

- Busquemos ahora una ecuación de evolución para $f(\vec{r}, \vec{v}; t)$. Nos limitaremos evidentemente al caso de un gas diluido monoatómico, aunque admitiremos la posible presencia de una fuerza externa (independiente de la velocidad de la partícula)

El número de partículas que hay en el pto \vec{r} con velocidad \vec{v} cambia durante el intervalo de tiempo dt por tres razones diferentes esenciales:

- (1) Porque, al desplazarse las partículas, las que estaban en \vec{r} en t están en $\vec{r} + \vec{v} dt$ en $t+dt$. Análogamente, partículas que estaban próximas a \vec{r} en t , pasan a ocupar esa posición en $t+dt$.
- (2) Porque, si existe una fuerza externa $\vec{F}(\vec{r}; t)$ sobre cada partícula, las partículas que tenían una velocidad \vec{v} en t tendrán una velocidad diferente $\vec{v} + \frac{\vec{F}}{m} dt$ en $t+dt$. Del mismo modo, partículas que tenían una velocidad próxima a \vec{v} en t son aceleradas y alcanzan esa velocidad en $t+dt$.
- (3) Porque, al producirse colisiones durante el intervalo dt entre partículas que se encuentran en \vec{r} , algunas de ellas varían sus velocidades. Así, partículas que tenían velocidad \vec{v} en t , poseen otra velocidad en $t+dt$ debido a las colisiones. Análogamente, partículas con una velocidad $\vec{v}' \neq \vec{v}$ en t acaban teniendo la velocidad \vec{v} en $t+dt$ tras sufrir colisiones.

- Los dos primeros efectos son debidos al flujo libre de las partículas, mientras que el tercero se debe a las colisiones (interacciones) entre las moléculas.

En un gas diluido, se puede admitir que ambos mecanismos están desacoplados y escribir: (colisiones "instantáneas")

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{flujo libre}} + \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{colisiones}}$$

- Calculemos primero el término de flujo libre. Es decir, despreciamos las interacciones entre las partículas.

Las moléculas que en el instante t tienen posiciones entre \vec{r} y $\vec{r} + d\vec{r}$ y se mueven con velocidades comprendidas entre \vec{v} y $\vec{v} + d\vec{v}$ tendrán en el instante

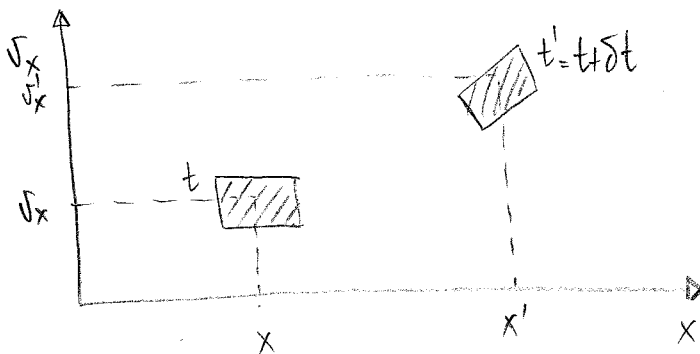
$t' = t + \delta t$ posiciones y velocidades comprendidas, respectivamente, entre \vec{r}' y $\vec{r}' + d\vec{r}'$ y \vec{v}' y $\vec{v}' + d\vec{v}'$, siendo

$$\begin{cases} \vec{r}' = \vec{r} + \vec{v} \delta t \\ \vec{v}' = \vec{v} + \frac{\vec{F}}{m} \delta t \end{cases} \quad \parallel \quad \begin{cases} d\vec{r}' = d\vec{r} + d\vec{v} \delta t \\ d\vec{v}' = d\vec{v} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{d\vec{r}}{m} \delta t \end{cases}$$

- Es claro que en ausencia de colisiones, el número medio de moléculas permanece invariante durante la evolución

$$f(\vec{r}, \vec{v}; t) d^3\vec{r} d^3\vec{v} = f(\vec{r}', \vec{v}'; t') d^3\vec{r}' d^3\vec{v}'$$

Para tener una imagen gráfica, consideremos el caso unidimensional



El número de partículas que hay en las dos áreas sombreadas es el mismo. Además, debido a la distinta velocidad de los puntos en t , el elemento de área en t' se ha deformado pero no ha variado de área. Veámoslo en general:

$$d^3\vec{r}' d^3\vec{v}' = |J| d^3r d^3v,$$

donde J es el jacobiano de la transformación:

$$|J| = \left| \frac{\partial(\vec{r}', \vec{v}')}{\partial(\vec{r}, \vec{v})} \right| = \left| \frac{\partial(x', y', z', v'_x, v'_y, v'_z)}{\partial(x, y, z, v_x, v_y, v_z)} \right|$$

$$= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \delta t & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \delta t & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \delta t \\ \frac{1}{m} \frac{\partial F_x}{\partial x} \delta t & \frac{1}{m} \frac{\partial F_x}{\partial y} \delta t & \frac{1}{m} \frac{\partial F_x}{\partial z} \delta t & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 + \mathcal{O}((\delta t)^2) \approx 1$$

$$\frac{\partial x'_\alpha}{\partial x_\beta} = \delta_{\alpha\beta} \quad \frac{\partial x'_\alpha}{\partial v_\beta} = \delta_{\alpha\beta} \delta t$$

$$\frac{\partial v'_\alpha}{\partial x_\beta} = \frac{1}{m} \frac{\partial F_\alpha}{\partial x_\beta} \delta t$$

$$\frac{\partial v'_\alpha}{\partial v_\beta} = \delta_{\alpha\beta}$$

- Por tanto,

$$f(\vec{r}', \vec{v}', t) = f(\vec{r}, \vec{v}, t),$$

$$f(\vec{r}', \vec{v}', t) = f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \cdot (\vec{r}' - \vec{r}) + \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \cdot (\vec{v}' - \vec{v}) + \frac{\partial f}{\partial t} (t' - t)$$

$$= f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{v} \delta t + \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \cdot \frac{\vec{F}}{m} \delta t + \frac{\partial f}{\partial t} \delta t = f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

De esta forma,

$$\boxed{\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{FLUIDO LIBRE}} = - \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} - \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}}}$$

Esta ecuación guarda cierta analogía con la ec. de Liouville.

- En el caso general tenemos entonces

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{colisiones}}$$

- El cálculo del término de colisiones es complicado, puesto que es necesario considerar con cierto detalle el mecanismo de colisión. Debido a ello, y antes de proponer una ecuación "exacta" (en estas condiciones) que tenga en cuenta la dinámica de las colisiones, es conveniente considerar modelos algo simplificados.

- El más utilizado y sencillo es el de la ecuación de Boltzmann en la aproximación del tiempo de relajación. También es llamada ecuación de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK, 1954).

- La idea básica consiste en admitir que el efecto neto de las colisiones es hacer relajar la función de distribución de velocidades hacia la de equilibrio local sobre un tiempo igual al tiempo medio entre colisiones.

En la ec. de Boltzmann, la influencia de las colisiones sobre la evolución de la distribución está mucho más detallada.

- Concretamente, la aproximación consiste en hacer

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisiones}} = - \frac{f(\vec{r}, \vec{v}, t) - f_{\text{eq}}(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\tau(\vec{r}, t)}$$