normal. No es nuestro propósito. Con la métrica elegida y una vez determinada la conexión riemanniana, se obtiene la acción de la segunda forma fundamental como

$$h(\partial/\partial x_i, \partial/\partial x_j) = (0, 0, 0, *, *, *, -\partial^2 U / \partial x_i \partial x_j)$$

(recuérdese que $(x_1, x_2, x_3) = (S, V, N)$). Basta calcular esta acción sobre la base de TM^n pues h es bilineal. Hemos omitido la especificación y de hecho el cálculo de las coordenadas cuarta, quinta y sexta por la siguiente razón. Como el operador de forma se calcula a partir de la ecuación

$$G(A_Z X, Y) = g(h(X, Y), Z) \quad X, Y \in TM^n$$

donde A_Z es el operador de forma asociado al vector normal unitario Z , y

$$G = i^* g \quad (2.13)$$

Sabemos que

$$g(h(X, Y), Z) = \alpha(h(X, Y))$$

y dado que para cualquier vector

$$X = \sum a_i \partial/\partial x_i + b_i \partial/\partial y_i + c \partial/\partial U$$

se tiene que

$$\alpha(X) = c - \sum_i y_i a_i$$

Puede observarse que los coeficientes b_i no aparecen en el cálculo. Por otra parte

$$G = I + [\text{hess}(U)]^2$$

por lo que

$$A_z^* = - [\text{hess}(U)] G^{-1} \quad (3.14)$$

Considerando la homogeneidad de U, puede usarse la expresión

$$U = \sum_i x_i y_i$$

y se obtiene la siguiente expresión del hessiano de U

$$\text{hess}(U) = \begin{pmatrix} \lambda^2 U_{VV} + 2\lambda\mu U_{VN} + \mu^2 U_{NN} & -\lambda U_{VV} - \mu U_{VN} & -\lambda U_{VN} - \mu U_{NN} \\ -\lambda U_{VV} - \mu U_{VN} & U_{VV} & U_{VN} \\ -\lambda U_{VN} - \mu U_{NN} & U_{VN} & U_{NN} \end{pmatrix}$$

con $\lambda = V_0/S_0$ y $\mu = N_0/S_0$. Esto siempre que S, V y N sean distintos de cero. De esta forma, usando nuevamente la homogeneidad de U se obtiene la expresión

$$A_z^* = [\text{hess}(U)] / \det(G)$$

De aquí se deduce que A_z se anula en la dirección $(1, \lambda, \mu)$, que se asocia a la dirección de curvatura cero, y que representa a los rayos (en R^3) que pasan por el punto (S_0, V_0, N_0) . Debido a que todos los vectores propios del operador de forma son ortogonales entre sí, los vectores asociados a curvaturas distintas de cero generan al plano que es tangente a la esfera. Esto indicaría que la forma natural de normalizar a U es evaluarla en la esfera unitaria.

Debemos enfatizar, sin embargo, que siempre es posible encontrar una métrica compatible con la estructura de contacto de forma que el operador de forma asociado (dependiente también del campo de Reeb) tenga como direcciones principales aquellas que deseamos, por lo que la condición de compatibilidad con la estructura de contacto no es demasiado restrictiva. Por otra parte, existe más de una métrica que dé lugar a un mismo operador de forma, por lo que no hay correspondencia 1-1 entre estos operadores (la mera consideración dimensional podría bastar para hacer ver esto). Para encontrar la métrica deseada, que produzca un cierto operador de forma dado, pedimos ciertas condiciones sobre la métrica G. La G a su vez está determinada por g a través de la ecuación (3.13). Con este procedimiento podemos determinar las restricciones sobre los elementos de g; sumadas la condición de contacto y la positividad tenemos

determinada g . Como puede observarse tenemos n^2 variables (ya que g_2 tiene $n(n-1)/2$ entradas, g_3 tiene $n(n+1)/2$ y su suma es n^2) que deben satisfacer a lo más $n(n+1)/2$ ecuaciones, que son el número de elementos de G , y de aquí la libertad de elección.

Nuestra métrica sin embargo, es preferible porque al ser evaluada U sólo en la esfera unitaria y extendida por homogeneidad, permite el cálculo simple de las curvaturas principales; siempre que se reparametriza a la esfera como se hizo en el ejemplo de dimensión 2. Las curvaturas entonces serían aquellas de la esfera pero multiplicadas por el recíproco de la longitud radial. Por otra parte, puede observarse que se reconstruye la formulación obtenida al encajar a la variedad en otra de una dimensión mayor a través de la carta de Monge. Usaremos entonces la misma descripción del encaje dada en (3.3), pero sin considerar la homogeneidad de U pues se supondrá que está evaluada en la esfera $S^2 + V^2 + N^2 = 1$.

4. GEOMETRIA ASOCIADA A LA TRANSFORMADA DE LEGENDRE.

Sea $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función de clase C^∞ . La transformada de Legendre usualmente se interpreta en termodinámica (f es en este caso la función de energía) como el resultado de reemplazar a f por la ecuación de los hiperplanos tangentes a la gráfica de esta función. Consideraremos aquí un concepto más formal de la transformada de Legendre a fin de estudiar la geometría asociada a ella. Seguiremos fundamentalmente a [7] y tomaremos de allí los siguientes conceptos.

DEFINICION. La transformada de Legendre de la función $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ es el subconjunto $L_f \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ de pares (y, z) , para los que existe un x que satisface

$$\begin{aligned} z &= f(x) - \sum x_i y_i \\ y_i &= \partial f / \partial x_i (x) \end{aligned} \quad (4.1)$$

Geométricamente esto se interpreta como sigue. z es la ordenada al origen correspondiente a $x=0$ del hiperplano tangente a la gráfica de la función en el punto $(x, f(x))$, mientras que y_i son los "coeficientes directores" de ese plano.

Nos interesa inicialmente determinar las condiciones bajo las que L_f es la gráfica de una función. Para ello consideremos el conjunto $V \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ con elementos $(y, -x, z)$ que verifican (4.1). Por supuesto es una variedad parametrizada por x , y es claro que $L_f = \Pi(V)$ donde Π es la proyección $(y, -x, z) \rightarrow (y, z)$. El siguiente lema aporta las condiciones que necesitamos [7].

LEMA. Existe una vecindad $B_\varepsilon(x)$ tal que $L_f|B_\varepsilon(x)$ es una subvariedad de dimensión n de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ si y sólo si la matriz hessiana de f en el punto x es no degenerada. Además en este caso $L_f|B_\varepsilon(x)$ es la gráfica de una función g de $\mathbb{R}^n$ en $\mathbb{R}$.

Demostración. Para cada punto $(y, -x, z)$ de V que satisface el sistema de ecuaciones (4.1), el espacio tangente en ese punto está generado por los vectores

$$(\partial^2 f / \partial x_i \partial x_k (x), \dots, \partial^2 f / \partial x_n \partial x_k (x), -\delta_i^k, \dots, -\delta_n^k, -\sum x_i \partial^2 f / \partial x_i \partial x_k (x))$$

para $k=1, 2, \dots, n$, donde δ_i^k es la delta de Kronecker. Bajo Π , estos vectores proyectan en

$$(\partial^2 f / \partial x_i \partial x_k (x), \dots, \partial^2 f / \partial x_n \partial x_k (x), -\sum x_i \partial^2 f / \partial x_i \partial x_k (x))$$

Dado que la última componente es una combinación lineal de las anteriores, $\Pi(V)$ es de rango n si y sólo si la matriz hessiana de f es no degenerada. Además la proyección de V sobre $\mathbb{R}^n$ es de rango máximo y de aquí que L_+ puede ser parametrizada localmente por y .

El hessiano de la transformada de Legendre de f tiene una expresión sencilla, según lo expresa el siguiente resultado [7]:

LEMA. Supongamos que la matriz hessiana de f en el punto x sea no degenerada. Entonces L_+ es localmente la gráfica de una función $z=g(y): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$\text{hess}(g(\partial f/\partial x_1(x), \dots, \partial f/\partial x_n(x))) = [\text{hess}(f)(x)]^{-1}$$

Demostración. Con la hipótesis del lema, la ecuación

$$y = (\partial f/\partial x_1(x), \dots, \partial f/\partial x_n(x))$$

es localmente inversible y por lo tanto

$$x = q(y)$$

Por lo que

$$Dq(y) = [\text{hess}(f)(x)]^{-1}$$

Podemos escribir la ecuación (4.1) como

$$z = f(q(y)) - \sum y_i q_i(y) = g(y)$$

de donde

$$\partial g/\partial y_i(y) = -q_i(y)$$

y

$$\partial^2 g/\partial y_i \partial y_j(y) = -\partial q_j/\partial y_i(y)$$

lo que da el resultado.

Obsérvese que la nueva función definida g , depende sólo de y , y no de una mezcla de valores de x_i y de y_i , por lo que puede considerarse como la transformada total de Legendre. podemos también considerar transformadas parciales. Sea $I \subset \{1, \dots, n\}$ y J su complemento. Entonces para $x \in \mathbb{R}^n$, x_I denotará el conjunto de componentes x_i de x tales que $i \in I$; de la misma forma para x_J . De este modo $x = (x_I, x_J)$. Por supuesto $y_I x_I = \sum x_i y_i$ y $\partial f/\partial x_I(x)$ es la $|I|$ -ada de $\partial f/\partial x_i(x)$, $i \in I$.

($|I|$ cardinalidad del conjunto I). Definimos ahora la transformada parcial de Legendre [7]:

DEFINICION. Se llama transformada de Legendre I -parcial de f al conjunto L_+ de parejas $(y, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ tales que existe $x \in \mathbb{R}^n$ con

$$z = f(x) - x_I \partial f / \partial x_I (x)$$

$$y_I = \partial f / \partial x_I (x)$$

$$y_J = x_J$$

Para $I = \{1, 2, \dots, n\}$ se tiene la definición ya dada de la transformada total de Legendre, y para $I = \emptyset$ se tiene la gráfica de f .

De aquí se define la variedad I -parcial V_I de Legendre asociada a f , como el conjunto de puntos $(y, t, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ tales que

$$z = f(x) - x_I \partial f / \partial x_I (x)$$

$$y_I = \partial f / \partial x_I (x)$$

$$y_J = x_J$$

$$t_I = -x_I$$

$$t_J = \partial f / \partial x_J (x)$$

lo que posibilita definir a la transformada de Legendre de una función f como sigue [7].

DEFINICION. La I -transformación de Legendre es la aplicación $CI: \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^{n+1}$ que asocia a (x, y, z) el valor $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$ tal que

$$\tilde{z} = z - y_I x_I$$

$$\tilde{x}_I = y_I$$

$$\tilde{x}_J = x_J$$

$$\tilde{y}_I = -x_I$$

$$\tilde{y}_J = y_J$$

(4.2)

Dada la forma de contacto $\tilde{\alpha} = d\tilde{z} - \tilde{y}_I d\tilde{x}_I$ se tiene

$$CI^* \tilde{\alpha} = dz - y_I dx_I - y_J dx_J = dz - y dx = \alpha$$

por lo que CI es una transformación de contacto. Así pues mapea subvariedades integrales de la distribución D definida por el núcleo de α en subvariedades integrales de D. Nuestro siguiente paso es entonces estudiar los cambios de métrica y curvatura producidos por las transformadas parciales CI de la subvariedad M^n definida en (3.4), esto es, de $CI(M^n)$.

Sabemos que dados $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) \in \mathbb{R}^{2n+1}$ como en (4.2), una métrica compatible con la estructura de contacto $\tilde{\alpha} = d\tilde{z} - \tilde{y} \cdot d\tilde{x}$ es

$$\tilde{g} = \begin{pmatrix} I + \tilde{y}\tilde{y}^* & 0 & -\tilde{y} \\ 0 & I & 0 \\ -\tilde{y}^* & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

con $\tilde{y} = (\tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_n)$. Nos interesa esta métrica porque conocemos ya la métrica que hereda a la subvariedad $\tilde{x} \mapsto (\tilde{x}, \tilde{y}(\tilde{x}), \tilde{z}(\tilde{x}))$ integral de $\tilde{\alpha}$, su conexión riemanniana y por lo tanto la expresión del operador de forma. Basta entonces estudiar $CI^*(\tilde{g})$ para determinar los cambios de curvatura que sufre M^n bajo la transformación CI. El siguiente resultado, nos garantiza, sin embargo, que no existen tales cambios.

TEOREMA. Sean $P, P' \subset \mathbb{R}^{2n+1}$ y $CI: P \rightarrow P'$ la I-transformación de Legendre $(x, y, z) \rightarrow (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$. Sean $\alpha = dz - y \cdot dx$ y $\tilde{\alpha} = d\tilde{z} - \tilde{y} \cdot d\tilde{x}$ formas de contacto definidas en P y P' respectivamente. Si $\tilde{g}$ es la métrica (4.3) compatible con la estructura de contacto $(P', \tilde{\alpha})$ y g la métrica (3.12) compatible con la estructura (P, α) , entonces CI es una isometría, $g = CI^*\tilde{g}$.

Demostración. Por comodidad expresaremos a g y $\tilde{g}$ como

$$g = \alpha \otimes \alpha + \sum_{i=1}^n ((dx_i)^2 + (dy_i)^2)$$

$$\tilde{g} = \tilde{\alpha} \otimes \tilde{\alpha} + \sum_{i=1}^n ((d\tilde{x}_i)^2 + (d\tilde{y}_i)^2)$$

Dado que CI es transformación de contacto y $\alpha = CI^*\tilde{\alpha}$ se tiene

$$CI^*g = \alpha \otimes \alpha + \sum_{i \in I} ((dx_i)^2 + (dy_i)^2) + \sum_{j \in J} ((dx_j)^2 + (dy_j)^2).$$

$$= \alpha \otimes \alpha + \sum_{i=1}^n ((dx_i)^2 + (dy_i)^2) = g$$

lo que concluye la prueba.

El tensor de curvatura riemanniano se preserva por isometrías, puesto que sólo depende de la métrica. Esto da lugar al siguiente resultado.

COROLARIO. Sea M^n la subvariedad de (R^{2n+1}, α) dada por (3.4) con $\text{hess}(U)$ no degenerado, entonces la curvatura seccional de un punto $p \in M^n$ es igual a la curvatura seccional de $CI(M^n) = VI$ en el punto $CI(p)$.

En el caso del gas ideal, tan socorrido ejemplo, vemos que es necesario el normalizar a $U(S, V, N)$. Usualmente esto se hace tomando N constante. Así pues, se tiene la aplicación

$$(S, V) \rightarrow (S, V, T(S, V), -p(S, V), \phi(S, V))$$

Con la forma de contacto usual, podemos seleccionar a la métrica g partiendo del endomorfismo s , ahora de la forma (3.10), pues n es par. Tomemos entonces a s_1 como

$$\phi = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

y a $s_2 = 0$. Con lo que g es

$$g = \begin{pmatrix} g_1 + yy^* & g_2 & -y \\ g_2^* & g_3 & 0 \\ -y^* & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Obsérvese que g_1 y g_3 son independientes, mientras que en (3.11) son iguales. Tomamos $g_1 = g_3 = I$ y $g_2 = 0$ y obtenemos la forma ya conocida de g . En este caso la función de Gibbs

$$G = \phi - TS + pV$$

es la transformada total de Legendre de ϕ

$$C: (S, V, T, -p, \phi) \rightarrow (T, -p, -S, -V, G)$$

La curvatura gaussiana (que coincide con la curvatura seccional tomando la métrica heredada de la variedad (R^m, α) con g métrica compatible) en cualquier punto x de $M^2 = \{(S, V, T, -p, \phi) : \phi = \phi(S, V), T = \partial \phi / \partial S, -p = \partial \phi / \partial V\}$ subvariedad de R^5 , coincide con aquella evaluada en el punto $C(x)$ de la subvariedad $V = \{(T, -p, -S, -V, G) : G = G(T, -p), S = \partial G / \partial T, V = \partial G / \partial (-p)\}$; pero sus curvaturas principales (que no son invariantes bajo isometrías) son distintas debido al lema de la página 28 y a la expresión (3.14) del operador de forma.

Hemos visto que la forma más natural de estudiar la geometría de un sistema termodinámico es la de usar la métrica inducida por la inmersión de la variedad en otra de dimensión mayor y no la métrica de Weinhold. El encajar a la variedad n -dimensional de estados de equilibrio en R^{2n+1} permite

normalizar a U de manera natural; además, la transformada de Legendre definida en este espacio de variables intensivas, extensivas y ϵ (una vez normalizada U), preserva las propiedades que son invariantes bajo isometrías, en particular, a la curvatura.

REFERENCIAS

1. L. Auslander, Differential Geometry (Harper & Row, New York, 1967)
2. D.E. Blair, Contact Manifolds in Riemannian Geometry (Springer-Verlag Lecture Notes, New York, 1976)
3. W.M. Boothby, An Introduction to Differentiable Manifolds and Riemannian Geometry (Academic Press, New York, 1975)
4. H.B. Callen, Thermodynamics (John Wiley, New York, 1960)
5. L. Casián, Mis. Mat. 14,23 (1980)
6. B.-Y. Chen, Geometry of Submanifolds (Marcel Dekker, New York, 1973)
7. J.G. Dubois y J.P. Dufour, Ann. Inst. Henri Poincaré 29,1 (1978)
8. T. Feldmann, B. Anderesen, A. Qi y P. Salamon, Chem. Phys. 83,5849 (1985)
9. W. H. Fleming, Funciones de Varias Variables (C.E.C.S.A., México, 1969)
10. R. Gilmore, Catastrophe Theory for Scientists and Engineers (Wiley, New York, 1981)
11. R. Gilmore, J. Chem. Phys. 75, 5964 (1981)
12. R. Gilmore, Phys. Rev. A 30 1994 (1984)
13. C. Godbillon, Géometrie Différentielle et Mécanique Analytique. (Hermann, Paris, 1969)
14. R. Hermann, Geometry, Systems and Physics (Marcel Dekker, New York, 1973)
15. B.R. Israel, Convexity in Theory of Lattice Gases (Princeton Univ. Press, Princeton, 1979)
16. W. Klingenberg, Curso de Geometría Diferencial (Alhambra, Madrid, 1978)
17. M. Lipschutz, Geometría Diferencial. (McGraw-Hill, México, 1971)
18. J.D. Nulton y P. Salamon, Phys. Rev. A 31, 2520 (1985)

19. B. O'Neill, Elementos de Geometria Diferencial (Limusa, México, 1982)
20. G. Ruppeiner, Phys. Rev. A 20, 1608 (1979)
21. P. Salamon, Tesis Doctoral, 1978.
22. P. Salamon, B. Andresen, P.D.Gait y R.S. Berry, J. Chem. Phys. 73, 1001 (1980)
23. P.Salamon, E.Ihrig y R.S.Berry, J.Math.Phys.24,2515(1983)
24. P. Salamon, J.Nulton y E.Ihrig, J.Chem.Phys.80,436(1984)
25. P.Salamon, J.Nulton, J.D.Berry, J.Chem.Phys.82,2433(1985)
26. F. Weinhold, J.Chem.Phys. 63, 2479 (1975)
27. F. Weinhold, J.Chem.Phys. 63, 2484 (1975)
28. F. Weinhold, J.Chem.Phys. 63, 2488 (1975)
29. F. Weinhold, J.Chem.Phys. 63, 2496 (1975)
30. F. Weinhold, J.Chem.Phys. 65, 558 (1976)
31. F. Weinhold, J.Chem.Phys. 29, 32 (1976)