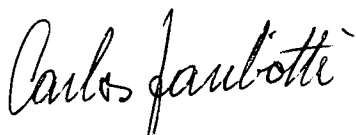


01.85.01

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
NO 1	AÑO 1985

EFFECTOS NO LINEALES EN LA ECUACION DE BOLTZMANN

Tesis presentada ante el Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, República Argentina, para optar al título de Doctor en Física.



Dr. C. R. Garibotti  
Asesor Científico



Lic. R. O. Barrachina  
Doctorando

San Carlos de Bariloche

1985

## RESUMEN

En esta tesis estudiamos la ecuación de Boltzmann no lineal. Para ello introducimos una transformación integral de la función distribución en el caso espacialmente homogéneo e isotrópico en velocidad. Esta transformación puede interpretarse como una superposición lineal de estados de equilibrio con temperaturas variables. Mostramos que las características de la evolución temporal de la función distribución quedan determinadas por las singularidades de dicha transformada en temperatura. Aplicamos este método a los modelos de interacción de Maxwell y al modelo de partícula muy dura. Para este último comparamos las soluciones de la ecuación de Boltzmann con aquellas que se obtienen linealizándola, encontrando varias discrepancias básicas debidas a efectos no lineales. Esto nos conduce a la definición de un aproximante racional de la función distribución con un claro significado físico. Con esta técnica analizamos la evolución temporal del modo BKW, encontrando un contraejemplo concluyente a la conjetura de Krook y Wu.

Resolvemos la ecuación de Boltzmann anisotrópica para modelos de Maxwell en la forma de un desarrollo en términos de las autofunciones del operador linealizado de colisión, observando interesantes fenómenos transitorios de sobrepoblación y subpoblación a energías de orden térmico, como así también un nuevo efecto que denominamos de "expansión preferencial". Establecemos un criterio para deducir a partir de la condición inicial las características generales del acercamiento final al equilibrio. Finalmente indicamos como generalizar el desarrollo en autofunciones para poder tratar numéricamente condiciones iniciales des pobladas a altas energías.

Como una aplicación de la teoría desarrollada investigamos la validez de la suposición de linealidad en el modelo de cascadas de colisiones atómicas para el proceso de sputtering. Encontramos que varias de las discrepancias observadas experimentalmente respecto de dicho modelo son debidas a efectos no lineales no considerados anteriormente.

## ABSTRACT

We study the nonlinear Boltzmann equation by defining an integral transform of the energy distribution function for an isotropic and homogeneous gas. It provides a solution which may be interpreted as a linear superposition of equilibrium states with variable temperatures. We show that the temporal evolution features of the distribution function are determined by the singularities of this integral transform. We analyze the relaxation to equilibrium process for Maxwell and Very Hard Particle interaction models. We compare the solution of the Boltzmann equation with the solution of its linearized version, finding out many basic discrepancies and non linear effects. This gives us a hint to propose a new rational approximation method with a clear physical meaning. Finally we discuss the relaxation features of the BKW mode, finding a conclusive counter-example for the Krook and Wu conjecture.

Furthermore we solve the anisotropic Boltzmann equation for Maxwell models. The solution is given by an expansion in terms of the eigenfunctions of the corresponding linearized collision operator. We find transient overpopulation and underpopulation effects at thermal energies and a new 'preferential spreading' effect. We analyze the features of the final approach to equilibrium and its dependence on the initial condition. We show how to improve the convergence of the eigenfunction expansion for initially high energy underpopulated distribution functions.

As an application of these results we analyze the linear cascade model for sputtering, finding out that many important differences between the results of this model and experimental data are due to non-linear effects.

## INDICE

1 - INTRODUCCION.....	1
2 - CONCEPTOS BASICOS Y NOTACION.....	6
3 - TRANSFORMADA EN TEMPERATURA DE LA ECUACION DE BOLTZMANN.....	14
3.1 Transformada en temperatura.....	16
3.2 Singularidades de la transformada en temperatura.....	22
3.3 Modelo de partícula muy dura.....	27
3.4 Ecuación de Boltzmann linealizada.....	40
3.5 Modelos de Maxwell.....	51
3.6 Aproximante multipolares.....	58
4 - ECUACION DE BOLTZMANN ANISOTROPICA.....	66
4.1 Resolución de la ecuación de Boltzmann anisotrópica.....	68
4.2 Resolución numérica de la ecuación de Boltzmann anisotrópica.....	77
4.3 Soluciones anisotrópicas simples.....	83
4.4 Serie modificada de Laguerre.....	93
5 - CASCADAS NO LINEALES DE COLISIONES ATOMICAS EN LOS FENOMENOS DE SPUTTERING.....	104
6 - CONCLUSIONES.....	118
7 - REFERENCIAS.....	124

## 1 - INTRODUCCION

---

La teoría cinética es comúnmente definida como la rama de la mecánica estadística que estudia la evolución temporal de la función densidad en el espacio de las fases asociado a un sistema dado. Ejemplos típicos de tales ecuaciones de evolución son la ecuación de Vlasov, la ecuación de transporte de neutrones y la ecuación de Boltzmann (Duderstand y Martin 1979). De esta última nos ocuparemos en el presente trabajo: Se trata de una ecuación integro-diferencial no lineal en derivadas parciales que describe la evolución temporal de un gas. El gas se considera lo suficientemente diluido como para que sólo sea necesario incluir colisiones binarias entre partículas. La ecuación de Boltzmann no sólo constituye la base de la teoría cinética de gases, sino que ha demostrado su utilidad en temas tales como el transporte de electrones en sólidos y plasmas, el transporte de neutrones en reactores nucleares o la transferencia radiativa en atmósferas planetarias o estelares. La principal dificultad que presenta la ecuación de Boltzmann radica en su complicada estructura matemática, que ha impedido hasta el presente su resolución exacta para interacciones moleculares y condiciones iniciales arbitrarias.

El desarrollo perturbativo de la función distribución constituye uno de los métodos más eficaces de resolución aproximada, al permitir una descripción hidrodinámica del sistema (Cercignani 1983). Debemos aclarar que existe una diferencia bastante clara entre los niveles cinético e hidrodinámico de descripción. Para la ecuación de Boltzmann el estado de un sistema está definido por su función

distribución. En la dinámica de fluidos, en cambio, el estado queda completamente determinado por sólo los primeros cinco momentos de la función distribución, o variables hidrodinámicas: la densidad  $\eta(\vec{r},t)$ , las tres componentes de la velocidad media  $\vec{v}(\vec{r},t)$  y la temperatura local  $T(\vec{r},t)$ . Esta clase de soluciones de la ecuación de Boltzmann asociadas biunivocamente con estados hidrodinámicos se denomina clase de Hilbert o conjunto de soluciones normales. El pasaje del nivel cinético al hidrodinámico está íntimamente relacionado con uno de los métodos perturbativos más conocidos para resolver la ecuación de Boltzmann: el método de Chapman - Enskog - Hilbert (Hilbert 1912, Enskog 1917, Chapman 1917). Para poder desarrollar perturbativamente la solución necesitamos disponer de un parámetro que podamos considerar pequeño en ciertas situaciones. En una descripción hidrodinámica se supone que el camino libre medio es una cantidad macroscópicamente pequeña. En este sentido resulta razonable desarrollar formalmente la solución de la ecuación de Boltzmann en potencias del número de Knudsen. En general uno esperaría poder aproximar todas las soluciones de la ecuación de Boltzmann por un desarrollo de este tipo. Lo sorprendente es que, en virtud del teorema de unicidad de Hilbert (1912), aquellas soluciones que sean desarrollables en la forma propuesta estarán unívocamente determinadas por su estado hidrodinámico. En otras palabras el desarrollo formal de Hilbert se refiere a las soluciones normales de la ecuación de Boltzmann. Motivado por dicho teorema de unicidad el método de Chapman - Enskog supone desde un principio que la función distribución depende de la posición y del tiempo sólo a través de sus variables hidrodinámicas. Esta suposición permite obtener un sistema de ecuaciones para  $n$ ,  $\vec{v}$  y  $T$  a diferentes órdenes del número de Knudsen. Al orden cero el método de Chapman - Enskog da origen a la ecuación de Euler para un medio no viscoso. Al primer orden se obtiene la ecuación de Navier - Stokes. En este punto se podría suponer que las ecuaciones obtenidas a órdenes superiores, denominadas ecuaciones de Burnett,

deberían dar un refinamiento progresivo de las ecuaciones hidrodinámicas. Este es aún un tema de controversias pues, además de una gran complejidad matemática (o quizás debido a ella), las ecuaciones de Burnett no han permitido obtener hasta ahora ninguna descripción aceptable de los apartamientos respecto de la ecuación de Navier - Stokes (Cercignani 1975). Más aún, algunos estudios recientes (Bobylev 1982) parecen indicar que la aproximación de Burnett, no sólo no mejora los resultados de la ecuación de Navier - Stokes, sino que los empeora de manera catastrófica, introduciendo inestabilidades en la solución.

Otro método de resolución aproximada es la denominada ecuación linealizada, que se obtiene despreciando términos cuadráticos en la desviación respecto del equilibrio en la ecuación de Boltzmann no lineal. Usualmente esta ecuación linealizada permite obtener una buena aproximación para la evolución temporal de la función distribución. Sin embargo, si en el instante inicial la separación respecto del estado de equilibrio es importante, puede ocurrir que la solución linealizada no describa adecuadamente el proceso en estudio. En tal caso debe atacarse el problema de Cauchy planteado por la ecuación de Boltzmann no lineal general. La principal dificultad que se presenta al intentar resolver dicho problema es la estructura matemática sumamente compleja del término de colisión, cuya forma detallada depende de la naturaleza precisa de las fuerzas intermoleculares. La solución exacta de la ecuación de Boltzmann para fuerzas intermoleculares generales y condiciones iniciales arbitrarias no se conoce. Es por ello de gran importancia estudiar modelos simplificados para los cuales sea posible obtener soluciones particulares, o preferentemente la solución general para condiciones iniciales arbitrarias. Al formular tales modelos se buscan secciones eficaces de colisión que tengan una dependencia simple con las energías de las partículas y el ángulo de dispersión. El ejemplo más conocido es el modelo de moléculas de Maxwell

(Chapman y Cowling 1958). Recientemente Bobylev (1976b) e independientemente Krook y Wu (1976, 1977a) obtuvieron una solución exacta particular de la ecuación de Boltzmann para moléculas de Maxwell en el caso espacialmente homogéneo e isotrópico en impulso. Esta solución particular, llamada modo BKW, ha renovado el interés en la búsqueda de soluciones exactas de la ecuación de Boltzmann (Ernst 1981).

Una gran cantidad de fenómenos físicos, como por ejemplo la penetración de partículas en la materia, presentan características de anisotropía en el impulso e inhomogeneidad espacial. Sin embargo el tratamiento de la ecuación de Boltzmann no lineal en dichas condiciones ha sido relegado debido a su dificultad. Salvo los primeros trabajos de Grad (1949) y Nikol'skii (1964) poco se había hecho para resolverlo. Recién en los últimos seis años este problema ha experimentado un nuevo impulso (Caflish 1980, Truesdell y Muncaster 1980, Vedenyapin 1981). Este interés fue motivado también por consideraciones de orden práctico, especialmente en conexión con la fusión termonuclear controlada (Krook y Wu 1976): Inmediatamente después de haber sido calentado el plasma, su función distribución es no-maxwelliana y la zona de altas energías está muy despoblada. Dado que las reacciones nucleares ocurren básicamente por interacciones de alta energía, el proceso de establecimiento de la distribución maxwelliana en dicha zona es un problema de crucial importancia. Tal como veremos dicho proceso de relajación es básicamente un fenómeno no lineal. Estos efectos no lineales ocurren también en ciertas reacciones químicas (Brey et al. 1984a), especialmente en reacciones rápidas que involucran altas energías de activación; y han sido sugeridos como una explicación para las discrepancias entre los flujos observados y predichos de neutrinos solares (Bahcall y Davis 1976, Clayton et al. 1975).

En este trabajo atacamos el problema de la resolución exacta de la ecuación de Boltzmann no lineal. En el

siguiente capítulo establecemos la notación e introducimos los conceptos básicos. En la literatura reciente se han estudiado transformaciones integrales que permiten obtener versiones más simples de la ecuación de Boltzmann. Al respecto definimos en el capítulo III una transformada integral para el caso espacialmente homogéneo e isotrópico en impulso. Mostramos que las singularidades de dicha transformada determinan completamente la evolución temporal de la función distribución. El caso anisotrópico es resuelto en el capítulo IV para modelos de interacción de Maxwell en la forma de un desarrollo en autofunciones del operador linealizado de colisión. Estos resultados son aplicados en el capítulo V al fenómeno de sputtering por bombardeo iónico, desarrollando un modelo de cascadas no lineales. Este modelo nos permite explicar varias discrepancias observadas experimentalmente respecto de las predicciones de teorías lineales anteriores. Finalmente concluimos con una discusión de los resultados obtenidos.

## 2 - CONCEPTOS BASICOS Y NOTACION

---

En este trabajo consideramos un gas clásico de partículas sin grados de libertad internos. No estamos interesados en el movimiento detallado de cada partícula, sino en la función de distribución  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ , función de la posición  $\vec{r}$ , el impulso lineal  $\vec{p}$  y el tiempo  $t$ ; definida de forma tal que  $f(\vec{r}, \vec{p}, t) \cdot d\vec{r} \cdot d\vec{p}$  represente el número de partículas cuyos puntos representativos se encuentran situados al tiempo  $t$  en un elemento de volumen  $d\vec{r} \cdot d\vec{p}$  alrededor del punto  $(\vec{r}, \vec{p})$  en el espacio de las fases.

El propósito de la teoría cinética de gases es encontrar la función de distribución  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  para una dada forma de interacción entre partículas. En tal sentido nuestro primer objetivo es derivar una ecuación de evolución para  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ : La ecuación de Boltzmann. Para ello suponemos que no hay una agregación fuerte y permanente entre las partículas del sistema, v.g. el gas está lo suficientemente diluido como para que sea posible considerar sólo colisiones binarias entre partículas. Analicemos el balance de partículas en un elemento de volumen que evoluciona dinámicamente en el espacio de las fases. De hecho el número de partículas en dicho volumen puede variar en virtud de las colisiones entre ellas: Partículas que inicialmente tenían posición e impulso fuera del elemento de volumen considerado, pueden ser dispersadas hacia "dentro" de él; y recíprocamente, partículas que inicialmente estaban en ese volumen, pueden salir de él como resultado de una colisión. Traduciendo esta idea al lenguaje matemático tenemos (Ernst 1981) :

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = & \int [w(\vec{p}, \vec{p}_1 | \vec{p}', \vec{p}'_1) f(\vec{r}, \vec{p}', t) f(\vec{r}, \vec{p}'_1, t) - \\ & - w(\vec{p}', \vec{p}'_1 | \vec{p}, \vec{p}_1) f(\vec{r}, \vec{p}, t) f(\vec{r}, \vec{p}_1, t) ] d\vec{p}_1 d\vec{p}' d\vec{p}'_1 \end{aligned} \quad (2.1)$$

donde, en virtud de estar realizando una descripción Euleriana del sistema, hemos introducido el concepto de derivada material:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \nabla_{\vec{r}} + \vec{F}_e \cdot \nabla_{\vec{p}} \quad (2.2)$$

El primer término se denomina variación local y el segundo, variación convectiva. El tercero es la variación impulsiva que incluye la fuerza externa neta que actúa sobre el sistema.

Con  $w(\vec{p}', \vec{p}'_1 | \vec{p}, \vec{p}_1)$  hemos representado la probabilidad de transición por unidad de tiempo para que dos partículas con impulsos iniciales  $\vec{p}$  y  $\vec{p}_1$  sean dispersadas hacia impulsos finales  $\vec{p}'$  y  $\vec{p}'_1$ . Esta probabilidad es proporcional a la sección eficaz diferencial. Explícitamente:

$$\begin{aligned} w(\vec{p}', \vec{p}'_1 | \vec{p}, \vec{p}_1) = & \frac{g}{m} \sigma(g, \hat{g}, \hat{n}) \delta(|\vec{p} + \vec{p}_1 - \vec{p}' - \vec{p}'_1|) \\ & \delta(|\vec{p} - \vec{p}_1| - |\vec{p}' - \vec{p}'_1|) \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde  $\sigma(g, \hat{g}, \hat{n})$  depende sólo del ángulo de dispersión y del módulo del impulso relativo inicial  $\vec{g} = \vec{p} - \vec{p}_1$ .  $\hat{n}$  es un vector en la dirección del momento relativo final  $\vec{g}' = \vec{p}' - \vec{p}'_1$ . Ambas funciones delta sólo permiten transiciones en las cuales se satisfagan las leyes microscópicas de conservación del impulso y la energía. Reemplazando en la expresión (2.1) obtenemos la ecuación de Boltzmann no lineal para la función distribución de un gas diluido de partículas sin grados de libertad internos (Cercignani 1975) :

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \nabla_{\vec{r}} + \vec{F}_e \cdot \nabla_{\vec{p}} \right] f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \\ = \int \frac{g}{m} \sigma(g, \hat{g}, \hat{n}) [f(\vec{r}, \vec{p}', t) f(\vec{r}, \vec{p}'_1, t) - f(\vec{r}, \vec{p}, t) f(\vec{r}, \vec{p}_1, t)] d\hat{n} d\vec{p}_1 \end{aligned} \quad (2.4)$$

En vista de las posibles aplicaciones a sistemas de una, dos y tres dimensiones es conveniente considerar el impulso  $\vec{p}$  y la posición  $\vec{r}$  como vectores de dimensión arbitraria  $2\nu$ .

En lo que sigue nos restringiremos a considerar el caso de un gas espacialmente homogéneo  $f(\vec{r}, \vec{p}, t) = f(\vec{p}, t)$ , y en ausencia de fuerzas externas. La ecuación de Boltzmann se escribe:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{p}, t) = B[f, f] \quad (2.5)$$

con  $B[f, f]$  el operador bilineal de colisión

$$B[f, f] = \int \frac{g}{m} \sigma(g, \hat{g} \cdot \hat{n}) [f(\vec{p}; t) f(\vec{p}_1; t) - f(\vec{p}, t) f(\vec{p}_1, t)] d\hat{n} d\vec{p}_1 \quad (2.6)$$

Esta ecuación tiene ciertas propiedades fundamentales. En primer lugar debemos mencionar las leyes macroscópicas de conservación del número de partículas, el impulso y la energía

$$\int f(\vec{p}, t) d\vec{p} = \eta \quad (2.7a)$$

$$\int f(\vec{p}, t) \vec{p} d\vec{p} = 0 \quad (2.7b)$$

$$\int f(\vec{p}, t) \frac{p^2}{2m} d\vec{p} = \eta \nu kT \quad (2.7c)$$

donde  $\eta$  es la densidad de partículas en el gas y  $k$  la constante de Boltzmann. La temperatura  $T$  puede considerarse como una medida de la energía media por grado de libertad:  $\langle p^2 / 2m \rangle = \nu kT$ . La segunda ley de conservación nos indica que observamos la evolución del gas desde su sistema centro de masa,  $\langle \vec{p} \rangle = 0$ .

El teorema H de Boltzmann establece que el funcional

$$H(t) = \int f(\vec{p}, t) \ln \frac{f(\vec{p}, t)}{f_0(p)} d\vec{p} \quad (2.8)$$

con  $f_0(p)$ , la función distribución de Maxwell-Boltzmann,

$$f_0(p) = \frac{n}{(2\pi mkT)^{\nu}} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} \quad (2.9)$$

es una función no creciente en el tiempo (Huang 1965),

$$\frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (2.10)$$

donde la igualdad se satisface sólo para  $f(\vec{p}, t) = f_0(p)$ . Luego bajo condiciones iniciales arbitrarias

$$f(\vec{p}, t) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} f_0(p) \quad (2.11)$$

Debemos mencionar también el teorema de positividad que establece que si  $f(\vec{p}, 0) \geq 0$  en el instante inicial, entonces  $f(\vec{p}, t) \geq 0$  en todo instante posterior (Simons 1978).

Para terminar esta sección debemos considerar la existencia y unicidad de soluciones de la ecuación de Boltzmann. El procedimiento usual para probar teoremas de existencia para ecuaciones no lineales consiste en convertir la ecuación en una ecuación integral, diseñar un esquema iterativo y demostrar su convergencia. La existencia de un límite único para el esquema iterativo garantiza que existe una solución de la ecuación integral. Tal solución se denomina comúnmente "solución débil" de la ecuación original. Si puede demostrarse que la "solución débil" es diferenciable respecto de  $t$ , se sigue que es también una "solución fuerte"; es decir, una solución de la ecuación original. Es necesario aclarar en este punto que la existencia de soluciones de la ecuación de Boltzmann no ha sido demostrada en general (Zweifel 1984). En el caso espacialmente inhomogéneo se han establecido únicamente los así llamados teoremas de existencia "local" en el espacio de funciones esencialmente acotadas  $L^\infty(\mathbb{R}^{4\nu})$  (Grad 1958, 1965, Morgenstern 1955, Pao 1967, Ukai 1974, Palczewski 1981, 1982, Shizuta 1983, Elmroth 1983, Illner y Shinbrot 1984). Con existencia local

nos referimos a verificaciones para muy cortos intervalos de tiempo. Los intentos para desplazar esta demostración a lo largo de intervalos de tiempos consecutivos, usando la solución del primer intervalo como dato para el segundo y así sucesivamente, no tienen éxito en tanto que no es posible asegurar que la solución permanezca adecuadamente acotada (Zweifel 1984).

En el caso espacialmente homogéneo y en ausencia de fuerzas externas los intentos de encontrar teoremas de existencia fuertes han sido mucho más afortunados (Carleman 1957, Wild 1951): Analicemos la existencia de soluciones en el espacio de Banach  $L^1(\mathbb{R}^{2\nu})$  al problema de valores iniciales planteado por la Ecuación (2.5). Para ello es conveniente descomponer el operador bilineal de colisión (2.6) en dos partes:

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} + \mu(f) \right] f(\vec{p}, t) = G(f, f) \quad (2.12)$$

donde

$$\mu(f) = \int \frac{g}{m} \sigma(g, \hat{g} \cdot \hat{n}) f(\vec{p}_i, t) d\hat{n} d\vec{p}_i \quad (2.13)$$

$$G(f, f) = \int \frac{g}{m} \sigma(g, \hat{g} \cdot \hat{n}) f(\vec{p}'; t) f(\vec{p}_i; t) d\hat{n} d\vec{p}_i \quad (2.14)$$

De hecho Arkeryd (1972, 1981) ha demostrado la existencia y unicidad de soluciones del problema de Cauchy planteado cuando ambos operadores  $\mu$  y  $G$  son acotados. La demostración es muy larga y técnica. Aquí desarrollaremos un resultado más débil que nos será de mucha utilidad más adelante. Supondremos que la probabilidad de colisión depende únicamente del ángulo de dispersión  $\hat{g} \cdot \hat{n}$  y no del impulso relativo entre partículas  $g$  ( modelo de interacción de Maxwell ):  $(g/m) \cdot \sigma(g, \hat{g} \cdot \hat{n}) = \alpha(\hat{g} \cdot \hat{n})$ . La probabilidad total de colisión (2.13) resulta ser una constante que supondremos finita  $\mu < \infty$ . Bajo estas condiciones el operador  $G[f, f]$  es una forma bilineal acotada

$$\|G\|_1 = \int G(f, f) d\vec{p} = \eta \mu < \infty \quad (2.15)$$

Siguiendo el procedimiento usual transformamos la ecuación de Boltzmann en la denominada ecuación integral de Wild

$$f(\vec{p}, t) = f(\vec{p}, 0) e^{-\mu t} + \int_0^t G(\vec{p}, \mathcal{T}) e^{-\mu(t-\mathcal{T})} d\mathcal{T} \quad (2.16)$$

y definimos el esquema iterativo

$$\begin{aligned} f^{(0)} &= 0 \\ f^{(n+1)} &= f(\vec{p}, 0) e^{-\mu t} + \int_0^t G^{(n)}(\vec{p}, \mathcal{T}) e^{-\mu(t-\mathcal{T})} d\mathcal{T} \end{aligned} \quad (2.17)$$

con

$$G^{(n)}(\vec{p}, t) = \int \alpha(\hat{g}, \hat{h}) f^{(n)}(\vec{p}; t) f^{(n)}(\vec{p}_1; t) d\hat{h} d\vec{p}_1 \quad (2.18)$$

Este esquema iterativo converge a una función  $f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^{2\nu})$  que es entonces una solución débil de la Eq. (2.16). En efecto, por inducción se demuestra fácilmente que la iteración es monótona y que todos los órdenes de la densidad están uniformemente acotados

$$f^{(n+1)} > f^{(n)} \quad (2.19)$$

$$\eta^{(n)}(t) = \int f^{(n)}(\vec{p}, t) d\vec{p} < \eta \quad (2.20)$$

Debido al teorema de convergencia monótona de Lebesgue (Reed y Simon 1972) concluimos que  $f^{(n)}$  converge a una función  $f(\vec{p}, t)$ . De hecho es fácil demostrar que  $f(\vec{p}, t)$  es diferenciable en  $t$ , con lo cual  $f(\vec{p}, t)$  es una solución fuerte en el espacio de Banach de la ecuación original.

En el siguiente capítulo hemos de simplificar aún más la teoría, restringiéndola al caso de funciones distribución isotrópicas en impulso  $f(\vec{p}, t) = f(p, t)$  con  $p = |\vec{p}|$ . En este

contexto introducimos la representación de energía de la función distribución, a la cual haremos referencia muy a menudo en lo que sigue. Definimos dicha función distribución por (Ernst 1981):

$$F(\epsilon, t) = \int \delta\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m}\right) f(\vec{p}, t) d\vec{p} \quad (2.21)$$

o sea

$$F(\epsilon, t) = \Omega_\nu m (2m\epsilon)^{\nu-1} \hat{f}(\sqrt{2m\epsilon}, t) \quad (2.22)$$

donde hemos anotado con  $\Omega_\nu$  el ángulo sólido total en el espacio de  $2\nu$  dimensiones:  $\Omega_\nu = 2\pi^\nu / \Gamma(\nu)$ . Las leyes de conservación son ahora:

$$\int_0^\infty F(\epsilon, t) d\epsilon = \eta \quad (2.23a)$$

$$\int_0^\infty F(\epsilon, t) \epsilon d\epsilon = \nu \eta kT \quad (2.23b)$$

En el equilibrio la función distribución es la distribución Gamma:

$$F_0(\epsilon) = \frac{\eta}{\Gamma(\nu)kT} \left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^{\nu-1} e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \quad (2.24)$$

La ecuación de Boltzmann en representación de energía se anota en términos del núcleo o kernel de transición:

$$K(\epsilon', \epsilon, E) = \int \frac{d\vec{p} d\vec{p}_1 d\hat{n} g \sigma(g, \hat{g}, \hat{n})}{m^3 \Omega_\nu^2 [4m^2 \epsilon(E-\epsilon)]^{\nu-1}} \cdot \delta\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m}\right) \delta\left(\epsilon' - \frac{p_1^2}{2m}\right) \delta\left(E - \frac{p^2}{2m} - \frac{p_1^2}{2m}\right) \quad (2.25)$$

que caracteriza la probabilidad de transición en la colisión  $(\epsilon, E-\epsilon) \rightarrow (\epsilon', E-\epsilon')$ , donde  $\epsilon$  y  $E-\epsilon$  representan las energías de las partículas entrantes y  $\epsilon'$  y  $E-\epsilon'$  las de las partículas salientes. En la colisión se conserva la energía total  $E$  por lo cual los kernels son no nulos sólo en la región  $\epsilon, \epsilon' \leq E$ . Tenemos finalmente:

$$\frac{\partial}{\partial t} F(\epsilon, t) = \int_{\epsilon}^{\infty} dE \int_0^E d\epsilon' [K(\epsilon, \epsilon'; E) F(\epsilon'; t) F(E - \epsilon'; t) - K(\epsilon', \epsilon; E) F(\epsilon, t) F(E - \epsilon, t)] \quad (2.26)$$

El kernel de transición presenta dos simetrías fundamentales: la simetría de interacción de partículas idénticas y la propiedad de balance detallado (Ernst 1981):

$$K(\epsilon', \epsilon; E) = K(E - \epsilon', E - \epsilon; E) \quad (2.27)$$

$$K(\epsilon', \epsilon; E) F_0(\epsilon) F_0(E - \epsilon) = K(\epsilon, \epsilon'; E) F_0(\epsilon') F_0(E - \epsilon') \quad (2.28)$$

Estas simetrías son suficientes para garantizar la validez del teorema H y con él, el acercamiento al equilibrio. La ecuación cinética de tipo Boltzmann (2.26) puede aplicarse a una gran variedad de sistemas físicos y a diferentes modelos de interacción, con el único requisito de que el correspondiente kernel de transición satisfaga ambas propiedades de simetría. En este sentido la constante positiva  $\nu$  caracteriza al sistema bajo consideración: Puede referirse a un gas de partículas con  $2\nu = 1, 2, 3, \dots$  grados de libertad translacionales; o a un sistema de partículas interactuantes con  $\nu = 1, 2, 3, \dots$  grados de libertad internos (Ernst y Hendriks 1981).

3 - TRANSFORMADA EN TEMPERATURA DE LA ECUACION DE BOLTZMANN

---

La ecuación de Boltzmann es una ecuación integro - diferencial con una estructura matemática muy complicada. Con el objeto de simplificar dicha estructura se han estudiado una gran variedad de modelos. El modelo real más simple es el que se obtiene al considerar una distribución espacialmente homogénea e isotrópica en impulso. En los últimos años se ha logrado un progreso muy significativo en el estudio de las soluciones exactas de la ecuación de Boltzmann homogénea e isotrópica. En la literatura más reciente (Ernst 1984) se han introducido transformaciones integrales que permiten obtener versiones más simples de la ecuación de Boltzmann, especialmente en el caso de modelos de interacción tipo Maxwell. En 1976 Bobylev, utilizando una transformación de Fourier respecto del impulso  $\vec{p}$ , encontró una solución exacta no trivial (de hecho la única conocida hasta el presente) llamada modo BKW (Bobylev 1976a, b). Sin embargo para el caso de modelos no maxwellianos, este método de transformación no ofrece ninguna ventaja puesto que el término no lineal de colisión no resulta ser separable en ángulo y energía (Hauge y Praestgaard 1981). Otra técnica de transformación para modelos de Maxwell es la introducida por Alexanian (1979). Aún cuando se logra una excelente descripción acerca de las características del proceso de relajación al equilibrio, esta transformada integral presenta una gran complejidad matemática, debido a que la solución se expresa como una combinación lineal de funciones delta y sus derivadas. Una tercera transformación integral es la transformación de Laplace en energía que, aplicada por Krook y Wu (1976, 1977a) a modelos de Maxwell

tridimensionales con dispersión isotrópica, les permitió obtener el modo BKW de manera simultánea con Bobylev. Más recientemente esta transformación integral fue generalizada a una clase más amplia de modelos de Maxwell (Ernst 1979, Cornille y Gervois 1980a). A pesar de no ser aplicable a todos los modelos de Maxwell, la transformada de Laplace no está estrictamente restringida a ellos. Tal como veremos permite la resolución general del problema de Cauchy para un modelo bidimensional de partícula muy dura (Hendriks y Ernst 1983). Sin embargo es necesario un enfoque alternativo que permita generalizar el uso de este método para otros modelos de interacción. En el presente capítulo definimos una transformación integral que hace posible tal generalización.

En la siguiente sección introducimos nuestro método que ha de dar origen a una función distribución transformada en temperatura  $G(s,t)$  con una estructura analítica sumamente simple. En la sección 3.2 demostramos que las características de la evolución temporal de  $F(\epsilon,t)$  están dadas principalmente por el comportamiento de las singularidades de  $G(s,t)$ . Utilizando esta técnica analizamos el proceso de relajación al equilibrio para diferentes modelos de interacción: el modelo de partícula muy dura en 3.3 y los modelos de Maxwell en 3.5. En la sección 3.4 comparamos la solución de la ecuación de Boltzmann con la solución de la correspondiente versión linealizada, encontrando varias discrepancias básicas e interesantes fenómenos no lineales. Por último en la sección 3.6 mostramos que la transformada en temperatura conduce a la definición de un aproximante tipo Padé con un claro significado físico.

### 3.1 TRANSFORMADA EN TEMPERATURA

Introducimos la transformada en temperatura  $G(s,t)$  de la función distribución en representación de energía  $F(\epsilon,t)$  en base a la siguiente expresión

$$F(\epsilon,t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} F_s(\epsilon) G(s,t) ds \quad (3.1)$$

donde  $\Gamma$  es una curva cerrada simple que rodea a las singularidades de  $G(s,t)$  en sentido positivo, y  $F_s(\epsilon)$  es la distribución Gamma de equilibrio (2.24), pero de temperatura modificada  $(1-s)T$ ,

$$F_s(\epsilon) = \frac{\eta}{\Gamma(\nu) kT(1-s)} \left( \frac{\epsilon}{kT(1-s)} \right)^{\nu-1} e^{-\frac{\epsilon}{kT(1-s)}} \quad (3.2)$$

Las condiciones de conservación del número de partículas y la energía, como así también la distribución de equilibrio para  $G(s,t)$ , se obtienen inmediatamente por simple observación de (3.1), resultando

$$\oint_{\Gamma} G(s,t) ds = 2\pi i \quad (3.3a)$$

$$\oint_{\Gamma} G(s,t) s ds = 0 \quad (3.3b)$$

$$G_0(s) = \frac{1}{s} \quad (3.4)$$

En la bibliografía se estudia un cierto número de transformaciones integrales de la función distribución, como por ejemplo, la transformada de Fourier introducida por Bobylev (1976a):

$$\phi(\vec{r}, \vec{k}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{p}, t) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{k}} d\vec{p} \quad (3.5a)$$

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{2\nu}} \int \phi(\vec{r}, \vec{k}, t) e^{i\vec{p} \cdot \vec{k}} d\vec{k} \quad (3.5b)$$

Cuando la función distribución  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  es espacialmente homogénea e isotrópica en impulso conviene expresar su transformada de Fourier en términos de la función distribución en representación de energía  $F(\epsilon, t)$ . Si anotamos  $\phi(k, t) = \eta \Psi(\frac{1}{2}mkTk^2, t)$  resulta

$$\Psi(z, t) = \frac{1}{\eta} \int_0^{\infty} {}_0F_1(\nu, -\frac{z\epsilon}{kT}) F(\epsilon, t) d\epsilon \quad (3.6a)$$

$$F(\epsilon, t) = \frac{\eta/kT}{\Gamma^2(\nu)} \int_0^{\infty} \left(\frac{z\epsilon}{kT}\right)^{\nu-1} {}_0F_1(\nu, -\frac{z\epsilon}{kT}) \Psi(z, t) dz \quad (3.6b)$$

Las condiciones de contorno para  $z$  pequeño impuestas por las leyes de conservación del número de partículas y la energía, resultan ser:

$$\Psi(0, t) = 1 \quad (3.7a)$$

$$\left. \frac{d\Psi}{dz} \right|_0 = -1 \quad (3.7b)$$

y el valor en el equilibrio es  $\Psi_0(z)$  con

$$\Psi_5(z) = e^{-(1-s)z} \quad (3.8)$$

En la teoría cinética (Ernst 1981) se requiere comúnmente que la función distribución pertenezca al espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(0, \infty)$ , de funciones de cuadrado sumable en el intervalo  $0 \leq \epsilon < \infty$ , con norma

$$N(t) = \int_0^{\infty} |F(\epsilon, t)|^2 \frac{d\epsilon}{F_0(\epsilon)} < \infty \quad (3.9)$$

Esta es una condición suficiente para la existencia de la transformada de Fourier; y nos restringiremos a trabajar en este espacio de funciones, salvo que indiquemos explícitamente lo contrario. Debe destacarse, sin embargo, que no existe ninguna razón física para desechar otras soluciones que no pertenezcan a dicho espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(0, \infty)$  (Uhlenbeck y Ford 1963). La física sólo impone que se

conserven y sean finitas la densidad de partículas y la energía total.

Supondremos que la serie de Mc Laurin

$$\psi(z, t) = \psi_0(z) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n(t)}{n!} z^n \quad (3.10)$$

representa el apartamiento del equilibrio de la función característica  $\psi(z, t)$  para todo  $z$  y todo tiempo  $t > 0$ . En otras palabras supondremos que  $\psi(z, t)$  es una función entera; es decir, definida y analítica en todo el plano complejo. Más aún, pedimos que  $\psi(z, t)$  sea de tipo exponencial, o sea que exista un número  $\alpha$  tal que  $\max_{|z|=\rho} |\psi(z)| < \psi_\alpha(z)$  para todo  $\rho > 0$  suficientemente grande. Llamaremos parámetro de crecimiento  $\delta(t)$  al infimo de todos los posibles exponentes  $\alpha$  a un dado tiempo  $t$ . Si  $\psi(z, t)$  pertenece a este espacio  $\Omega_\delta$  de funciones enteras de tipo exponencial con parámetro de crecimiento  $\delta(t)$ , entonces la transformada de Laplace de la función  $\psi(z, t) / \psi_0(z)$  que anotamos

$$G(s, t) = \int_0^\infty \psi(z, t) / \psi_s(z) dz \quad (3.11)$$

es definida y analítica, al menos para  $\text{Re}(s) > \delta$ .

El teorema de Hardy (Henrici 1977) nos indica como calcular esta transformada integrando término a término el desarrollo en serie (3.10)

$$G(s, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n(t)}{s^{n+1}} \quad (3.12)$$

Para todo  $\sigma > 0$ , anotaremos con  $\omega_\sigma$  la clase de todas las funciones  $f(s)$  que se anulan en  $\infty$  y son analíticas fuera del círculo  $|s| = \sigma$  (y fuera de ningún círculo menor). Se demuestra al respecto que para cada  $\delta \geq 0$  la transformada de Laplace define una aplicación uno a uno del conjunto  $\Omega_\delta$  en el conjunto  $\omega_\delta$  (Henrici 1977). En otras palabras cada función característica  $\psi(z, t)$  de parámetro de crecimiento  $\delta(t)$

posee una transformada de Laplace que puede ser extendida a una función  $G(s,t)$  en  $\omega_\delta$ . Y viceversa: cada función  $G(s,t)$  en  $\omega_\delta$  es la continuación analítica de la transformada de Laplace de alguna función característica  $\psi(z,t)$  en  $\Omega_\delta$ .

En principio podríamos utilizar la fórmula de inversión usual para la transformada de Laplace; sin embargo, el teorema de Pincherle (Henrici 1977) nos provee de otra antitransformada que es más conveniente, en tanto que el camino de integración es de longitud finita y, en contraste con la fórmula usual de inversión, no dá el valor cero para  $z < 0$ . En efecto, sea  $\Gamma$  una curva cerrada simple que rodea al conjunto  $|s| \leq \delta$  en el sentido positivo

$$\psi(z,t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \psi_s(z) G(s,t) ds \quad (3.13)$$

Esta expresión puede verificarse fácilmente integrando término a término el desarrollo (3.12) y comparando con (3.10). Es fácil demostrar, aplicando la transformada (3.6) a la expresión anterior y comparando con (3.1), que  $G(s,t)$  es ni más ni menos que la transformada en temperatura definida al comienzo de esta sección. Finalmente de (3.11) y (3.6) obtenemos la fórmula de inversión para la transformada en temperatura (Erdély 1953):

$$G(s,t) = \frac{1}{\eta(s-1)} \int_0^{\infty} {}_1F_1\left(1; \nu; \frac{\epsilon}{kT(1-s)}\right) F(\epsilon,t) d\epsilon \quad (3.14)$$

Un caso particular de mucho interés es el caso bidimensional  $\nu = 1$ , en el cual la aplicación  $F(\epsilon,t) \rightarrow G(s,t)$  es ella misma una transformada de Laplace. En efecto, de la expresión anterior resulta:

$$G(s,t) = \frac{1}{\eta(s-1)} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\epsilon}{kT(1-s)}} F(\epsilon,t) d\epsilon \quad (3.15)$$

Es decir que

$$G(s,t) = \frac{1}{s-1} g\left(\frac{1}{s-1}, t\right) \quad (3.16)$$

con  $g(x,t)$  la transformada de Laplace de la función distribución en representación de energía

$$g(x,t) = \mathcal{L}F = \frac{1}{\eta} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\epsilon x}{kT}} F(\epsilon,t) d\epsilon \quad (3.17)$$

Debemos destacar también la relación con otra transformación integral, la transformada  $A(\theta,t)$  de Alexanian (1979), definida por:

$$F(\epsilon,t) = \int_{-\infty}^1 F_{\theta}(\epsilon) A(\theta,t) d\theta \quad (3.18)$$

con las siguientes leyes de conservación y condición asintótica:

$$\int_{-\infty}^1 A(\theta,t) d\theta = 1 \quad (3.19a)$$

$$\int_{-\infty}^1 A(\theta,t) \theta d\theta = 0 \quad (3.19b)$$

$$A(\theta,\infty) = \delta(\theta) \quad (3.20)$$

Así definida la transformada de Alexanian puede ser considerada formalmente como otra función de distribución en temperatura. Sin embargo, y a diferencia de la transformada en temperatura aquí introducida, la presencia de singularidades tipo delta hace de ella una herramienta matemática de muy difícil implementación. En cambio, la transformada en temperatura, relacionada con  $A(\theta,t)$  por la siguiente transformada integral

$$G(s,t) = \int_{-\infty}^1 \frac{A(\theta,t)}{s-\theta} d\theta \quad (3.21)$$

reemplaza las singularidades tipo delta de  $A(\theta,t)$  por polos en el plano complejo, haciendo posible la utilización de métodos matemáticos tales como el teorema de expansión de

Heaviside (Henrici 1977) o las técnicas de aproximantes racionales (Baker 1975).

### 3.2 SINGULARIDADES DE LA TRANSFORMADA EN TEMPERATURA

La expresión (3.1) indica claramente que las características de la evolución de la función distribución  $F(\epsilon, t)$  estarán dadas principalmente por el comportamiento de las singularidades de su función transformada en temperatura. En esta sección estudiaremos algunas características de estas singularidades.

Para comenzar recordemos un resultado conocido: Por la fórmula de Cauchy-Hadamard la serie de Laurent (3.12) es analítica fuera de un círculo  $|s| = \delta$  de radio mínimo, con  $\delta = \limsup_{n \rightarrow \infty} |c_n|^{1/n}$ . En la sección anterior hemos supuesto que el parámetro de crecimiento es finito; consecuentemente las únicas singularidades posibles son polos en el plano complejo. En efecto, un corte excedería el círculo  $|s| = \delta$  fuera del cual la función transformada en temperatura es analítica. Además es fácil verificar que un corte ramal daría origen a contribuciones de decaimiento de tipo potencial a altas energías en la función distribución  $F(\epsilon, t)$ ; y por ende ésta dejaría de pertenecer al espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(0, \infty)$  de funciones de cuadrado sumable.

El análisis de la sección anterior nos sugiere que la localización de las singularidades de la función transformada en temperatura debe estar relacionada con el comportamiento asintótico de la función característica (3.6a). En este sentido introducimos el concepto de función indicatriz  $\delta(\phi, t)$  de la función característica  $\psi(z, t)$ , como una medida de su crecimiento en direcciones particulares. Para  $\phi$  real definimos  $\delta(\phi, t)$  como el infimo de todos los números reales  $\alpha$  tales que en el instante  $t$  y para todo  $\rho > 0$  suficientemente grande satisfacen

$$|\psi(e^{i\phi} \epsilon, t) / \psi_0(e^{i\phi} \rho)| < e^{\alpha \rho} \quad (3.22)$$

Se tiene claramente que  $\delta(\phi) < \delta$ . En particular la teoría de la transformada de Laplace nos dice que  $G(s,t)$  es analítica para  $\text{Re}(s) > \delta(0,t)$ ; con lo cual las posibles singularidades de  $G(s,t)$  deben encontrarse en el interior de la zona indicada en la figura 1. Es importante destacar que  $G(s,t)$  no puede ser continuada analíticamente en ningún semiplano  $\text{Re}(s) > \alpha_0$ , con  $\alpha_0 < \delta(0)$ . En otras palabras  $G(s,t)$  debe tener un punto singular en el segmento  $\text{Re}(s) = \delta(0)$ ,  $|s| \leq \delta$ . La condición de que la función distribución pertenezca al espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(0,\infty)$  de funciones de cuadrado sumable restringe los posibles valores de la función generatriz en  $\phi = 0$  al intervalo  $|\delta(0)| < 1$ , tal como indicamos en la figura 1. En otra palabras no puede haber singularidades de la función distribución transformada en temperatura en el semiplano  $\text{Re}(s) > 1$ .

El mismo análisis puede realizarse para la función  $\psi(z,t) = \Psi(e^{i\phi}z,t)$ . Luego  $G(s,t)$  no será continuable analíticamente dentro de una zona  $C$ , que llamaremos envoltura convexa, contenida en el disco  $|s| < \delta$  (y por ende acotada) que es la intersección de todos los semiplanos cerrados que contienen "todas" las singularidades de  $G(s,t)$  al instante  $t$ . Puede demostrarse que la función generatriz  $\delta(\phi,t)$  está completamente determinada por la envoltura convexa (Henrici 1977). Además, siendo  $F(\epsilon,t)$  real, la función característica verifica  $\psi^*(z^*,t) = \psi(z,t)$ : Luego  $\delta(\phi,t)$  es par, y con ello la envoltura convexa resulta ser simétrica respecto del eje real. O sea que las singularidades de la función distribución en temperatura  $G(s,t)$  se encuentran, o bien sobre el eje real, o bien de a pares conjugados  $s_1 = s_2^*$ .

Tal como indicamos en un comienzo las características y evolución de la función distribución  $F(\epsilon,t)$  están dadas principalmente por el comportamiento de las singularidades de la función transformada en temperatura  $G(s,t)$  que, para el caso de  $N$  polos simples, puede escribirse en la forma:

$$G(s,t) = \frac{\alpha_1(t)}{s - \sigma_1(t)} + \frac{\alpha_2(t)}{s - \sigma_2(t)} + \dots + \frac{\alpha_N(t)}{s - \sigma_N(t)} \quad (3.23)$$

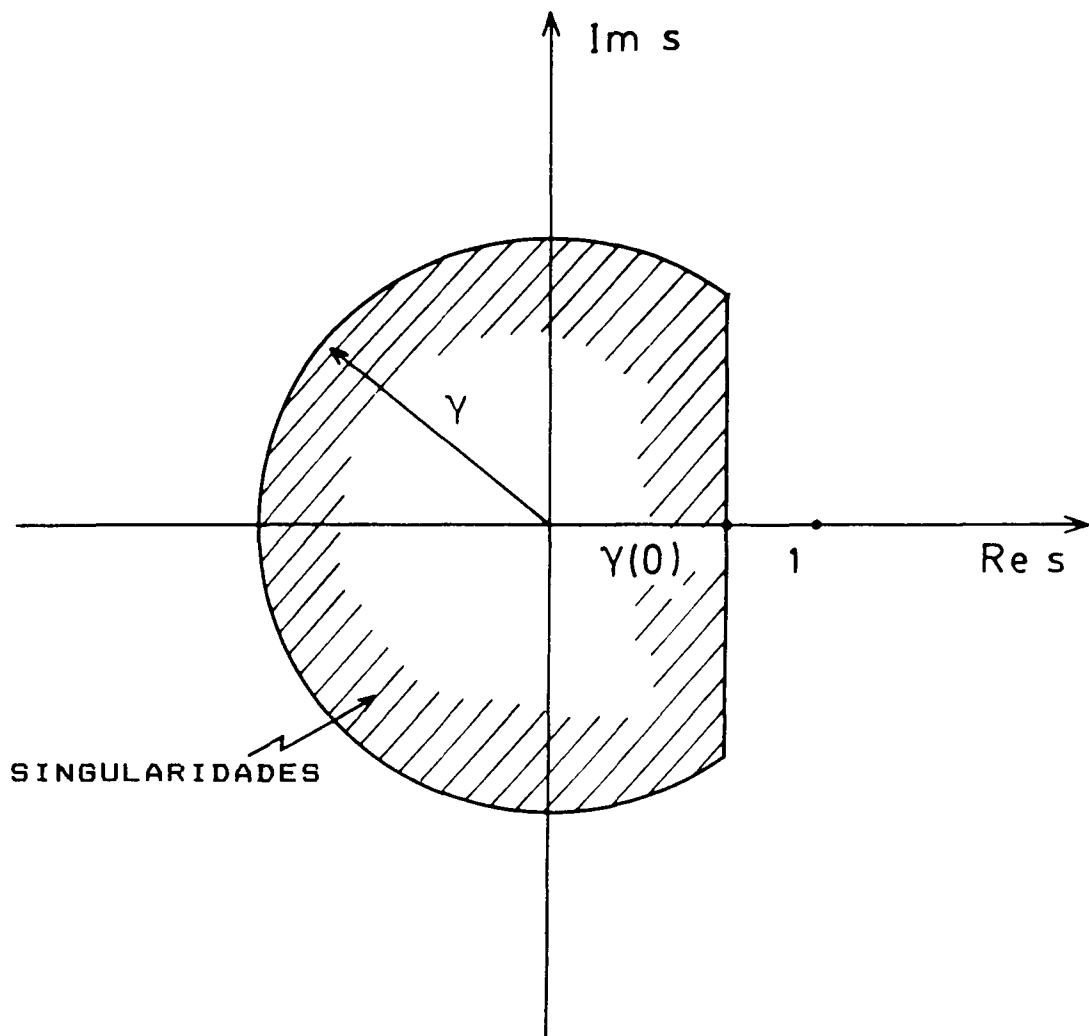


Figura 1. Localización de las singularidades de la función transformada en temperatura  $G(s, t)$ .

con las condiciones de conservación del número de partículas y la energía total:

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_N = 1 \quad (3.24a)$$

$$\alpha_1 \sigma_1 + \alpha_2 \sigma_2 + \dots + \alpha_N \sigma_N = 0 \quad (3.24b)$$

El teorema de expansión de Heaviside (Henrici 1977) nos permite expresar la función distribución en representación de energía  $F(\epsilon, t)$  en términos de las singularidades de su transformada en temperatura. En efecto, antitransformando según la ecuación (3.1) obtenemos:

$$F(\epsilon, t) = \alpha_1(t) F_{\sigma_1(t)}(\epsilon) + \dots + \alpha_N(t) F_{\sigma_N(t)}(\epsilon) \quad (3.25)$$

Este es un desarrollo de la función distribución original en términos de distribuciones Gamma de equilibrio, pero de temperaturas modificadas, dadas por la ubicación de los polos de la correspondiente transformada  $G(s, t)$ ; y cuyas densidades están fijadas por los residuos respectivos. En este sentido el estudio de las singularidades de la función transformada en temperatura nos permitirá obtener una mejor y más clara comprensión acerca de la evolución de la función distribución propiamente dicha. Hasta ahora en esta sección hemos estado analizando la ubicación y algunas características de las singularidades de la transformada en temperatura en el plano complejo. En lo que sigue veremos que es lo que podemos decir "a priori" acerca de la evolución de dichas singularidades.

En (3.1) la contribución dominante a la función distribución proviene de las singularidades de  $G(s, t)$  de menor parte real, más hacia la izquierda. Para valores del tiempo suficientemente grandes, todas las singularidades deberían dirigirse hacia la derecha, más específicamente hacia el punto característico  $s = 1$ , que denominaremos punto de

escape, volviéndose así menos importantes. Sin embargo en el equilibrio tenemos que  $G(s, \infty) = 1/s$ , por lo cual de entre los polos que caracterizan a la función distribución debe haber al menos uno que evolucione hacia el valor de equilibrio  $s = 0$ . A este polo lo llamaremos polo de Maxwell, puesto que dá origen asintóticamente a la distribución de Maxwell de equilibrio. La expresión (3.2) nos indica claramente que para altos valores de la energía el acercamiento al equilibrio será por arriba o por debajo dependiendo de que el polo de Maxwell tienda al punto de equilibrio por la izquierda o por la derecha respectivamente. En este sentido el estudio de la evolución temporal del polo de Maxwell dará mucha información acerca de como es alcanzado el equilibrio. Naturalmente no hay ninguna razón física por la cual el número de polos deba conservarse al transcurrir el tiempo. De hecho, y excepto para ciertos modelos de interacción particulares, ello no sucederá, dándose el caso de la aparición de nuevos polos. Debe tenerse en cuenta además la posible presencia de polos de orden superior, como así también de singularidades esenciales; sin embargo postergaremos el análisis correspondiente.

Por último debemos señalar un interesante fenómeno observado por Tjon (1979): El valor de la función distribución en la zona de altas energías puede tender al estado de equilibrio en forma monótona, o también presentar un efecto transitorio de sobrepoblación o subpoblación. Es claro que este efecto está relacionado con el pasaje del polo de Maxwell a través del eje imaginario antes de tender al punto de equilibrio. Más aún, el polo de Maxwell puede realizar varios cruces del eje imaginario, dando origen a un acercamiento oscilatorio al equilibrio.

### 3.3 MODELO DE PARTICULA MUY DURA

Consideraremos ahora un modelo de interacción para el cual es posible resolver en forma exacta la ecuación de Boltzmann no lineal con condiciones iniciales arbitrarias. Tales soluciones analíticas son de la mayor importancia puesto que nos permitirán dar una confirmación explícita a muchas de las afirmaciones hechas en las secciones anteriores, como así también mostrar nuevas propiedades de la función distribución transformada en temperatura.

Una desventaja de este modelo de interacción radica en que la probabilidad de colisión es proporcional a la energía relativa,  $g \cdot \sigma(g, \hat{g} \cdot \hat{n}) \sim g^2$ . Obviamente esta probabilidad no se corresponde con ninguna ley de interacción realista. De hecho la interacción real más "fuerte" posible corresponde a la colisión de partículas "duras", donde la probabilidad de colisión aumenta con la raíz cuadrada de la energía relativa. Luego la interacción aquí considerada es más fuerte que la interacción de partículas duras; y de allí su denominación ( VHP : Very Hard Particles ). En particular, y dado que el mecanismo de interacción es muy eficiente a altas energías, es de esperar que los tiempos característicos de relajación a altas energías sean muy pequeños.

La ecuación de Boltzmann en representación de energía para un modelo bidimensional  $\sigma(g, \hat{g} \cdot \hat{n}) \sim g \sqrt{1 - (\hat{g} \cdot \hat{n})^2}$  resulta (Hendriks y Ernst 1983):

$$\left[ \frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\epsilon}{kT} + 1 \right] F(\epsilon, t) = \frac{1}{\eta kT} \int_{\epsilon}^{\infty} dE \int_0^E d\epsilon' F(\epsilon'; t) F(E - \epsilon'; t) \quad (3.26)$$

donde  $\mu$  es la frecuencia de colisión dada por:

$$\mu = \eta kT \int \frac{1}{g} \sigma(g, \hat{g} \cdot \hat{n}) d\hat{n} \quad (3.27)$$

La estructura de convolución del término integral sugiere intentar una transformación de Laplace del tipo (3.17), relacionada con la transformada integral en temperatura por un simple cambio de variables, dado en (3.16). Aplicando esta transformación a (3.26) resulta una ecuación de primer orden no lineal en derivadas parciales;

$$\left[ \frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial t} + s + (s-1)^2 \frac{\partial}{\partial s} \right] G(s,t) = 1 - (s-1)^2 G^2(s,t) \quad (3.28)$$

que, con el cambio de variables  $(s,t) \rightarrow (s,r)$ , siendo

$$r(s,t) = \frac{s + \mu t (s-1)}{1 + \mu t (s-1)} \quad (3.29)$$

puede reducirse a una ecuación diferencial ordinaria tipo Ricatti exactamente resoluble

$$\left[ s + (s-1)^2 \frac{d}{ds} \right] G(s,t) = 1 - (s-1)^2 G^2(s,t) \quad (3.30)$$

Obtenemos finalmente:

$$G(s,t) = \frac{1}{s} \left[ 1 + \frac{e^{-\mu t}}{(s-1) [s \varphi(r) - (s-1) e^{-\mu t}]} \right] \quad (3.31)$$

donde la función arbitraria  $\varphi(r)$  queda determinada por la distribución inicial  $G(s,0)$  en la forma:

$$\varphi(r) = \frac{1}{r} \left[ (r-1) + \frac{1}{(r-1) [r G(r,0) - 1]} \right] \quad (3.32)$$

Esta expresión nos permitirá verificar para este modelo varias de las afirmaciones hechas en la sección anterior: Para tiempos suficientemente largos todas las singularidades se dirigen hacia el punto de escape  $s = 1$ , volviéndose cada vez menos importantes. Hay sin embargo un polo de primer orden, el polo de Maxwell  $s_1$ , correspondiente a una solución de la ecuación

$$s \varphi(r) - (s-1) e^{-\mu t} = 0 \quad (3.33)$$

que se mueve hacia el punto de equilibrio  $s = 0$  en la forma

$$s_1(t) = - \frac{e^{-\mu t}}{\varphi[1 + \frac{1}{\mu t}]} + \mathcal{O}(e^{-2\mu t}) \quad \mu t \rightarrow \infty \quad (3.34)$$

y cuyo residuo en  $G(s, t)$  puede anotarse

$$\alpha_1(t) = 1 - \frac{e^{-\mu t}}{\varphi[1 + \frac{1}{\mu t}]} + \mathcal{O}(e^{-2\mu t}) \quad ; \quad \mu t \rightarrow \infty \quad (3.35)$$

Luego el acercamiento final al equilibrio esta descrito por

$$F(\epsilon, t) = \left(1 - \frac{2e^{-\mu t}}{\varphi[1 + \frac{1}{\mu t}]} \right) F_0(\epsilon) \exp\left(\frac{e^{-\mu t}}{\varphi[1 + \frac{1}{\mu t}]} \frac{\epsilon}{kT}\right) + \mathcal{O}(e^{-(1 + \frac{\epsilon}{kT})\mu t}) \quad ; \quad \mu t \rightarrow \infty \quad (3.36)$$

Vemos que el acercamiento al equilibrio no es uniforme. De hecho para altas energías el tiempo de decaimiento es proporcional a  $T(\epsilon) = \frac{1}{\mu} \ln(\epsilon/kT)$ . Esta falta de uniformidad es una característica general de las soluciones de la ecuación de Boltzmann no lineal, a la que puede dársele una muy simple explicación física (Krook y WU 1977a): Para que una partícula pueda adquirir una energía alta, son precisas más y más colisiones favorables, lo cual naturalmente requiere más y más tiempo.

En la sección anterior indicamos que el acercamiento al equilibrio a altas energías estaba caracterizado por la evolución temporal del polo de Maxwell. La expresión anterior nos dice algo más para este modelo particular: Esto es que el acercamiento al equilibrio será por arriba o por debajo dependiendo del signo de la función  $\varphi(s)$  para  $s$  tendiendo al punto de escape por el semiplano de analiticidad. De hecho la función  $1/\varphi(s) \propto sG(s, 0) - 1$  puede llegar a tener muchos ceros cercanos al punto de escape, con lo cual es posible que se produzca un acercamiento oscilatorio al equilibrio (efecto Tjon).

De la expresión (3.15)  $\lim_{s \rightarrow 1^+} G(s, 0) = \frac{kT}{\eta} F(0, 0)$ , con lo

cual, reemplazando en (3.32) resulta

$$\varphi \left[ 1 + \frac{1}{\mu t} \right] \approx \frac{\eta \mu t}{kT F(0,0) - \eta} \quad ; \quad \mu t \rightarrow \infty \quad (3.37)$$

Luego, para un valor fijo de la energía y para grandes valores del tiempo, el acercamiento al equilibrio será por arriba o por debajo dependiendo del signo del apartamiento inicial del equilibrio a energía cero:  $(F(0,0) - \eta/kT)$  y de que la energía sea mayor o menor que dos unidades térmicas  $2kT$ . En efecto reemplazando (3.37) en (3.36) obtenemos

$$F(\epsilon, t) \approx F_0(\epsilon) \left[ 1 + \left( \frac{kT F(0,0) - \eta}{\eta} \right) \left( \frac{\epsilon - 2kT}{kT} \right) \frac{e^{-\mu t}}{\mu t} + \dots \right] \quad (3.38)$$

$; \mu t \rightarrow \infty$

Consideremos algunas distribuciones iniciales particulares con el objeto de investigar más en detalle este proceso de relajación al equilibrio. Como un primer ejemplo estudiaremos la superposición de dos maxwellianas:

$$F(\epsilon, 0) = \alpha_1 F_{\sigma_1}(\epsilon) + \alpha_2 F_{\sigma_2}(\epsilon) \quad (3.39)$$

que, como sabemos, es equivalente a la presencia de dos polos simples en la correspondiente función transformada en temperatura

$$G(s, 0) = \frac{\alpha_1}{s - \sigma_1} + \frac{\alpha_2}{s - \sigma_2} \quad (3.40)$$

con  $\sigma_1 < \sigma_2 < 1$ . Las leyes de conservación del número de partículas y la energía imponen que:

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1 \quad (3.41a)$$

$$\alpha_1 \sigma_1 + \alpha_2 \sigma_2 = 0 \quad (3.41b)$$

Por otra parte la condición de positividad requiere que  $\sigma_2 \geq 0$  y  $\sigma_1 + \sigma_2 \leq 1$ . Hay dos casos cualitativamente distin-

tos: Si  $\sigma_1 > 0$  la cola de altas energías está inicialmente despoblada. Cuando  $\sigma_1 < 0$ , en cambio, está sobrepoblada.

Un resultado notable es que en este modelo VHP la función distribución original mantiene su estructura, es decir que permanece como una suma de dos maxwellianas al transcurrir el tiempo: el polo de Maxwell  $\sigma_1$  tiende monótonamente hacia el punto de equilibrio  $s = 0$ , mientras que  $\sigma_2$  se dirige hacia el punto de escape; tal como mostramos en las figuras 2 a 5 para los caso  $\sigma_1(t=0) < 0$  y  $\sigma_1(t=0) > 0$ . Hemos representado también la evolución temporal de la desviación respecto del equilibrio  $R(\epsilon, t)$ , definida por:

$$F(\epsilon, t) = F_0(\epsilon) [1 + R(\epsilon, t)] \quad (3.42)$$

Es interesante advertir en las figuras 3 y 5 cómo el acercamiento al equilibrio depende del signo de  $R(0,0)$  y de que la energía sea mayor o menor que  $2kT$ . (confrontar con la ecuación (3.38) )

Una condición inicial mucho más interesante está dada por la superposición de tres distribuciones maxwellianas, equivalente a la presencia de tres polos simples en la correspondiente función transformada en temperatura. La presencia de tres polos nos permite elegir dos de ellos fuera del eje real sin por ello violar la positividad de la función distribución. Evidentemente la presencia de polos complejos se manifiesta en la forma de oscilaciones de la función distribución. Tal es el caso de:

$$F(\epsilon, 0) = \frac{\beta \eta}{kT} e^{-\frac{\partial \epsilon}{kT}} \left[ 1 - \cos \frac{b\epsilon}{kT} \right] \quad (3.43)$$

La conservación del número de partículas y la energía imponen que los parámetros  $a, b$  y  $\beta$  estén relacionados por:

$$b = a \sqrt{\frac{3-a}{a-1}} \quad (3.44a)$$

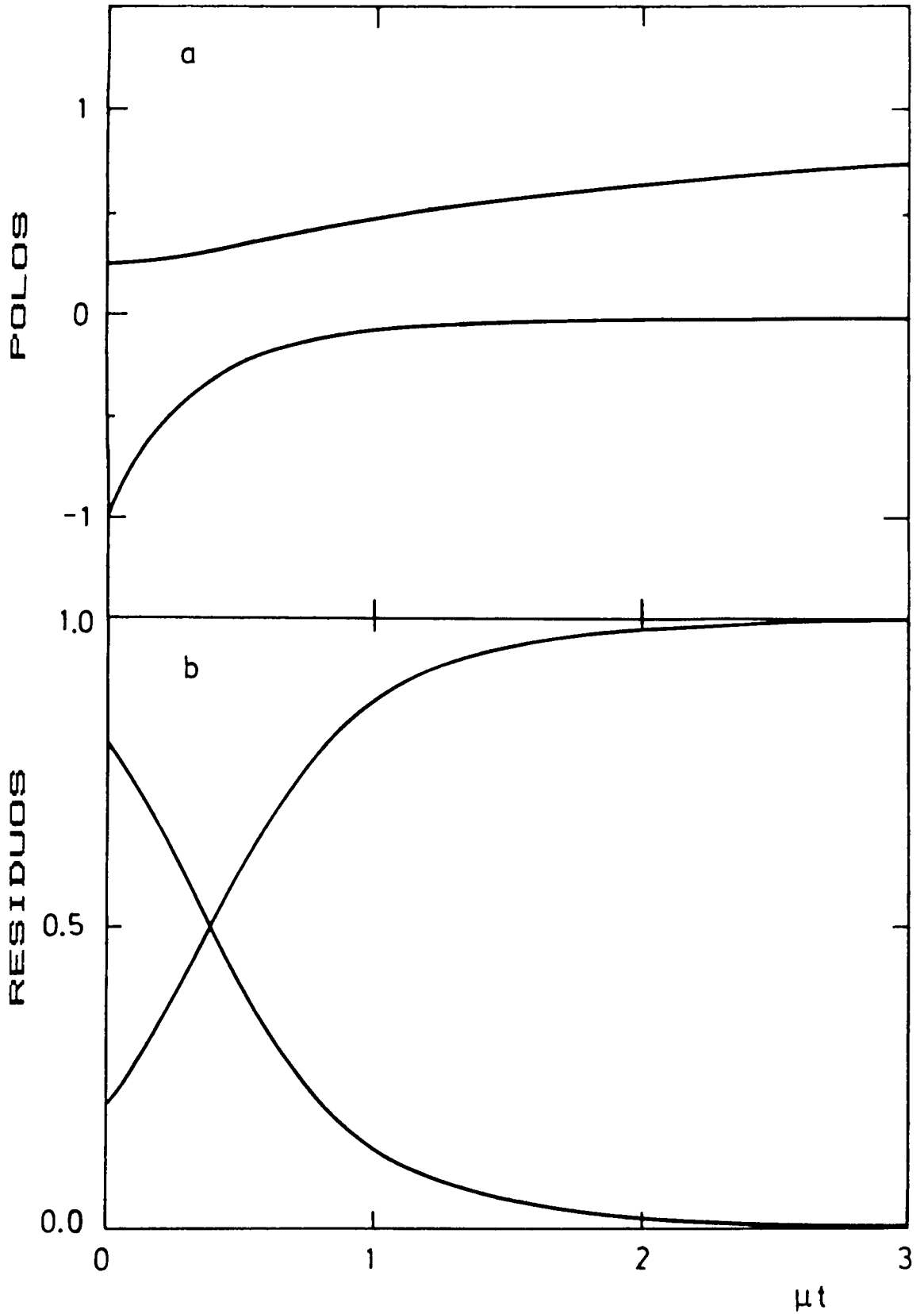


Figura 2. Evolución temporal de los polos (a) y residuos (b) de la función transformada en temperatura  $G(s,t)$  para una condición inicial dada por (3.40) con  $\sigma_1(0) = -1$  y  $\sigma_2(0) = 1/4$  en el modelo de partícula muy dura (VHP).

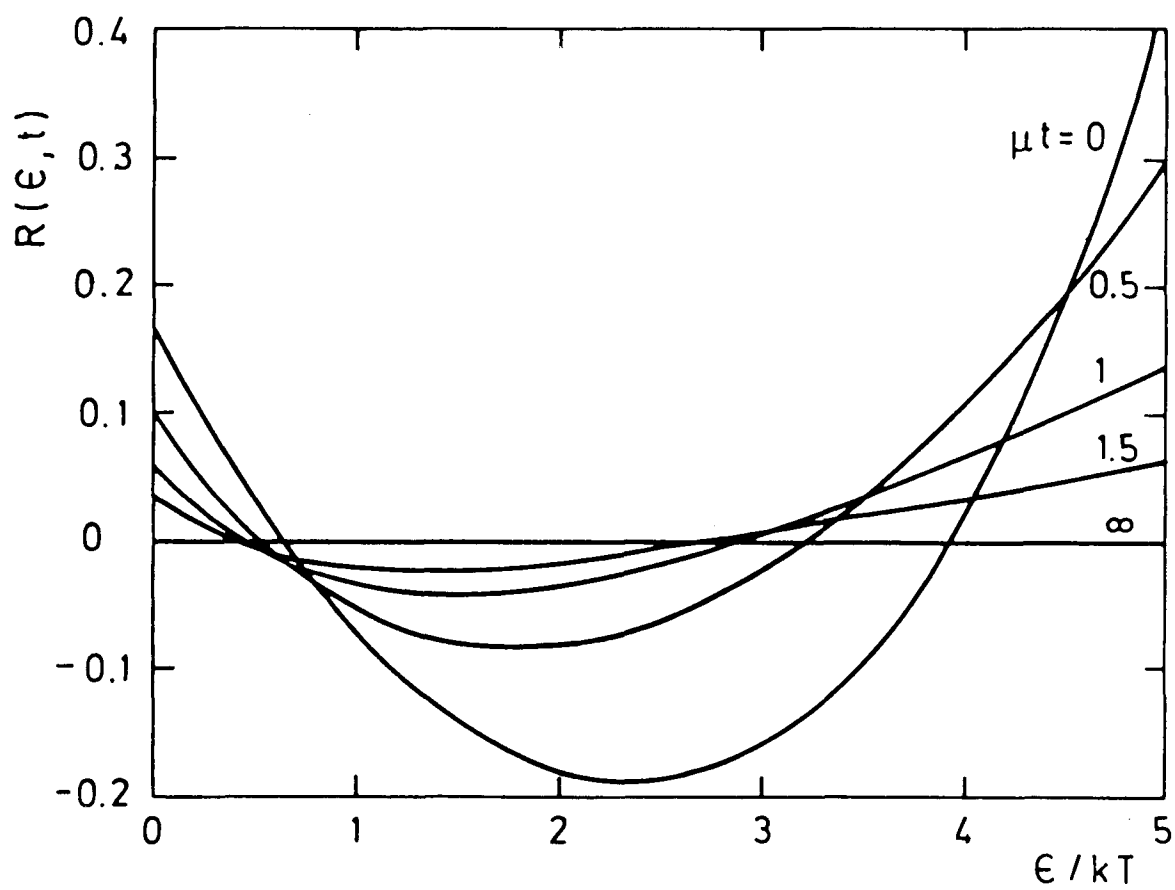


Figura 3. Desviación del equilibrio  $R(\epsilon, t)$  para el caso descrito en la figura 2.

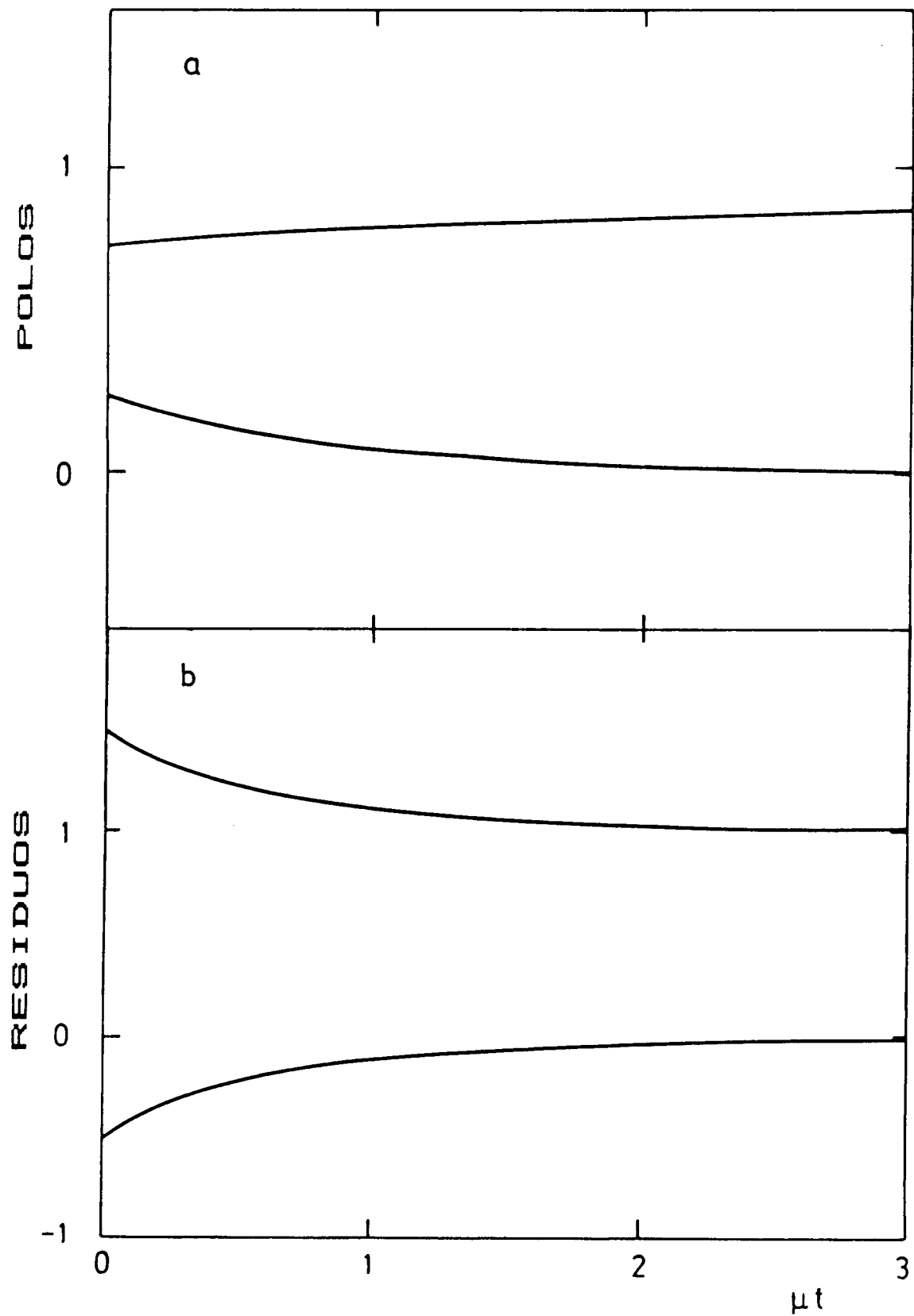


Figura 4. Como en la fig. 2 para  $\sigma_1(0) = 1/4$  y  $\sigma_2(0) = 3/4$

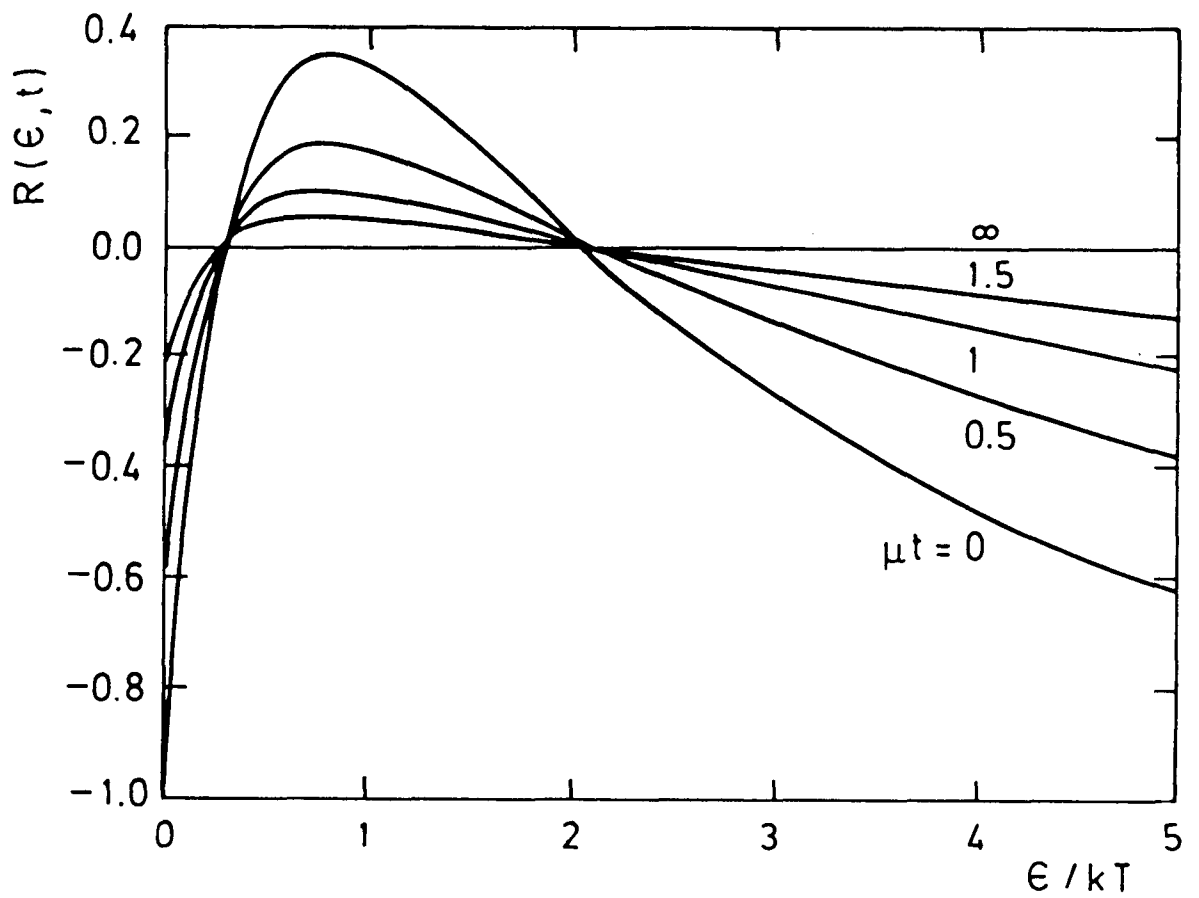


Figura 5. Desviación del equilibrio  $R(\epsilon, t)$  para el caso descrito en la figura 4.

$$\beta = \frac{2a}{3-a} \quad (3.44b)$$

Esta función distribución oscilante da origen a una función transformada en temperatura  $G(s,t)$  con tres polos  $s_1$ ,  $s_2$  y  $s_3$  ubicados inicialmente en

$$s_1 = \frac{a-1}{a} \quad (3.45a)$$

$$s_2 = s_3^* = 1 - \frac{1}{a-ib} \quad (3.45b)$$

En las figuras 6 y 7 mostramos imágenes estroboscópicas de la evolución temporal en el plano complejo de los polos y los correspondientes residuos para dos casos particulares  $a = 1.4$  y  $a = 2.0$ . Vemos que el polo real  $s_1$  es, de hecho, el polo de Maxwell y tiende monótonamente hacia el punto de equilibrio, mientras que los dos polos complejos se dirigen hacia el punto de escape. En la figura 8 hemos representado también la evolución temporal de la desviación respecto del equilibrio  $R(\epsilon,t)$  para el caso particular  $a = 1.4$ .

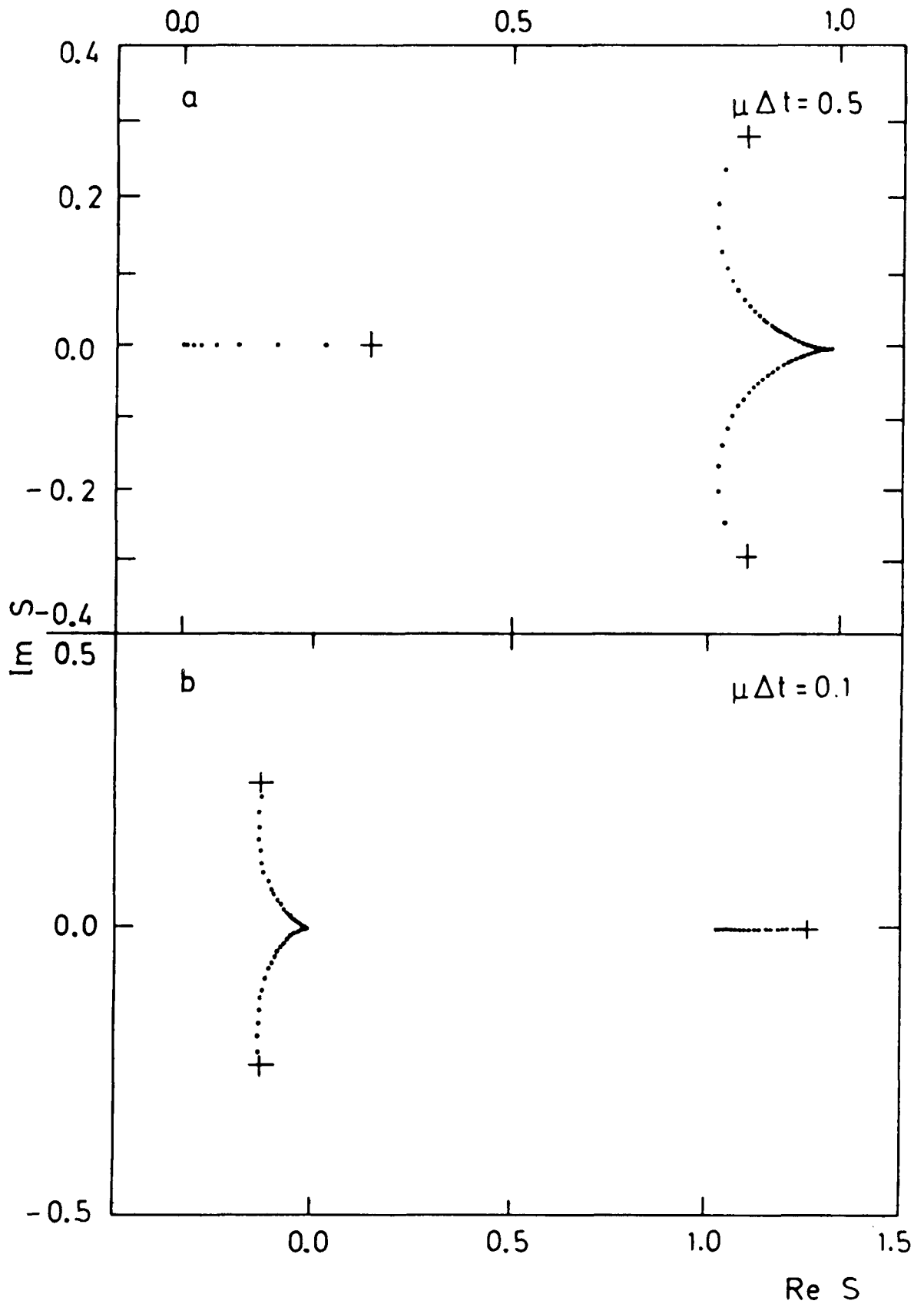


Figura 6. Imágenes estroboscópicas en el plano complejo  $s$  de los polos (a) y residuos (b) de la función transformada en temperatura  $G(s,t)$  en el modelo de partícula muy dura para una condición inicial (+) dada por (3.43) y (3.44) con  $a = 1.4$ .

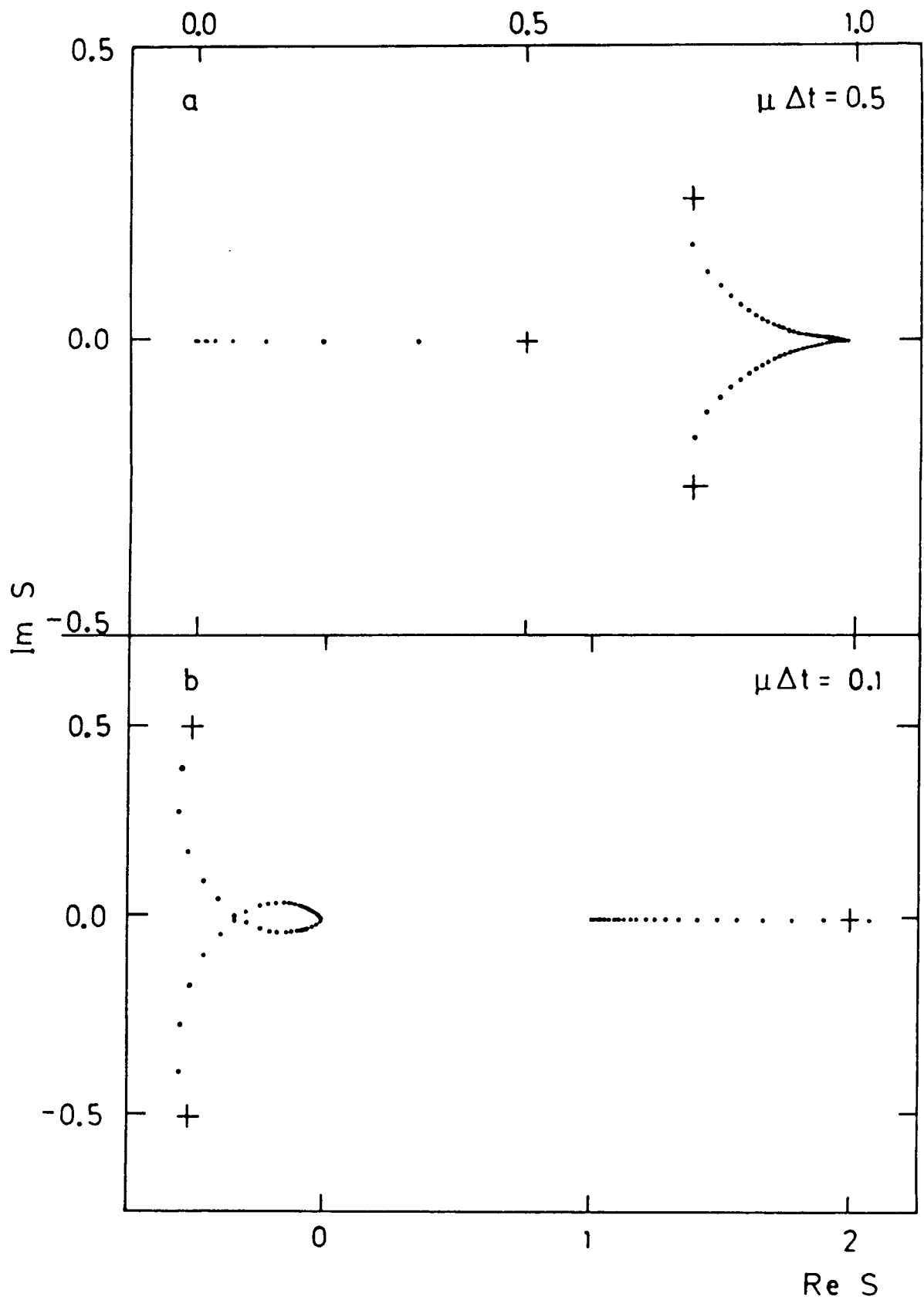


Figura 7. Como en la figura 6 con  $a = 2$ .

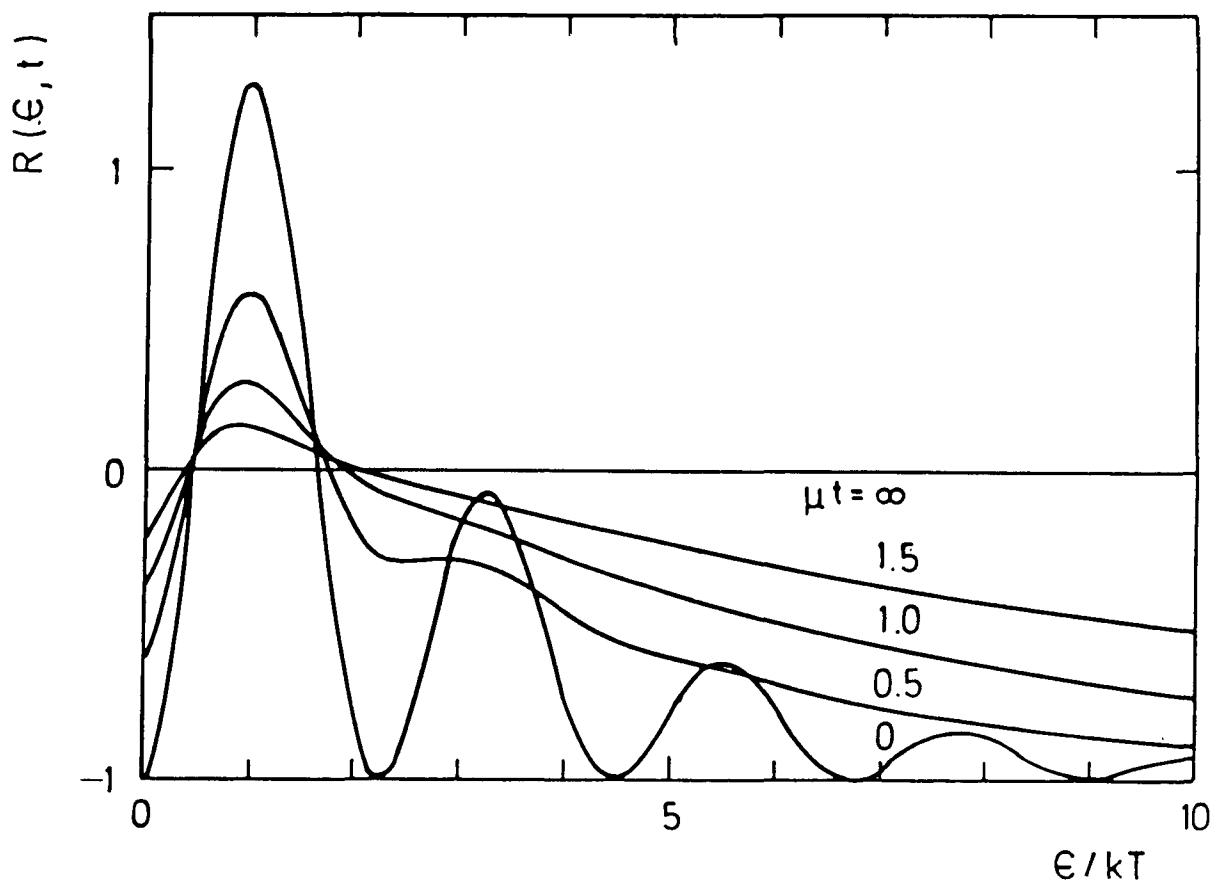


Figura 8. Desviación del equilibrio  $R(\epsilon, t)$  para el caso descrito en la figura 6.

### 3.4 ECUACION DE BOLTZMANN LINEALIZADA

Debido a la naturaleza no lineal del término de colisión la ecuación de Boltzmann es muy difícil de resolver y analizar. En este sentido la aproximación linealizada, que se obtiene al despreciar términos cuadráticos en la desviación respecto del equilibrio, constituye una razonable simplificación. El estudio de esta ecuación de Boltzmann linealizada es importante, no sólo por su comprobada utilidad en la descripción de situaciones físicas reales, sino por el hecho de que, presentando una estructura similar a la de la ecuación de Boltzmann no lineal, permite obtener una descripción cualitativamente correcta acerca de sus características esenciales. Naturalmente esta descripción no incluye los efectos no lineales debidos al término de colisión. Al respecto estamos interesados en estudiar la solución linealizada de la ecuación de Boltzmann en términos de la transformada en temperatura, analizando en detalle las discrepancias que presente respecto del caso no lineal general.

Si reemplazamos la expresión (3.42) en la ecuación de Boltzmann (2.26) obtenemos:

$$F(\epsilon, t) = F_0(\epsilon) [1 + R(\epsilon, t)] \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} R(\epsilon, t) = L(R) + N(R, R) \quad (3.47)$$

donde  $L$  es el denominado operador linealizado de colisión (Cercignani 1983):

$$L(R) = \int_{\epsilon}^{\infty} dE \int_0^E d\epsilon' K(\epsilon', \epsilon, E) F_0(E - \epsilon) \cdot [R(\epsilon'; t) + R(E - \epsilon'; t) - R(\epsilon, t) - R(E - \epsilon, t)] \quad (3.48)$$

y  $N$  es el operador bilineal de colisión

$$N(R, R) = \int_{\epsilon}^{\omega} dE \int_0^E d\epsilon' K(\epsilon', \epsilon; E) F_0(E - \epsilon) \cdot [R(\epsilon', t) R(E - \epsilon', t) - R(\epsilon, t) R(E - \epsilon, t)] \quad (3.49)$$

En el espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(0, \omega)$  de funciones de cuadrado sumable, el operador  $L$  es autoadjunto,

$$\langle R_1, L(R_2) \rangle = \langle L(R_1), R_2 \rangle \quad (3.50)$$

con  $\langle f, g \rangle$  el producto interno:

$$\langle f, g \rangle = \int_0^{\omega} d\epsilon F_0(\epsilon) f(\epsilon) g(\epsilon) \quad (3.51)$$

Además es definido no negativo  $\langle R, L(R) \rangle \geq 0$ . Las autofunciones de autovalor nulo  $R_0(\epsilon) = 1$  y  $R_1(\epsilon) = \epsilon/kT$  están relacionadas con la conservación del número de partículas y la energía total. Cualquier solución  $R(\epsilon, t)$  de la ecuación de Boltzmann compatible con dichas condiciones debe satisfacer  $\langle R, R_0 \rangle = \langle R, R_1 \rangle = 0$  en todo instante.

Es común que sólo se quiera calcular una solución aproximada de la ecuación de Boltzmann. Por ejemplo, si la desviación del equilibrio es pequeña, podemos despreciar los términos cuadráticos en  $R$ , obteniendo la ecuación de Boltzmann linealizada:

$$\frac{\partial R^{(1)}}{\partial t} = L(R^{(1)}) \quad (3.52)$$

En general esta solución linealizada constituye una muy buena aproximación. Sin embargo no describe adecuadamente el proceso bajo estudio cuando la desviación respecto del equilibrio es inicialmente importante. En este caso podemos calcular un segundo orden de aproximación de la ecuación de Boltzmann teniendo en cuenta parcialmente el operador bilineal de colisión. En otras palabras estamos sugiriendo un

método iterativo para resolver la ecuación de Boltzmann

$$R^{(0)} = 0 \quad (3.53a)$$

$$\frac{\partial R^{(n)}}{\partial t} = L(R^{(n)}) + N(R^{(n-1)}, R^{(n-1)}) \quad (3.53b)$$

Este método resulta ser muy eficaz para estudiar la relajación al equilibrio a tiempos grandes y, a diferencia del método iterativo de Wild (1951), presenta la evidente ventaja de respetar las condiciones de conservación del número de partículas y la energía (2.23) y la condición asintótica (2.24) en cada orden de iteración. En general, y a medida que crece el tiempo, los diferentes órdenes de aproximación tienden rápidamente hacia la función distribución exacta del problema en cuestión (Shizuta 1983).

Estamos interesados en estudiar la solución linealizada de la ecuación de Boltzmann en términos de la transformada integral en temperatura introducida en el presente trabajo. Para ello usaremos en primer lugar el modelo de partícula muy dura, para el cual conocemos la solución exacta para condiciones iniciales arbitrarias. En dicho modelo el operador linealizado de colisión se escribe:

$$L(R) = \frac{2\mu}{kT} \int_0^\epsilon \left[ \frac{F_0(\epsilon) - F_0(\epsilon')}{F_0(\epsilon)} \right] R(\epsilon', t) d\epsilon' - \mu \left( 1 + \frac{\epsilon}{kT} \right) R(\epsilon, t) \quad (3.54)$$

Para este modelo de interacción la ecuación de Boltzmann linealizada puede resolverse empleando exactamente el mismo método que utilizamos en la sección anterior para el caso no lineal general. Obtenemos:

$$G^{(n)}(s, t) = \frac{1}{s} \left[ 1 + \frac{e^{-\mu t}}{s(s-1)} B(r) \right] \quad (3.55)$$

donde  $r(s, t)$  está dado por (3.29) y la función arbitraria  $B[r]$  queda determinada por la condición inicial  $G(s, 0)$  en la

forma:

$$B(r) = r(r-1) [r G(r,0) - 1] \quad (3.56)$$

Advertimos inmediatamente que la solución linealizada (3.55) es equivalente a mantener los dos primeros términos del desarrollo formal de la expresión (3.31) en potencias de  $1/\varphi[r]$ . O sea:

$$G(s,t) = \frac{1}{s} \left[ 1 + \frac{1}{(s-1)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{(s-1)e^{-\mu t}}{s \varphi(r)} \right)^n \right] \quad (3.57)$$

De hecho el desarrollo truncado al orden  $2^{N-1}$  se corresponde con el orden N de iteración en la ecuación (3.53). Es decir

$$G^{(N)}(s,t) = \frac{1}{s} \left[ 1 + \frac{1}{(s-1)^2} \sum_{n=1}^{2^{N-1}} B_n^{(N)}(r) \left( \frac{(s-1)e^{-\mu t}}{s} \right)^n \right] \quad (3.58)$$

donde  $B_1^{(N)}$  queda fijado por la condición inicial, mientras que el resto de las funciones  $B_n^{(N)}$  se determina a partir de las funciones  $B_n^{(N-1)}$  correspondientes al orden iterativo anterior

$$B_n^{(N)} = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} B_j^{(N-1)} B_{n-j}^{(N-1)} \quad (3.59)$$

Para tiempos suficientemente grandes todas las singularidades de la transformada en temperatura linealizada (3.55) se dirigen hacia el punto de escape  $s = 1$ , volviéndose cada vez menos importantes. Sin embargo ahora no hay ningún polo de Maxwell que tienda asintóticamente hacia el punto de equilibrio, sino que en el instante inicial aparece un polo doble en  $s = 0$ , que permanece allí indefinidamente. Tenemos

$$G^{(N)}(s,t) \approx \frac{1}{s} \left[ 1 + \frac{e^{-\mu t}}{s(s-1)} B \left( 1 + \frac{1}{\mu t} \right) \right] ; \mu t \rightarrow \infty \quad (3.60)$$

con lo cual el acercamiento final al equilibrio está descrito por:

$$F^{(N)}(\epsilon, t) \approx F_0(\epsilon) \left[ 1 + e^{-\mu t} \left( \frac{\epsilon - 2kT}{kT} \right) B \left( 1 + \frac{1}{\mu t} \right) \right] ; \mu t \rightarrow \infty \quad (3.61)$$

expresión que, tal como era de esperar, es equivalente al primer orden de aproximación de (3.36) en potencias de  $1/\varphi$ .

Nuevamente, tal como ocurría en el caso no lineal, el acercamiento al equilibrio a altas energías está caracterizado por el signo de la función  $\varphi[s]$  para  $s$  tendiendo al punto de escape por el semiplano de analiticidad. Por este motivo el acercamiento oscilatorio al equilibrio (efecto Tjon (1979)) es un fenómeno que también puede ocurrir en la ecuación de Boltzmann linealizada con precisamente la misma función distribución inicial. La no linealidad juega, sin embargo, un rol importante en la determinación precisa de las características de la relajación al equilibrio. Para analizar con más detalle las diferencias entre el caso no lineal y la solución linealizada, consideraremos algunas distribuciones iniciales particulares. Sea, por ejemplo, la superposición de  $N$  maxwellianas (3.25), equivalente a la presencia de  $N$  polos simples en la correspondiente función transformada en temperatura (3.23). El carácter algebraico de la solución general (3.31) nos asegura que en el caso no lineal, la función distribución original mantiene su estructura, es decir que permanece como una suma de  $N$  maxwellianas al transcurrir el tiempo. El polo real más hacia la izquierda se mueve hacia el punto de equilibrio, mientras que el resto tiende hacia el punto de escape. En el caso linealizado la situación es distinta: La expresión (3.55) nos indica que todos los polos  $\sigma_n$  se dirigen hacia el punto de escape según la relación

$$\sigma_n(t) = \frac{\sigma_n(0) - (\sigma_n(0) - 1)\mu t}{1 - (\sigma_n(0) - 1)\mu t} \quad (3.62)$$

y aparece un polo doble estacionario en  $s = 0$ . Luego para tiempos distintos de cero la evolución de la función distribución (3.25) está dada por

$$G(s,t) = \frac{\alpha_1(t)}{s - \sigma_1(t)} + \dots + \frac{\alpha_N(t)}{s - \sigma_N(t)} + \frac{\beta_1(t)}{s} + \frac{\beta_2(t)}{s^2} \quad (3.63)$$

donde todos los residuos tienden a cero, excepto  $\beta_1(t)$  que tiende hacia 1. En el instante inicial  $\beta_1(0) = \beta_2(0) = 0$ .

Evidentemente el surgimiento de un polo doble en el punto de equilibrio  $s = 0$ , debe ir acompañado por la aparición de un cero doble en dicho punto. Al transcurrir el tiempo éste se separa en dos ceros simples, uno de los cuales luego de alejarse retorna asintóticamente al punto de equilibrio, mientras que el otro cero tiende al punto de escape  $s = 1$ . Estas características de la evolución temporal de la solución linealizada en el modelo de partícula muy dura se muestran en las figuras 9 a 13 para las mismas condiciones iniciales estudiadas en el párrafo anterior.

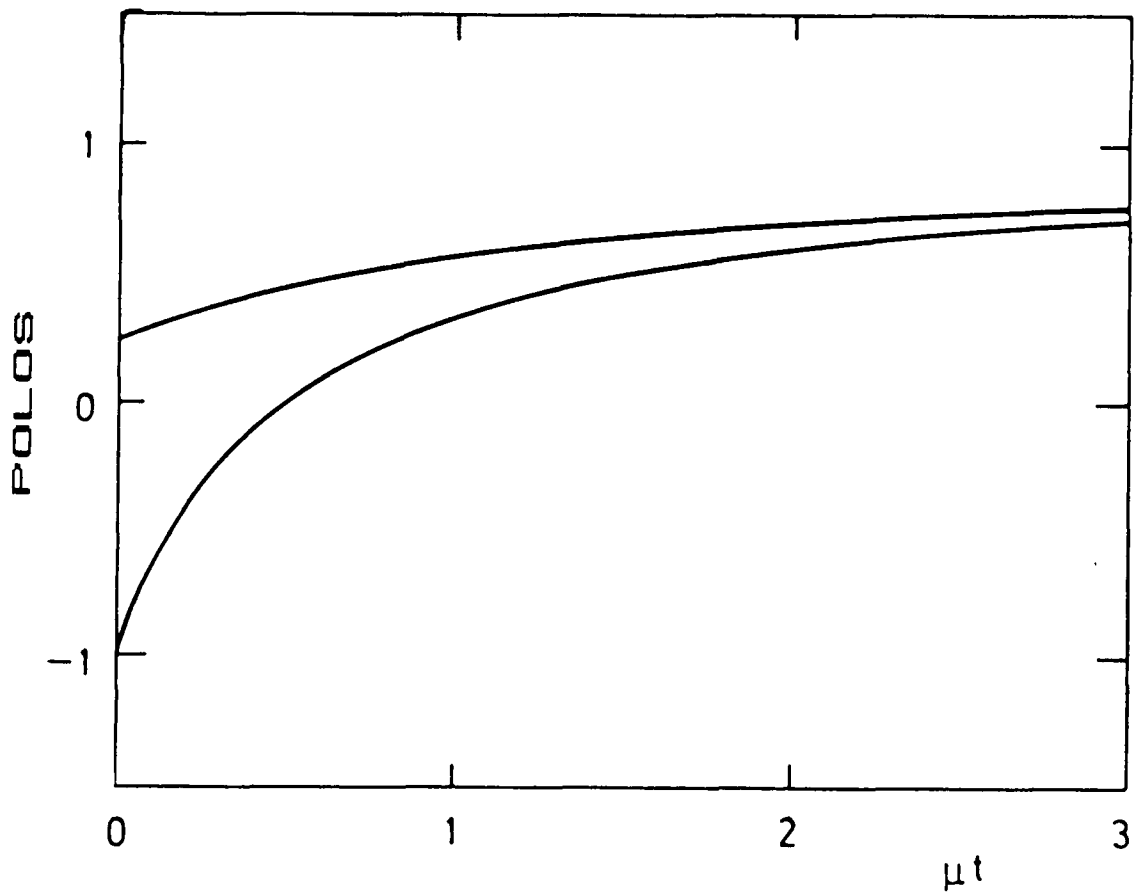


Figura 9. Evolución temporal de los polos de la solución linealizada transformada en temperatura  $G^{(m)}(s,t)$  para el caso descrito en la figura 2.

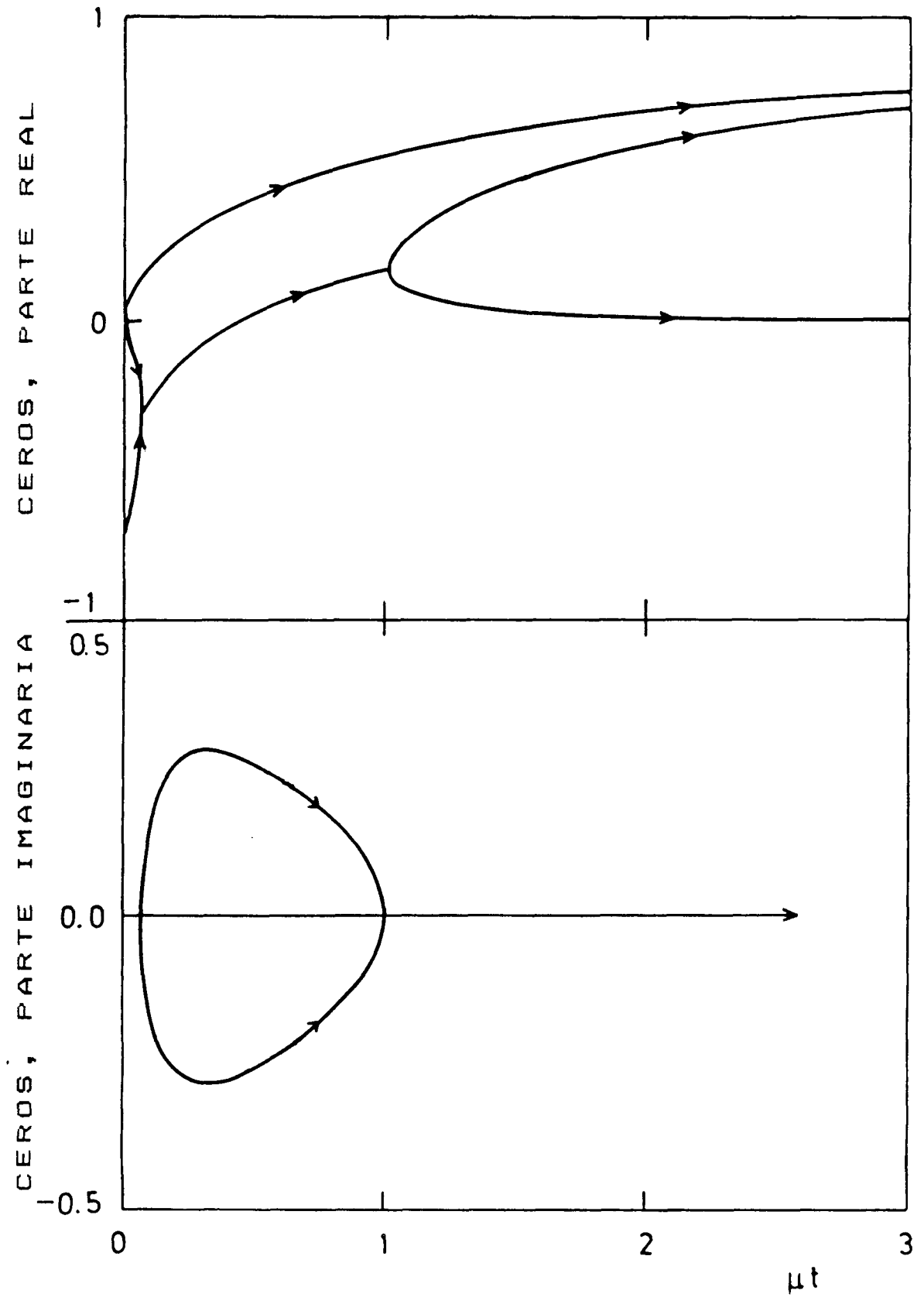


Figura 10. Evolución temporal de la parte real e imaginaria de los ceros de la solución linealizada transformada en temperatura  $G''(s,t)$  para el caso descrito en la figura 2.

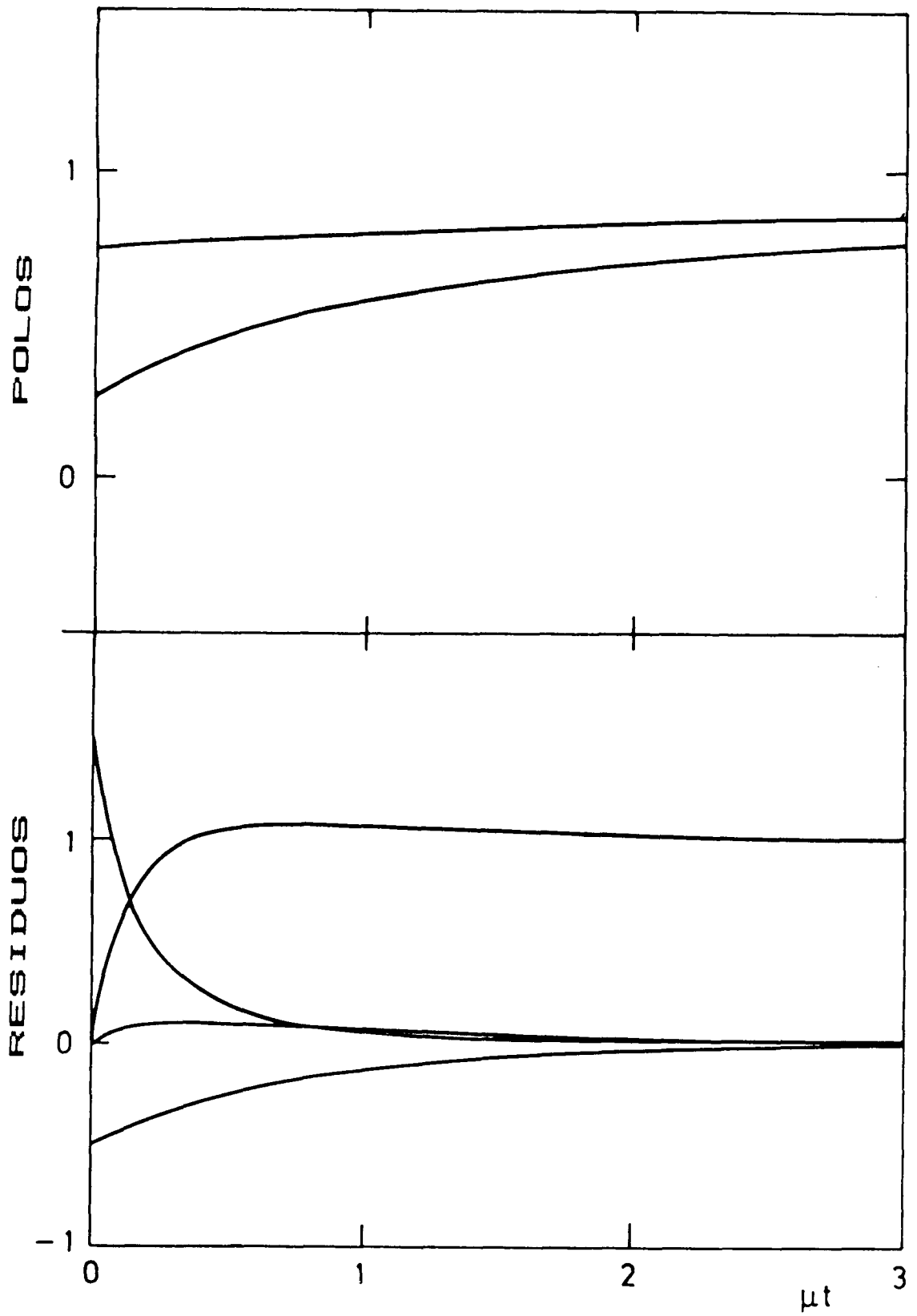


Figura 11. Evolución temporal de los polos y los residuos de la solución linealizada transformada en temperatura  $G^{(n)}(s,t)$  para el caso descrito en la figura 4.

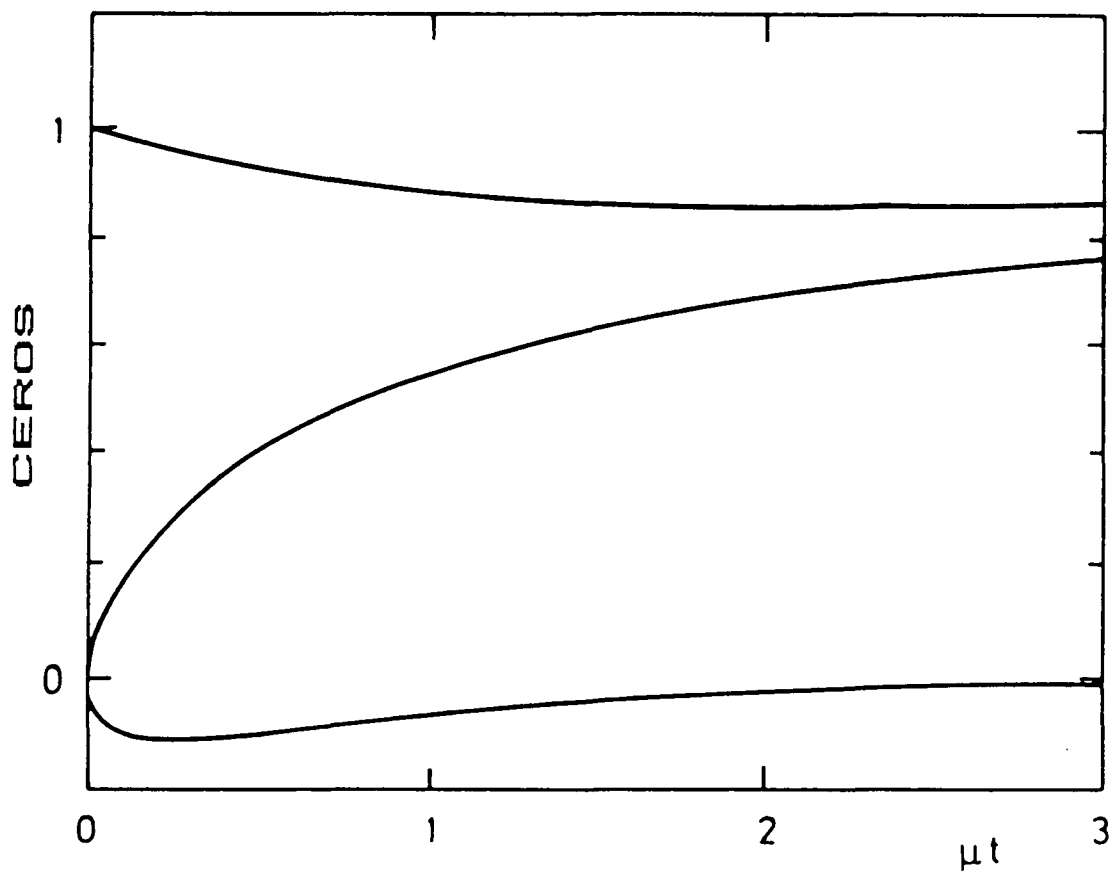


Figura 12. Evolución temporal de los ceros de la solución linealizada transformada en temperatura  $G''(s,t)$  para el caso descrito en la figura 4.

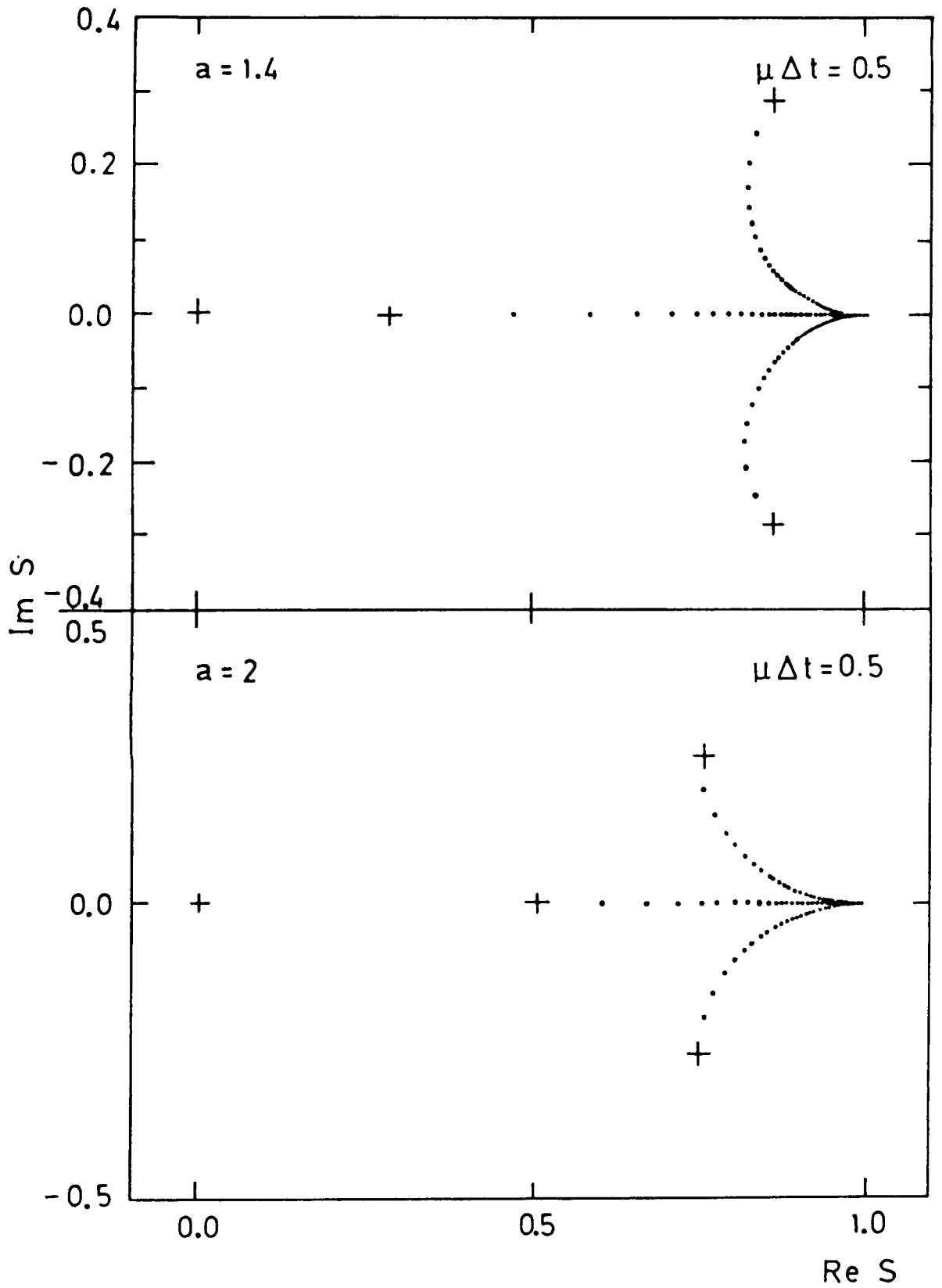


Figura 13. Imágenes estroboscópicas en el plano complejo  $s$  de los polos de la solución linealizada transformada en temperatura  $G''(s,t)$  en el modelo de partícula muy dura con una condición inicial (+) dada por (3.43) y (3.44) para dos valores distintos de  $a$ .

### 3.5 MODELOS DE MAXWELL

Con el objeto de simplificar la complicada estructura matemática del término de colisión (2.6), se buscan modelos matemáticos de la sección eficaz que tengan una dependencia simple con el impulso relativo y/o el ángulo de dispersión. Los modelos de Maxwell proveen una notable simplificación a la ecuación de Boltzmann, en tanto que la probabilidad de colisión depende únicamente del ángulo de dispersión y no del impulso relativo (Cercignani 1969):

$$\frac{g}{m} \sigma(g, \hat{g}, \hat{n}) = \alpha(\hat{g}, \hat{n}) \quad (3.64)$$

Una sección eficaz con las características mencionadas se obtiene al considerar un potencial de interacción  $V(r) = a \cdot r^{-s}$  con  $s = 2(2\nu - 1)$  en un sistema de dimensión  $2\nu$ ; siendo  $\alpha(\hat{g}, \hat{n})$  una función muy complicada de su argumento (Cecignani 1975). Podemos obtener modelos más generales eligiendo convenientemente esta función  $\alpha(\hat{g}, \hat{n})$ , en cuyo caso la sección eficaz puede resultar no ser derivable de un potencial. La característica más importante de estos modelos de interacción es que permiten una resolución completa de la ecuación de Boltzmann dentro del espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(0, \infty)$  en la forma de un desarrollo en polinomios de Laguerre (Ernst 1981):

$$F(\epsilon, t) = F_0(\epsilon) \sum_{n=0}^{\infty} C_n(t) L_n^{\nu-1}(\epsilon/kT) \quad (3.65)$$

Transformando esta expresión término a término vemos que es equivalente al desarrollo de Mc Laurin (3.10) de la función transformada de Fourier y al desarrollo de Laurent (3.12) de la función transformada en temperatura.

Los polinomios de Laguerre son las autofunciones del problema de autovalores generado por el operador linealizado

de colisión (3.48).

$$L(L_n^{\nu-1}) = -\Lambda_n L_n^{\nu-1} \quad (3.66)$$

Estas funciones forman un conjunto completo en el espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(0, \infty)$  de funciones de cuadrado sumable, y son ortogonales en el siguiente sentido

$$\int_0^{\infty} F_0(\epsilon) L_n^{\nu-1}\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) L_m^{\nu-1}\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) d\epsilon = \eta \delta_{nm} \quad (3.67)$$

de esta manera los coeficientes  $c_n(t)$  son momentos generalizados de la función distribución  $F(\epsilon, t)$ :

$$c_n(t) = \frac{1}{\eta} \int_0^{\infty} F(\epsilon, t) L_n^{\nu-1}\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) d\epsilon \quad (3.68)$$

Estos momentos  $c_n(t)$  tienen una forma asintótica muy simple para tiempos grandes

$$c_n(t) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \delta_{n0} \quad (3.69)$$

Por último las leyes de conservación (3.23) imponen sobre los momentos  $c_n(t)$  las siguientes restricciones:

$$c_0(t) = 1 \quad (3.70a)$$

$$c_1(t) = 0 \quad (3.70b)$$

Reemplazando el desarrollo (3.65) en la ecuación de Boltzmann obtenemos el siguiente conjunto infinito de ecuaciones para los momentos  $c_n(t)$

$$\left[ \frac{d}{dt} + \Lambda_n \right] c_n(t) = \sum_{m=1}^{n-1} \mu_{nm} c_m(t) c_{n-m}(t) \quad (3.71)$$

donde los coeficientes reales  $\mu_{nm}$  están dados en términos de la sección eficaz de colisión (3.64) por:

$$\mu_{nm} = \eta \binom{n}{m} \int \alpha(\cos \theta) \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^{2(n-m)} \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^{2m} d\Omega \quad (3.72)$$

y  $\Lambda_n$  son los autovalores del operador linealizado de colisión:

$$\begin{aligned} \Lambda_n &= \mu_{00} (1 + \sigma_{n0}) - \mu_{n0} - \mu_{nn} = \\ &= \eta \int \alpha(\cos \theta) \left[ 1 + \sigma_{n0} - \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^{2n} - \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^{2n} \right] d\Omega \end{aligned} \quad (3.73)$$

Naturalmente la característica más importante de la ecuación (3.71) es el que cada momento  $c_N(t)$  pueda ser hallado en forma secuencial dados los valores iniciales de todos ellos, v.g. dada la función distribución inicial. Cuando  $c_2(t), \dots, c_{N-1}(t)$  han sido determinados, la ecuación para  $c_N(t)$  se reduce a una ecuación diferencial lineal inhomogénea de primer orden. Su solución para  $N \neq 0$  es una suma de términos transitorios exponenciales, cuyos coeficientes reales dependen de los valores iniciales  $c_n(0)$ . El que no existan términos constantes en  $c_N(t)$  para  $N \neq 0$  es algo muy importante en tanto que, no sólo la distribución de equilibrio queda determinada por el hecho de que  $c_N(\infty) = \sigma_{n0}$ , sino que el acercamiento al equilibrio resulta evidente. El número de términos en  $c_N(t)$  crece muy rápidamente (exponencialmente) con  $N$ , por lo cual, mientras que los momentos de orden bajo pueden ser evaluados explícitamente con relativa facilidad, el proceso se vuelve difícil y tedioso al aumentar  $N$ .

Formalmente la solución de la ecuación de momentos está dada por:

$$C_0(t) = 1 \quad (3.74a)$$

$$C_1(t) = 0 \quad (3.74b)$$

$$C_n(t) = e^{-\Lambda_n t} \left[ C_n(0) + \int_0^t e^{\Lambda_n \mathcal{T}} \sum_{m=1}^{n-1} \mu_{nm} C_m(\mathcal{T}) C_{n-m}(\mathcal{T}) d\mathcal{T} \right] \quad (3.74c)$$

Esta expresión, junto con el desarrollo en momentos (3.65),

representa la solución general de la ecuación de Boltzmann para modelos de Maxwell con condiciones iniciales  $F(\epsilon, 0)$  pertenecientes al espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(0, \infty)$ .

Varios autores (Bobylev 1976a, 1980, Barnsley y Cornille 1980, Ernst 1981, Hendriks y Nieuwenhuizen 1982) han investigado aspectos del problema de la existencia de tales soluciones desarrollables en series generalizadas de Laguerre, y han dado condiciones suficientes sobre los valores iniciales de los momentos  $c_n(t)$  de forma tal que la serie correspondiente converja en forma absoluta, y tenga norma  $\|F\|$  acotada para todo tiempo  $t \geq 0$ . Es decir que la solución  $F(\epsilon, t)$  permanezca en el espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(0, \infty)$  para todo  $t \geq 0$ . Estas condiciones de convergencia son sólo suficientes, mostrando que al menos existe una clase no vacía de soluciones. Debemos destacar que muy pocos problemas no lineales pueden resolverse por un desarrollo en un conjunto de funciones ortogonales. Luego es sorprendente que para una gran clase de modelos de Maxwell, la solución general pueda darse en forma de un desarrollo en polinomios de Laguerre para condiciones iniciales muy generales.

Las características propias de cada modelo de interacción de Maxwell están resumidas en el correspondiente conjunto de coeficientes  $\{\mu_{nm}\}$ . Una interesante clase de modelos está dada por la elección (Ernst 1979):

$$\alpha(\cos \theta) \sim (\sin \theta)^{2(p-\nu)+1} \quad (3.75)$$

que, cuando  $p = (2\nu - 1)/2$  conduce a un modelo con sección eficaz isotrópica. Para esta clase de modelos los coeficientes  $\mu_{nm}$  pueden calcularse fácilmente, resultando:

$$\mu_{nm} = \mu \binom{n}{m} \frac{(p)_m (p)_{n-m}}{(2p)_n} \quad (3.76)$$

con  $\mu$  la frecuencia promedio de colisión, y donde  $(p)_n = \Gamma(p+n)/\Gamma(p)$  es el símbolo de Pochhammer (Abramowitz y Stegun

1972). Si  $p = 1$  tenemos el denominado modelo de Tjon y Wu (1979) para el cual la expresión de  $\mu_{nm}$  se simplifica de una manera notable:

$$\mu_{nm} = \frac{\mu}{n+1} \quad (3.77)$$

También podemos concebir interacciones en las cuales las partículas sean dispersadas en ángulos rectos, tal como ocurre en el modelo Wind-Tree de Ehrenfest (Klein 1959), o en el modelo de Hardy, Pomeau y de Pazzis (1973). En tales casos la probabilidad de colisión  $\alpha(\cos(\theta))$  es no nula sólo para  $\cos(\theta) = 0$ . O sea

$$\alpha(\cos \theta) \sim \delta(\cos \theta) \quad (3.78)$$

En tal caso los coeficientes  $\mu_{nm}$  están dados por

$$\mu_{nm} = \frac{\mu}{2^n} \binom{n}{m} \quad (3.79)$$

Para algunos modelos de Maxwell y en particular para el modelo de moléculas de Maxwell la frecuencia promedio de colisión

$$\mu = \eta \int \alpha(\cos \theta) d\Omega \quad (3.80)$$

diverge en tanto que la sección eficaz total es infinita para potenciales de rango infinito. Los coeficientes  $\mu_{n0}$  y  $\mu_{nn}$  también divergen. Sin embargo en la ecuación de momentos sólo aparecen coeficientes  $\mu_{nm}$  con  $1 \leq m \leq n-1$  y autovalores  $\Lambda_n$ . Estos autovalores son finitos para todos los modelos de Maxwell, en tanto que las contribuciones divergentes que aparecen en la expresión (3.73) se restan entre sí. Vemos entonces que estas complicaciones no afectan el resultado final. Puede advertirse también que es posible evitar cualquier término divergente en los pasos intermedios.

Durante los últimos ocho años ha habido un enorme resurgimiento de interés en la ecuación de Boltzmann no lineal (Ernst 1984), debido en parte al descubrimiento de una solución exacta no trivial para el caso de modelos de Maxwell. Tal solución fué encontrada por Bobylev (1976b), e independientemente por Krook y Wu (1976, 1977a); y suele denominarse modo BKW.

$$F(\epsilon, t) = F_0(\epsilon) \left[ 1 - \frac{\sigma}{1-\sigma} \left( \nu - \frac{\epsilon/kT}{1-\sigma} \right) \right] \quad (3.81)$$

con

$$\sigma(t) = \sigma(0) e^{-\Lambda_2 t / 2} \quad (3.82)$$

Vemos que el modo BKW constituye toda una familia de soluciones particulares, según sea el valor de la constante  $\sigma(0)$ , con una única restricción impuesta por la positividad de la solución

$$0 < \sigma(0) < \frac{1}{1+\nu} \quad (3.83)$$

El modelo de Maxwell elegido queda fijado por el valor asignado al autovalor  $\Lambda_2$ . Los momentos del correspondiente desarrollo de Laguerre son

$$C_n(t) = (1-n) [\sigma(t)]^n \quad (3.84)$$

Reemplazando en (3.12) obtenemos la función transformada en temperatura:

$$G(s, t) = \frac{s-2\sigma}{(s-\sigma)^2} \quad (3.85)$$

Vemos que presenta un polo doble real que decae exponencialmente hacia el punto de equilibrio según la ley (3.82) (Cornille y Gervois 1982b).

Siendo muy raras las soluciones exactas de la ecuación de Boltzmann no lineal, es comprensible el interés desperta-

do por una solución particular, como es el modo BKW. Su posible importancia fué sobrestimada por la siguiente conjetura formulada por Krook y Wu (1977a): " Un estado inicial arbitrario tiende primero a relajarse hacia el modo BKW. El subsiguiente acercamiento hacia el equilibrio estará representado esencialmente por dicha solución particular con una fase  $\phi$  adecuada ". La primera evidencia contra esta conjetura fué encontrada por Tjon (1979), quien obtuvo soluciones numéricas para una gran clase de estados iniciales que tienden hacia el equilibrio de una manera cualitativamente diferente respecto de la solución BKW. De hecho él encontró que para ciertos estados iniciales la cola de altas energías, vacía inicialmente, podía sobrepoblarse rápidamente, para luego tender al equilibrio por arriba. Este efecto Tjon, al que hicimos referencia en un párrafo anterior, no se presenta en el modo BKW, el cual muestra un acercamiento monótono al equilibrio por debajo. Puede demostrarse (criterio de Hauge (1979) y Alexanian (1979)) que cualquier función distribución con segundo momento positivo  $c_2(0) > 0$  tenderá al equilibrio por arriba, constituyéndose en un evidente contraejemplo a la conjetura de Krook y Wu. Sin embargo para el caso  $c_2(0) < 0$  no se ha podido demostrar en forma rigurosa la validez o falsedad de dicha conjetura. La transformada en temperatura introducida en este trabajo permite aportar una importante conclusión sobre dicho punto: El comportamiento totalmente distinto del polo doble (3.82) del modo BKW respecto de los polos simples de los ejemplos ya estudiados y por estudiar en las siguientes secciones constituye un contraejemplo concluyente a la conjetura de Krook y Wu.

### 3.6 APROXIMANTES MULTIPOLARES

La evolución temporal de la función distribución  $F(\epsilon, t)$  está dominada principalmente por el comportamiento de las singularidades de su transformada en temperatura  $G(s, t)$ . Supongamos que en el instante inicial esta función transformada está caracterizada por  $N$  polos simples. En un párrafo anterior vimos como, para el modelo de partícula muy dura, el estudio de la evolución temporal de dichas singularidades nos permitía obtener una mayor y más clara comprensión acerca de la evolución de la función distribución propiamente dicha. Para dicho modelo de interacción el número de polos de la función transformada en temperatura se conserva al transcurrir el tiempo. De hecho, y excepto para ciertos modelos particulares, ello no sucederá, dándose el caso de la aparición de nuevos polos en el puntos de equilibrio. Esto ocurre, por ejemplo, para los modelos de interacción de Maxwell que hemos estudiado en el último párrafo. Supongamos, sin embargo, que aún en dicho caso la función distribución transformada en temperatura puede ser aproximada adecuadamente por una combinación lineal de  $N$  polos simples:

$$G_N(s, t) = \frac{\alpha_1(t)}{s - \sigma_1(t)} + \frac{\alpha_2(t)}{s - \sigma_2(t)} + \dots + \frac{\alpha_N(t)}{s - \sigma_N(t)} \quad (3.86)$$

Naturalmente ésta será únicamente una aproximación de la función transformada en temperatura. Pedimos que este aproximante racional sea igual a la función transformada en temperatura  $G(s, t)$  hasta el orden  $2N$  en  $1/s$ . Comparando (3.86) con el desarrollo de Laurent (3.12) e igualando los coeficiente de iguales potencias de la variable obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones acopladas:

$$\sum_{j=1}^N \alpha_j (\sigma_j)^n = C_n(t) \quad 0 \leq n < 2N \quad (3.87)$$

que en principio nos permitirá evaluar los polos  $\sigma_j$  y los residuos  $\alpha_j$  del aproximante racional (3.86) en términos de los momentos (3.68): Debe aclararse que el método usual de resolución del sistema (3.87): el algoritmo Producto - Diferencia de Gordon (1968), no puede aplicarse en este caso. En efecto, en virtud de los teoremas de conservación del número de partículas y la energía tenemos que  $c_0 = 1$  y  $c_1 = 0$ , con lo cual el algoritmo falla. De todas maneras puede demostrarse que los polos  $\sigma_j$  son las raíces del polinomio característico (Baker 1975):

$$P(x) = \det \begin{pmatrix} C_0 & C_1 & \dots & C_N \\ C_1 & C_2 & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ C_{N-1} & \dots & \dots & C_{2N-1} \\ 1 & x & \dots & x^N \end{pmatrix} \quad (3.88)$$

Una vez que se han obtenido estos polos, los respectivos residuos se obtienen como solución del sistema lineal de Vandermonde:

$$\begin{pmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \sigma_1 & \dots & \sigma_N \\ \vdots & & \vdots \\ \sigma_1^{N-1} & \dots & \sigma_N^{N-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \\ C_N \end{pmatrix} \quad (3.89)$$

Este método resulta adecuado para valores pequeños de  $N$ , digamos  $N \lesssim 10$ . Para valores de  $N$  mayores se hacen necesarias técnicas más refinadas de cálculo, como ser alguna versión modificada del algoritmo Q-D de Rutishauser (1957).

La utilización del aproximante racional (3.86) es equivalente a aproximar la función distribución  $F(\epsilon, t)$  por una combinación lineal de distribuciones de equilibrio, pero de temperaturas y densidades modificadas.

$$F(\epsilon, t) = \alpha_1 F_{\sigma_1}(\epsilon) + \dots + \alpha_N F_{\sigma_N}(\epsilon) \quad (3.90)$$

Vemos que el desarrollo (3.86) tiene un claro sentido físico. Sin embargo surge la pregunta de porqué utilizar este aproximante en lugar del desarrollo de Laurent (3.12):

En primer lugar debemos tener en cuenta que estamos interesados en estudiar el comportamiento de las singularidades de la función transformada en temperatura. En este sentido mientras que, independientemente de las características de  $G(s,t)$ , el desarrollo de Laurent (3.12) truncado en  $n = N$  presenta un polo de orden  $N + 1$  en el origen, los aproximantes racionales permiten lograr una muy buena simulación de casi todas sus singularidades.

En segundo lugar si bien para una dada condición inicial la correspondiente solución de la ecuación de Boltzmann puede calcularse resolviendo analíticamente el sistema de ecuaciones (3.74) para los momentos  $c_n(t)$  hasta cierto orden  $n < N$  y sumando la serie truncada (3.65) resultante, resulta claro que, siendo  $L_n^{v-1}(\epsilon/kT) \sim \frac{1}{n!} (-\epsilon/kT)^n$  para  $\epsilon \gg kT$ , este procedimiento está necesariamente restringido a valores pequeños de la energía  $\epsilon < E(N,t)$ , donde  $E$  es una función creciente del orden de truncamiento  $N$  y del tiempo  $t$  (Barnesley y Turchetti 1979a, b). Es obviamente deseable mejorar la convergencia numérica, especialmente para tiempos pequeños, para lo cual el aproximante (3.90) resulta ser sumamente adecuado. Sin embargo en esta sección no estamos interesados en estudiar su convergencia, sino en investigar las características de la evolución temporal de los polos y residuos de la correspondiente transformada en temperatura (3.86).

Un caso particularmente simple lo constituye el aproximante bipolar  $G_2(s,t)$ . En efecto el correspondiente polinomio característico se anota:

$$P(x) = \det \begin{pmatrix} 1 & 0 & C_2 \\ 0 & C_2 & C_3 \\ 1 & x & x^2 \end{pmatrix} = C_2 x^2 - C_3 x - C_2^2 = 0 \quad (3.91)$$

Ahora bien, sabemos que el espectro de autovalores (3.73) tiene una degeneración  $3\Lambda_2 = 2\Lambda_3$  (Ernst 1981); con lo cual, haciendo el cambio de variables  $y = x e^{\Lambda_2 t/2}$  resulta

$$C_2(0)y^2 - C_3(0)y - C_2(0)^2 = 0 \quad (3.92)$$

O sea que la dependencia temporal de los polos está dada simplemente por el factor exponencial  $e^{-\Lambda_2 t/2}$ , v.g.

$$\sigma_1(t) = \sigma_1(0) e^{-\Lambda_2 t/2} \quad (3.93a)$$

$$\sigma_2(t) = \sigma_2(0) e^{-\Lambda_2 t/2} \quad (3.93b)$$

Los correspondientes residuos se calculan a partir del sistema lineal de Vandermonde (3.89), resultando ser independientes del tiempo:

$$\alpha_1(t) = \frac{\sigma_2(0)}{\sigma_2(0) - \sigma_1(0)} \quad (3.94a)$$

$$\alpha_2(t) = \frac{\sigma_1(0)}{\sigma_1(0) - \sigma_2(0)} \quad (3.94b)$$

Este es un resultado sorprendente ya que muestra un comportamiento netamente distinto al encontrado para el modelo de partícula muy dura. En aquel caso todas las singularidades se dirigían hacia el punto de escape, excepto una, que denominamos polo de Maxwell, y que tendía hacia el punto de equilibrio. Ahora, en cambio, ambas singularidades se comportan como polos de Maxwell relajándose exponencialmente hacia el punto de equilibrio. Este comportamiento es mostrado en las figuras 14 a 17 para los mismos casos estudiados en el párrafo 3.3 .

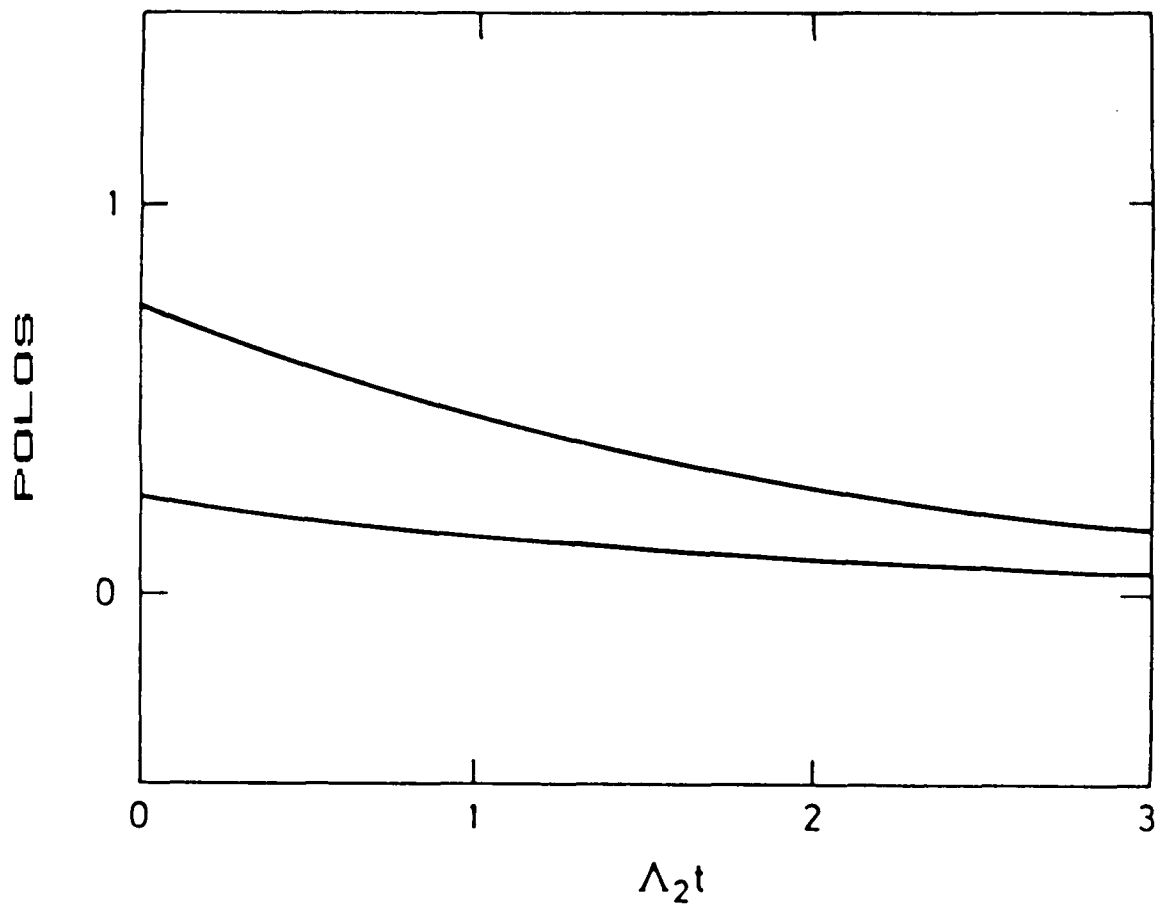


Figura 14. Evolución temporal de los polos de la función transformada en temperatura  $G(s,t)$  para la condición inicial descrita en la figura 4 en el modelo de Maxwell.

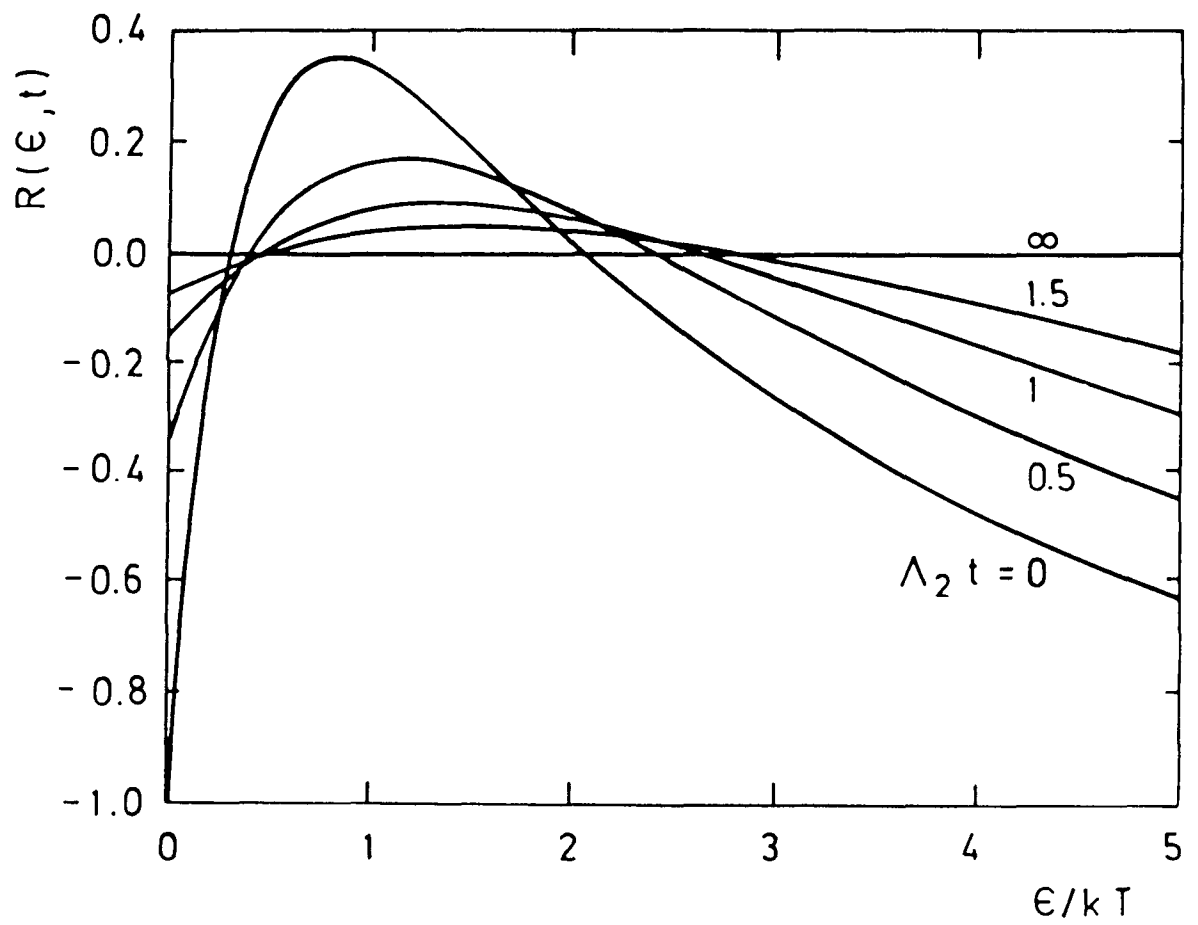


Figura 15. Desviación del equilibrio para el caso descrito en la figura 14.

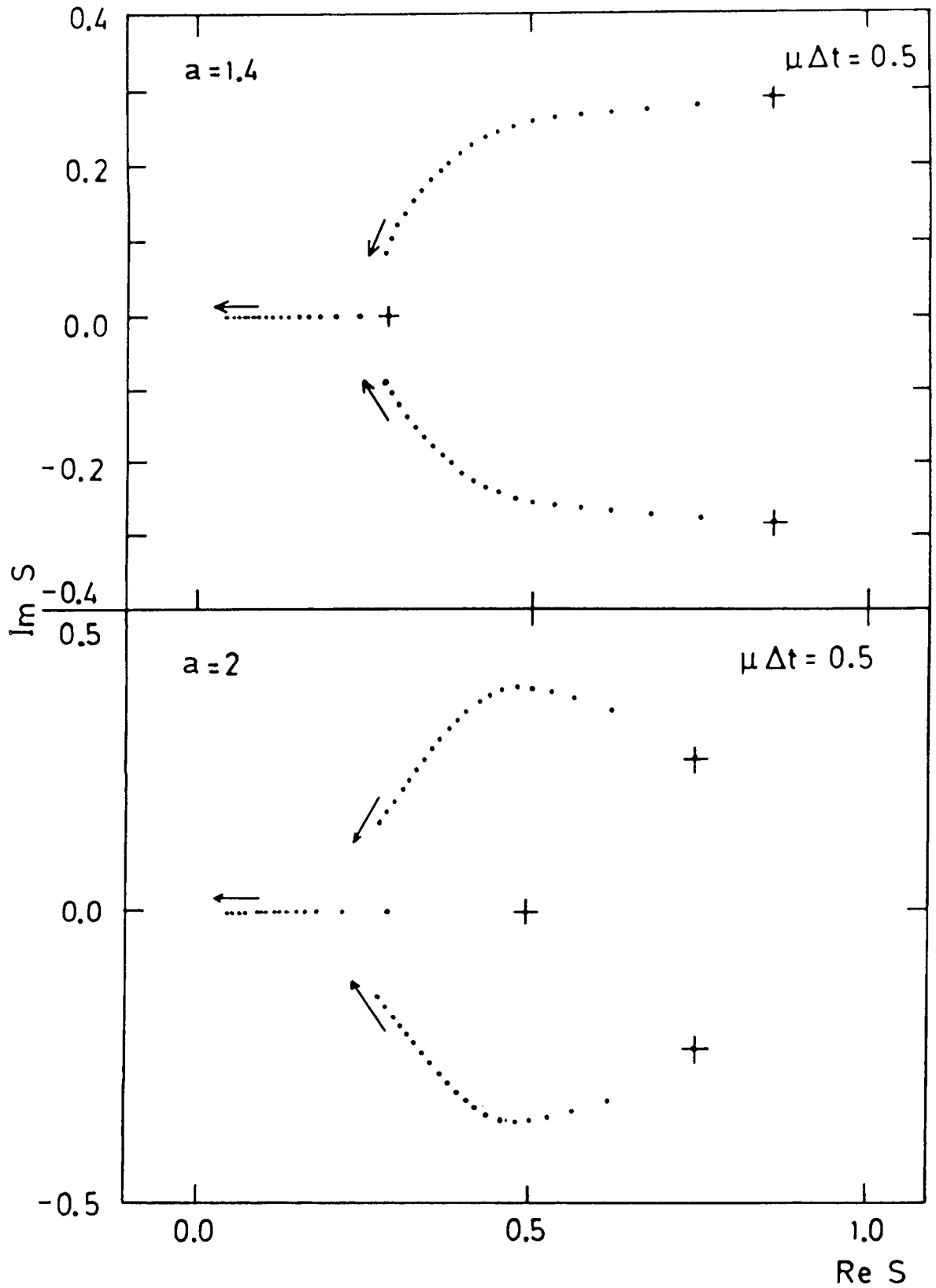


Figura 16. Imágenes estroboscópicas en el plano complejo  $s$  de los polos de  $G(s,t)$  para el modelo de Tjon y Wu con una condición inicial dada por (3.43) y (3.44) para dos valores distintos de  $a$ . La posición inicial está indicada con +.

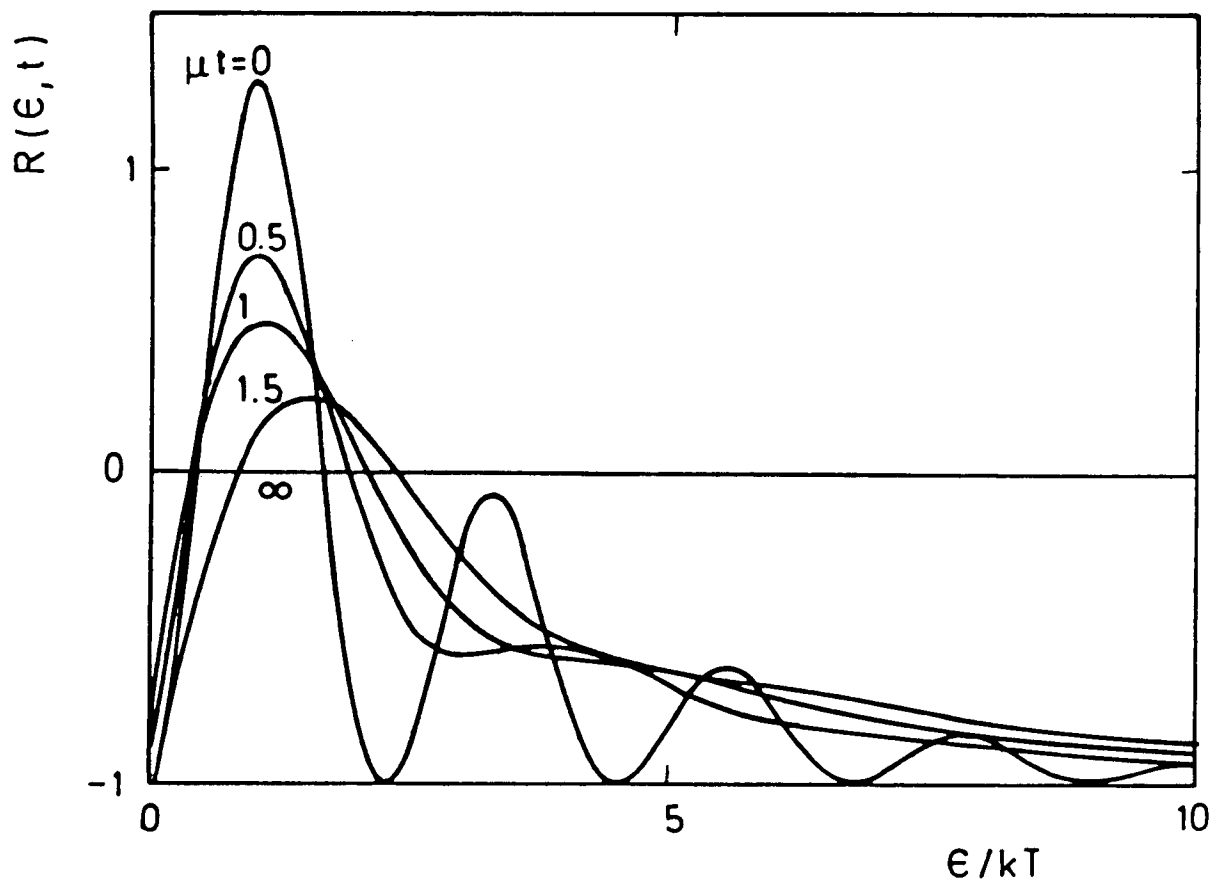


Figura 17. Desviación del equilibrio  $R(\epsilon, t)$  para el caso descrito en la figura 16 con  $\alpha = 1.4$ .

#### 4 - ECUACION DE BOLTZMANN ANISOTROPICA

---

Tanto las aplicaciones indicadas en la introducción, como la importancia intrínseca y el interés matemático del tema, explican el auge que en los últimos ocho años ha alcanzado el estudio de la resolución exacta de la ecuación de Boltzmann. Este estudio se ha desarrollado básicamente para el caso de distribuciones isotrópicas en impulso y espacialmente homogéneas. El caso inhomogéneo y/o anisotrópico se ha visto relegado debido a su dificultad. Es así como un problema aparentemente simple, como es la inyección de un haz de partículas monoenergético y de sección transversal estrecha en un gas diluido, no puede ser resuelto en base a dichos desarrollos recientes. En este caso las partículas que atraviesan el gas son las de mayor energía, y por ende son muy importantes los términos no lineales de la ecuación de Boltzmann. Este proceso, que puede considerarse como una primera aproximación al problema de la penetración de un haz de partículas en la materia, lleva a generalizar el estudio de la resolución exacta de la ecuación de Boltzmann para situaciones anisotrópicas e inhomogéneas. Al respecto mostraremos en este capítulo que el desarrollo de Laguerre (3.65) puede ser generalizado para incluir condiciones iniciales anisotrópicas en impulso (Hendriks y Nieuwenhuizen 1983). Este formalismo está íntimamente relacionado con el método de momentos ordinarios (relevantes en la hidrodinámica) de Ikenberry y Truesdell (1956) y con el método de los momentos polinomiales de Hermite desarrollado por Grad (1949). En este capítulo estudiamos la relajación al equilibrio de distribuciones inicialmente anisotrópicas para modelos de interacción de Maxwell. Nos

restringiremos al caso bidimensional en tanto que, además de ser más simple, es de esperar que presente casi todas (si no todas) las características peculiares del caso tridimensional general.

En el parágrafo 4.1 resolvemos la ecuación de Boltzmann linealizada, calculando las correspondientes autofunciones, en términos de las cuales hemos de desarrollar la función distribución. Los coeficientes de dicho desarrollo son funciones del tiempo a ser determinadas de un conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales. En 4.2 elaboramos un método numérico para resolver dicha familia de ecuaciones. En la siguiente sección utilizamos este método para calcular la evolución temporal de la función distribución para diferentes condiciones iniciales y modelos de interacción; demostrando que el formalismo desarrollado en este capítulo es adecuado para el estudio numérico de la ecuación de Boltzmann a no muy altas energías. En especial observamos, junto con el ya descrito fenómeno de Tjon, interesantes fenómenos transitorios a energías de orden térmico. Finalmente en 4.4 utilizamos la denominada simetría de Bobylev para generalizar el desarrollo introducido en el parágrafo 4.1 .

## 4.1 RESOLUCION DE LA ECUACION DE BOLTZMANN ANISOTROPICA

Consideremos la ecuación de Boltzmann transformada Fourier para modelos de Maxwell . Anotamos

$$\phi(\vec{k}, t) = \phi_0(k) [ 1 + \varphi(\vec{k}, t) ] \quad (4.1)$$

Si suponemos que la desviación respecto del equilibrio es pequeña podemos eliminar términos cuadráticos en  $\varphi(\vec{k}, t)$  resultando la denominada ecuación de Boltzmann linealizada

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{k}, t) = \eta \int \alpha(\hat{k} \cdot \hat{n}) [ \varphi(\frac{k}{2}(\hat{k} + \hat{n}), t) + \varphi(\frac{k}{2}(\hat{k} - \hat{n}), t) - \varphi(\vec{k}, t) - \varphi(0, t) ] d\hat{n} \quad (4.2)$$

Si escribimos  $\varphi(\vec{k}, t) = e^{-\Lambda t} \varphi(\vec{k})$  obtenemos el correspondiente problema de autovalores:

$$\Lambda \varphi(\vec{k}) = -\eta \int \alpha(\hat{k} \cdot \hat{n}) [ \varphi(\frac{k}{2}(\hat{k} + \hat{n})) + \varphi(\frac{k}{2}(\hat{k} - \hat{n})) - \varphi(\vec{k}) - \varphi(0) ] d\hat{n} \quad (4.3)$$

En el caso bidimensional ( $\nu = 1$ ), al cual nos restringiremos de aquí en adelante, la solución de este problema de autovalores está dada por

$$\varphi_{nq}(k) = \left(-\frac{1}{2}mkT k^2\right)^{\eta/2} e^{-i(n-2q)\beta} \quad (4.4a)$$

$$\Lambda_{nq} = \eta \int_0^{2\pi} \alpha(\cos\theta) [ 1 + \mathcal{J}_{n0} - e^{i(q-\frac{n}{2})\theta} \left( \cos^n \frac{\theta}{2} + e^{i(q+\frac{n}{2})\pi} \sin^n \frac{\theta}{2} \right) ] d\theta \quad (4.4b)$$

donde  $\beta$  es el ángulo polar de  $\vec{k}$ . Debido a las leyes de conservación del número de partículas, el impulso y la

energía, los parámetros complejos  $n$  y  $q$  deben verificar alguna de estas dos condiciones:

$$\text{Real}(n) > 2 \quad (4.5a)$$

$$n=2 \quad q=0, 2 \quad (4.5b)$$

Antitransformando Fourier la expresión (4.4a) obtenemos para la función distribución

$$f(p, t) = f_0(p) [1 + R(\epsilon, \theta, t)] \quad , \quad \epsilon = \frac{p^2}{2m} \quad (4.6)$$

las siguientes autofunciones

$$R_{nq}(\epsilon, \theta) = i \frac{1^{2q-n|+n} \Gamma(\frac{1^{2q-n|+n}}{2} + 1)}{\Gamma(1^{2q-n|+1})} \left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^{\frac{1^{2q-n|}}{2}} \cdot {}_1F_1\left(\frac{1^{2q-n|-n}}{2}; 1^{2q-n|+1}; \frac{\epsilon}{kT}\right) e^{i(2q-n)\theta} \quad (4.7)$$

donde  $\theta$  es el ángulo polar del impulso bidimensional  $\vec{p}$ . Cuando  $0 < q < n$ ,  $q$  y  $n$  enteros, las autofunciones  $R_{nq}$  pueden expresarse en términos de los polinomios generalizados de Laguerre

$$R_{nq}(\epsilon, \theta) = (-)^{\frac{n+1^{2q-n|}}{2}} \frac{1^{2q-n|}}{(\frac{n-1^{2q-n|}}{2})!} \left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^{\frac{1^{2q-n|}}{2}} L_{\frac{n-1^{2q-n|}}{2}}^{\frac{1^{2q-n|}}{2}} \left(\frac{\epsilon}{kT}\right) e^{i(2q-n)\theta} \quad (4.8)$$

Estas autofunciones  $R_{nq}$  dan origen a soluciones de la ecuación de Boltzmann linealizada que decrecen exponencialmente cuando  $\epsilon \gg kT$  y que, por ende, pertenecen al espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^2)$  de norma (3.9). Cuando no se dá la situación anterior, el comportamiento de las soluciones para  $\epsilon \gg kT$  es de decaimiento potencial

$$f_0(p) R_{nq}(\epsilon, \theta) \approx \frac{\eta(-)^{1^{2q-n|}}}{2\pi m kT} \frac{1}{\Gamma(\frac{1^{2q-n|-n}}{2})} \left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^{-\left(\frac{n}{2}+1\right)} e^{i(2q-n)\theta} \quad (4.9)$$

con lo cual se encuentran fuera del espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^2)$ .

Supondremos que la solución general de la ecuación de Boltzmann linealizada es una guía adecuada para la resolución del problema no lineal. Nos restringiremos a buscar la solución general perteneciente al espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^2)$ , para lo cual escribimos formalmente:

$$\phi(\vec{R}, t) = \phi_0(R) \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{q=0}^n C_{nq}(t) \varphi_{nq}(\vec{R}) \right] \quad (4.10)$$

$$f(\vec{p}, t) = f_0(p) \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{q=0}^n C_{nq}(t) R_{nq}(\epsilon, \theta) \right] \quad (4.11)$$

donde  $\varphi_{nq}(\vec{R})$  y  $R_{nq}(\epsilon, \theta)$  son las autofunciones del problema de autovalores correspondiente a la ecuación de Boltzmann linealizada:

$$\varphi_{nq}(\vec{R}) = \left( -\frac{1}{2} m k T k^2 \right)^{n/2} e^{i(2q-n)\theta} \quad (4.12)$$

$$R_{nq}(\epsilon, \theta) = (-1)^{\frac{n+|2q-n|}{2}} \left( \frac{n-|2q-n|}{2} \right)! \left( \frac{\epsilon}{kT} \right)^{\frac{|2q-n|}{2}} L_{\frac{n-|2q-n|}{2}}^{|2q-n|} \left( \frac{\epsilon}{kT} \right) e^{i(2q-n)\theta} \quad (4.13)$$

Las funciones  $R_{nq}(\epsilon, \theta)$  forman un conjunto completo en el espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^2)$ , y son ortogonales en el siguiente sentido:

$$\int f_0(p) R_{nq}(\epsilon, \theta) R_{n'q'}(\epsilon, \theta) d\vec{p} = \eta \left( \frac{n+|2q-n|}{2} \right)! \left( \frac{n'-|2q'-n'|}{2} \right)! \delta_{nn'} \delta_{qq'} \quad (4.14)$$

de manera tal que los coeficientes  $C_{nq}(t)$  son momentos generalizados de la función distribución  $f(\vec{p}, t)$ .

$$C_{nq}(t) = \frac{1}{\left( \frac{n+|2q-n|}{2} \right)! \left( \frac{n-|2q-n|}{2} \right)!} \frac{1}{\eta} \int f(\vec{p}, t) R_{nq}(\epsilon, \theta) d\vec{p} \quad (4.15)$$

Estos momentos  $C_{nq}(t)$  tienen una forma asintótica muy simple

$$C_{nq}(t) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \delta_{n0} \quad (4.16)$$

Y en tanto que la función distribución  $f(\vec{p}, t)$  es real

$$C_{nq}(t) = C_{n-n-q}^*(t) \quad (4.17)$$

Por último las leyes de conservación del número de partículas, el impulso y la energía imponen sobre los momentos  $C_{nq}(t)$  las siguientes restricciones

$$C_{10}(t) = C_{11}(t) = C_{21}(t) = 0 \quad (4.18)$$

Reemplazando el desarrollo (4.10) de la función distribución transformada Fourier  $\phi(\vec{R}, t)$  en la ecuación de Boltzmann obtenemos el siguiente conjunto infinito de ecuaciones para los momentos  $C_{nq}(t)$ .

$$\left[ \frac{d}{dt} + \Lambda_{Nq} \right] C_{Nq}(t) = \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{q=q_0}^{q_1} (-)^q \mu_n^{Nq} C_{nq}(t) C_{N-n, Q-q}(t) \quad (4.19)$$

$$q_0 = \max(0, Q - N + n) \quad (4.20a)$$

$$q_1 = \min(n, Q) \quad (4.20b)$$

donde los coeficientes reales  $\mu_n^{Nq}$  están dados por:

$$\mu_n^{Nq} = \eta \int_0^{2\pi} \alpha(\cos \theta) \left[ \cos \frac{\theta}{2} \right]^{N-n} \left[ \sin \frac{\theta}{2} \right]^n \exp\left\{ i \left[ \left( Q - \frac{N}{2} \right) \theta + n \frac{\pi}{2} \right] \right\} d\theta \quad (4.21)$$

y  $\Lambda_{Nq}$  son los autovalores correspondientes a la ecuación de Boltzmann linealizada

$$\begin{aligned} \Lambda_{Nq} &= \mu_0^{00} (1 + d_{N0}) - \mu_0^{Nq} - (-)^q \mu_N^{Nq} = \\ &= \eta \int_0^{2\pi} \alpha(\cos \theta) \left[ 1 + d_{N0} - e^{i \left( Q - \frac{N}{2} \right) \theta} \left( \cos \frac{\theta}{2} + e^{i \left( Q + \frac{N}{2} \right) \pi} \sin \frac{\theta}{2} \right) \right] d\theta \end{aligned} \quad (4.22)$$

El sistema de ecuaciones (4.19) puede ser resuelto en forma secuencial dados los valores iniciales  $C_{nq}(0)$  de todos los momentos. Formalmente su solución está dada por:

$$C_{10}(t) = C_{11}(t) = 0 \quad (4.23a)$$

$$C_{20}(t) = C_{20}(0) e^{-\Lambda_{20} t} \quad C_{21}(t) = 0 \quad (4.23b)$$

$$C_{3Q}(t) = C_{3Q}(0) e^{-\Lambda_{3Q}t} \quad (4.23c)$$

$$C_{NQ}(t) = C_{NQ}(0) e^{-\Lambda_{NQ}t} + \int_0^t e^{-\Lambda_{NQ}(t-\mathcal{T})} \sum_{n=2}^{N-2} \sum_{q=q_0}^{q_1} (-)^q \mu_n^{NQ} C_{nq}(\mathcal{T}) C_{N-nQ-q}(\mathcal{T}) d\mathcal{T} \quad (4.23d)$$

Esta expresión, junto con el desarrollo en momentos (4.11), representa la solución general de la ecuación de Boltzmann para modelos de Maxwell con condiciones iniciales no isotrópicas  $f(\vec{p}, 0)$  pertenecientes al espacio de Hilbert  $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^2)$ .

Para condiciones iniciales isotrópicas en impulso el desarrollo (4.11) se reduce a la bien conocida serie de Laguerre (3.65) del caso bidimensional

$$f(p, t) = f_0(p) \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} C_n(t) L_n\left(\frac{p^2}{2mkT}\right) \right] \quad (4.24)$$

donde los momentos  $C_n(t)$  satisfacen el conjunto infinito de ecuaciones (3.71) con

$$C_n(t) = \frac{(-1)^n}{n!} C_{2nn}(t) \quad (4.25)$$

$$\Lambda_n = \Lambda_{2nn} \quad (4.26)$$

$$\mu_{Nn} = (-1)^n \binom{N}{n} \mu_n^{2Nn} \quad (4.27)$$

Comparando las ecuaciones (4.21) y (3.72) advertimos que los coeficientes anisotrópicos  $\mu_n^{NQ}$  pueden calcularse a partir de los correspondientes coeficientes  $\mu_{Nn}$  del caso isotrópico en base a la siguiente relación:

$$\mu_n^{NQ} = [sg(2Q-N)]^n \sum_{m=m_0}^{m_1} \binom{12Q-N}{2m-n} \left(\frac{N+12Q-N}{2}\right)^{-1} (-1)^m \mu_{\frac{N+12Q-N}{2}, m} \quad (4.28a)$$

$$m_0 = \left[ \frac{n+1}{2} \right] \quad (4.28b)$$

$$m_1 = \left[ \frac{12Q-N+n}{2} \right] \quad (4.28c)$$

La importancia de esta ecuación radica en que nos permite calcular los coeficientes  $\mu_n^{NQ}$  a partir de los coeficientes  $\mu_{Nn}$  del caso isotrópico, los cuales son conocidos explícitamente para un gran número de modelos de Maxwell.

De la expresión (4.21) obtenemos la siguiente propiedad de simetría:

$$\mu_n^{NQ} = (-)^n \mu_n^{N N-Q} \quad (4.29)$$

Además, si la sección eficaz de colisión presenta una simetría especial del tipo  $\alpha(\cos(\theta)) = \alpha(-\cos(\theta))$ , lo cual efectivamente ocurre para los modelos de Maxwell estudiados en la sección 3.5, entonces los coeficientes  $\mu_n^{NQ}$  presentan otra simetría

$$\mu_n^{NQ} = (-)^Q \mu_{N-n}^{NQ} \quad (4.30)$$

Utilizando la propiedad de simetría (4.29) se puede demostrar, en base a la expresión (4.22), que los autovalores  $\Lambda_{NQ}$  satisfacen la siguiente relación

$$\Lambda_{NQ} = \Lambda_{N N-Q} \quad (4.31)$$

Estos autovalores pueden escribirse en términos de los polinomios de Chebyshev de primera especie (Abramowitz y Stegun 1972)

$$\Lambda_{NQ} = \eta \int_0^{2\pi} \alpha(\cos \theta) \left[ 1 + \delta_{N0} - (\cos \frac{\theta}{2})^N T_{12Q-N1}(\cos \frac{\theta}{2}) - (\sin \frac{\theta}{2})^N T_{12Q-N1}(\sin \frac{\theta}{2}) \right] d\theta \quad (4.32)$$

Utilizando la expresión explícita de los polinomios de Chebyshev (Abramowitz y Stegun 1972)

$$T_n(x) = \sum_{m=0}^{[n/2]} a_{nm} X^{n-2m} \quad (4.33a)$$

$$a_{nm} = (-)^m \frac{n! \Gamma(n-m)}{m! (n-2m)!} 2^{n-2m-1} \quad (4.33b)$$

es posible relacionar los autovalores  $\Lambda_{NQ}$  con los correspondientes autovalores del caso isotrópico  $\Lambda_N$

$$\Lambda_{NQ} = \sum_{m=0}^{[12Q-N+1/2]} a_{12Q-N+1, m} \Lambda_{\frac{12Q-N+1}{2}-m} \quad (4.34)$$

A partir de esta relación es fácil demostrar que:

$$\Lambda_{N[\frac{N}{2}]} = \Lambda_{N[\frac{N+1}{2}]} = \Lambda_{[\frac{N+1}{2}]} \quad (4.35)$$

Además, utilizando la relación de recurrencia para los polinomios de Chebyshev, obtenemos la siguiente relación de recurrencia para los autovalores

$$2 \Lambda_{N+1Q} = \Lambda_{NQ} + \Lambda_{N, Q-1} \quad ; \quad Q \neq 0, N+1 \quad (4.36)$$

Estas dos últimas ecuaciones son de gran importancia ya que nos proveen de un método para calcular los coeficientes  $\Lambda_{NQ}$  por recurrencia a partir de los coeficientes  $\Lambda_N$  del caso isotrópico.

Para el modelo de Tjon y Wu (3.77), usamos la relación de recurrencia anterior para calcular los primeros autovalores del caso anisotrópico obteniendo los resultados que se indican en la tabla I. Observando esta tabla, llama la atención que

$$3 \Lambda_{31} = 3 \Lambda_{32} = 3 \Lambda_{42} = 2 \Lambda_{52} = 2 \Lambda_{53} = 2 \Lambda_{63} \quad (4.37)$$

Esta relación es independiente del modelo de Maxwell que estemos considerando, y por ende no es accidental. En

efecto, puede verificarse que es equivalente a la importante degeneración  $2\Lambda_3 = 3\Lambda_2$  del caso isotrópico.

0	0											
1	0	0										
2	2/3	0	2/3									
3	1	1/3	1/3	1								
4	17/15	2/3	1/3	2/3	17/15							
5	7/6	9/10	1/2	1/2	9/10	7/6						
6	81/70	31/30	7/10	1/2	7/10	31/30	81/70					
7	17/15	23/21	13/15	3/5	3/5	13/15	23/21	17/15				
8	349/315	39/35	103/105	11/15	3/5	11/15	103/105	39/35	349/315			
9	38/35	10/9	22/21	18/21	2/3	2/3	18/21	22/21	10/9	38/35		
10	740/693	346/315	349/315	20/21	16/21	2/3	16/21	20/21	349/315	346/315	740/693	
N/B	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	

Tabla I. Autovalores  $\Lambda_{nq}/\mu$  del operador linealizado de colisión para el modelo de Tjon y Wu.

#### 4.2 RESOLUCION NUMERICA DE LA ECUACION DE BOLTZMANN ANISOTROPICA

La importancia práctica del desarrollo de Laguerre (4.11) parece ser algo limitada: En principio todos los momentos  $C_{Nq}$  pueden ser evaluados para valores arbitrariamente grandes de  $N$ , lo que permite obtener una aproximación para  $f(\vec{p}, t)$  en la forma de una serie truncada en cierto orden  $N_0$ . Sin embargo, al igual que en el caso isotrópico, el número de términos en  $C_{Nq}(t)$  crece muy rápidamente con  $N$ , por lo cual, mientras los momentos de orden bajo pueden ser evaluados explícitamente con relativa facilidad, el proceso se vuelve difícil y tedioso al aumentar  $N$ . Esta imposibilidad práctica de lograr altos órdenes de truncamiento impide obtener una descripción razonablemente precisa de la relajación a altas energías, ya que  $R_{Nq} \sim (\epsilon/kT)^N$  para  $\epsilon \gg kT$ . Por otra parte, aunque nos limitemos al rango de bajas energías, debemos tener en cuenta otra dificultad relacionada con la resolución de las ecuaciones (4.23): Cada una de ellas incluye una integración temporal que, estando acoplada con otras integrales en las restantes ecuaciones, resulta ser de muy difícil evaluación numérica (Turchetti y Paolilli 1982). Este problema puede ser evitado por medio de un algoritmo que permite operar con los momentos  $C_{Nq}(t)$  como expresiones algebraicas. La clave de este método radica en que estos momentos pueden ser escritos en la forma

$$C_{Nq}(t) = \sum_n a_n e^{-\lambda_n t} \quad (4.38)$$

con lo cual es posible definir formalmente

$$C_{Nq}(t) \equiv \begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_s \\ a_1 & a_2 & \dots & a_s \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

donde, sin pérdida de generalidad, exigimos que  $\lambda_n < \lambda_{n+1}$ . Luego las diferentes operaciones entre los momentos  $C_{nq}$  pueden hacerse corresponder con operaciones entre las matrices asociadas. Por ejemplo, la integración se reduce a una simple operación algebraica

$$\int_0^t C_{nq}(\tau) d\tau \equiv \begin{pmatrix} 0 & \lambda_1 & \dots & \lambda_s \\ \sum_{j=1}^s \frac{a_j}{\lambda_j} & -\frac{a_1}{\lambda_1} & \dots & -\frac{a_s}{\lambda_s} \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

Este sencillo pero poderoso formalismo permite la resolución numérica de las ecuaciones de momentos y con ello el cálculo de la correspondiente serie truncada para  $f(\vec{p}, t)$ , alcanzando órdenes  $N_0 = 30$  o mayores (lo cual es equivalente a un total de más de 500 términos en el desarrollo (4.11)).

El modo BKW corresponde a una función distribución homogénea e isotrópica, pero, ya que es la única solución exacta no trivial que conocemos, hemos de utilizarla para examinar la precisión de los resultados numéricos obtenidos. Como primer paso evaluamos el error relativo  $\xi_c$  en el cálculo de los momentos  $C_{nq}(t)$  para una solución BKW con  $\sigma = 0.25$  en el modelo de Tjon y Wu. Obtuvimos valores menores que  $\xi_c \cong 10^{-12} \%$ , siendo atribuibles a errores de redondeo. A continuación calculamos el error relativo de la solución numérica para varios valores de energía y tiempo. En las figuras 18 y 19 mostramos los resultados obtenidos para un orden de truncamiento  $N_0 = 12$ , valor muy por debajo de las posibilidades del método numérico. Vemos que aún para  $\mu t = 0$  el error es menor que 1 % para energías por debajo de  $\epsilon = 20$  kT. Notamos además que el rango de valores de energía dentro del cual es posible obtener una dada precisión aumenta al aumentar el tiempo, alcanzando energías del orden de  $\epsilon = 100$  kT con errores menores al 1 % para tiempos superiores a  $\mu t = 20$ . Estos resultados son de suma importancia, ya que muestran que el rango de energías donde

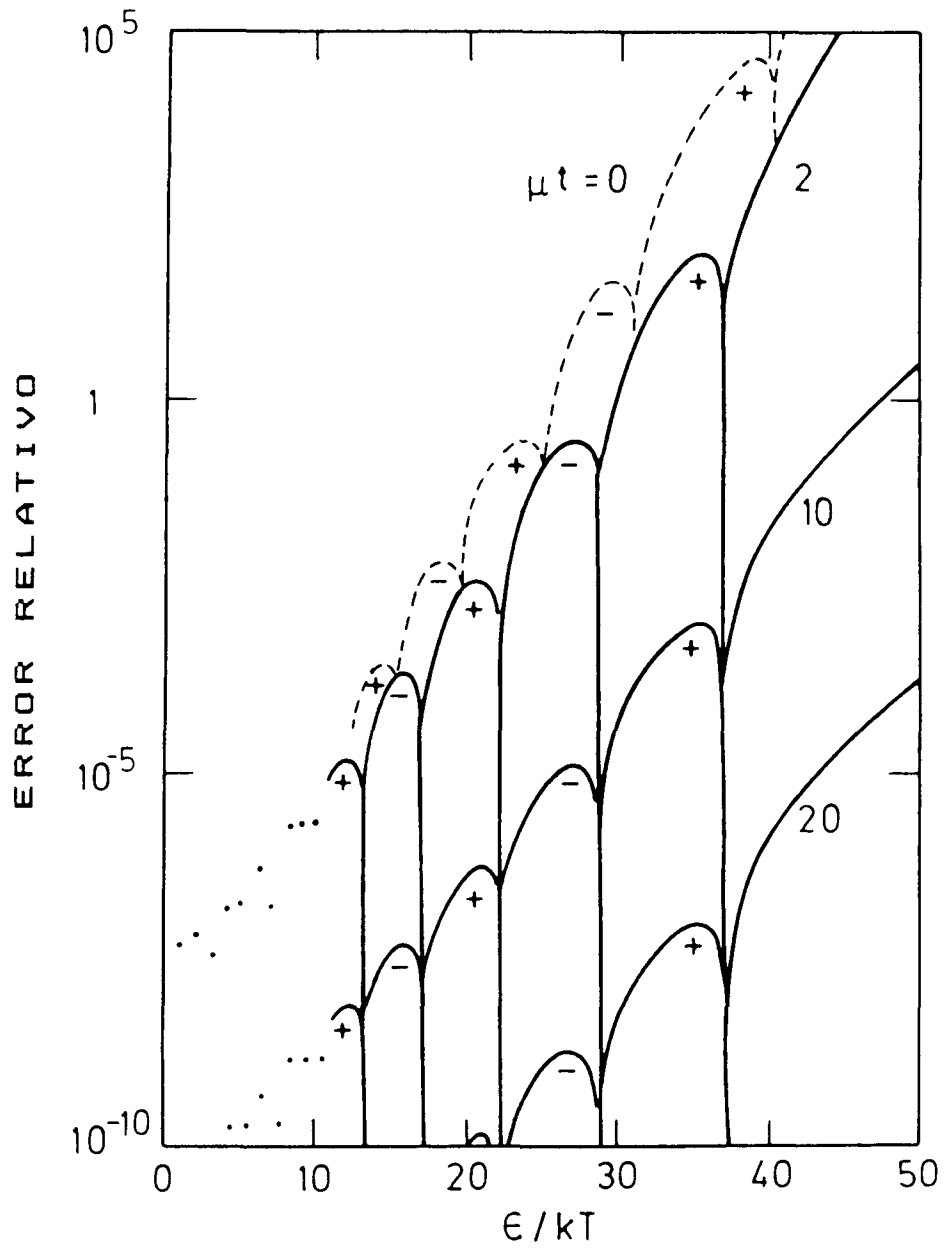


Figura 18. Error relativo en la evaluación numérica del modo BKW con  $\sigma(0) = 0.25$  para el modelo de Tjon y Wu. El orden de truncamiento es  $N_0 = 12$ .

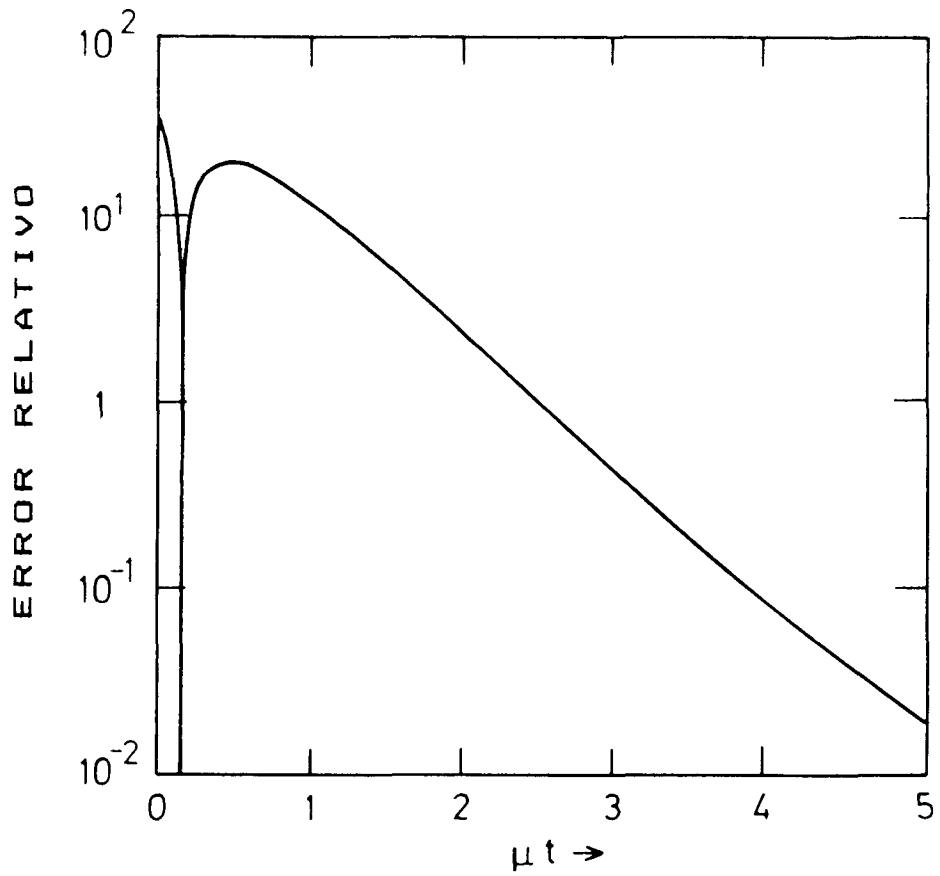


Figura 19. Como en la figura 18 para una energía fija  $\epsilon = 30 \text{ kT}$

se puede lograr una precisión aceptable alcanza valores que están uno o dos órdenes de magnitud por encima de las energías térmicas  $\epsilon \sim kT$ , aumentando casi linealmente al aumentar el tiempo. Por supuesto que esta única comparación con una solución isotrópica no basta para dar un certificado de validez al método numérico, pero lamentablemente no disponemos de otras soluciones exactas no triviales con las cuales comparar nuestros resultados. Estos cálculos fueron repetidos para otros modelos de Maxwell y otros valores de la constante  $\sigma$  ( $\sigma = 0.1$  y  $\sigma = 0.4$ ) con similares resultados.

Intentemos realizar una estimación del error cometido al truncar el desarrollo de Laguerre en cierto orden  $N_0$ . Despreciando errores de redondeo tenemos que:

$$\begin{aligned} \Delta_{N_0} &= |R(\epsilon, \theta, t) - R_{N_0}(\epsilon, \theta, t)| = \\ &= \left| \sum_{n=N_0+1}^{\infty} \sum_{q=0}^n C_{nq}(t) R_{nq}(\epsilon, \theta) \right| \end{aligned} \quad (4.41)$$

Supondremos que el acercamiento al equilibrio es suficientemente uniforme como para que sea válida una aproximación linealizada de los momentos  $C_{nq}(t)$ . Luego

$$\Delta_{N_0} \approx \left| \sum_{n=N_0+1}^{\infty} \sum_{q=0}^n C_{nq}(0) e^{-\Lambda_{nq}t} R_{nq}(\epsilon, \theta) \right| \quad (4.42)$$

Si para pequeños ángulos de dispersión  $\alpha(\cos(\theta)) \sim |\text{sen}(\theta)|^\xi$  con  $\xi > 0$ , entonces los autovalores tienden rápidamente a un límite bien definido  $1/\tau$  cuando  $n$  tiende a infinito (Ernst 1981). A dicho factor  $\tau$  lo denominamos tiempo característico de relajación. Obtenemos finalmente

$$\Delta_{N_0} \approx e^{-t/\tau} |R(\epsilon, \theta, 0) - R_{N_0}(\epsilon, \theta, 0)| \quad (4.43)$$

Vemos que, tal como habíamos observado con anterioridad, el error de truncamiento decae exponencialmente con el tiempo. Sin embargo en muchas situaciones el acercamiento al equilibrio es no uniforme, en cuyo caso el razonamiento anterior

no es aplicable. El modo BKW presenta tal característica. Aún así es factible suponer que la expresión anterior dá una aproximación razonable para el error de truncamiento. Naturalmente que su aplicabilidad práctica quedará limitada por la existencia de algún criterio para la elección del tiempo de relajación  $\mathcal{T}$  en función de la energía y el orden de truncamiento.

### 4.3 SOLUCIONES ANISOTROPICAS SIMPLES

Barnsley y Cornille (1980) introdujeron una clase de soluciones isotrópicas, que denominaron soluciones positivas fundamentales, caracterizadas por la propiedad de que en el instante inicial uno sólo de los momentos del desarrollo de Laguerre fuese no nulo. La motivación de Barnsley y Cornille para elegir esta clase de condiciones iniciales es, además de la obvia simplificación que introduce en las ecuaciones de momentos, el que su positividad fuese fácilmente controlable. Como veremos es posible definir un tipo similar de soluciones en el caso anisotrópico bidimensional.

El principal problema que se presenta al definir una distribución inicial dada por un desarrollo en momentos truncado

$$R(\epsilon, \theta, 0) = \sum_{n=1}^N \sum_{q=0}^n C_{nq}(0) R_{nq}(\epsilon, \theta) \quad (4.44)$$

es controlar que dicho desarrollo dé origen a una función distribución positiva, es decir tal que la desviación respecto del equilibrio  $R(\epsilon, \theta, 0)$  sea mayor o igual que -1

$$R(\epsilon, \theta, 0) \geq -1 \quad (4.45)$$

Tal como vimos en un principio si la solución de la ecuación de Boltzmann es positiva en el instante inicial, permanecerá positiva para todo tiempo  $t$  posterior. En la cola de altas energías y en tanto que  $R_{nq}(\epsilon, \theta) \sim (\epsilon/kT)^n$  tenemos que:

$$R(\epsilon, \theta, 0) \approx \left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^N \left[ \sum_{q=0}^N C_{Nq}(0) e^{i(2q-N)\theta} \right] ; \epsilon \gg kT \quad (4.46)$$

Para que esta solución verifique la condición de positividad (4.45) es necesario que el término entre corchetes en (4.46)

sea positivo, lo cual es posible sólo si

$$\boxed{N \text{ es par}}$$

(4.47)

En ese caso hay un término independiente del ángulo que debe verificar

$$C_{N\frac{N}{2}}(0) \geq \frac{1}{2} \sum_{q=0}^N |C_{Nq}(0)| \quad (4.48)$$

Estas dos últimas restricciones aseguran únicamente que la cola de altas energías de la función distribución será positiva. Pero, en tanto que  $R_{nq}(\epsilon, t)$  tiene como función de la energía  $(n-1/2q-n)/2$  ceros, no nos dicen nada acerca de la positividad de la función distribución a energías más bajas. En otras palabras, las dos condiciones anteriores son necesarias pero no suficientes para que la función distribución sea positiva. Sin embargo sabemos que en un principio "siempre" podremos elegir valores de  $C_{nq}$  tales que  $f(\epsilon, \theta, 0) \geq 0$  para toda energía  $\epsilon > 0$ . En efecto, cuando todos los momentos  $C_{nq}$  son nulos  $R(\epsilon, \theta, 0)$  se reduce a cero y por lo tanto siempre será posible encontrar valores de  $C_{nq}$  suficientemente chicos como para que se cumpla la condición (4.45). El caso más simple es aquel donde, además del término  $C_{N\frac{N}{2}}$  existe un único momento  $C_{nq}$  no nulo con  $n \leq N$ .

$$R(\epsilon, \theta, 0) = C_{N\frac{N}{2}}(0) R_{N\frac{N}{2}}(\epsilon) + C_{nq}(0) [R_{nq}(\epsilon, \theta) + R_{nq}^*(\epsilon, \theta)] \quad (4.49)$$

Arbitrariamente hemos elegido a  $C_{nq}(0)$  real y positivo. Esto no quita generalidad a la condición inicial anterior pues se trata a lo sumo de una fase eliminable con una nueva elección del origen del ángulo  $\theta$ . La restricción (4.48) sobre los momentos se anota ahora

$$C_{N\frac{N}{2}}(0) \geq 2 \delta_{Nn} C_{nq}(0) \quad (4.50)$$

La función distribución anterior, que presenta gran similitud con la solución positiva fundamental del caso isotrópico

(a la cual se reduce si  $C_{nq}(0) = 0$ ), es la condición inicial anisotrópica más sencilla. La denominaremos "solución anisotrópica simple". La restricción (4.50) sobre los momentos nos indica que en las soluciones anisotrópicas simples la cola de altas energías está inicialmente sobrepoblada. Vemos además que esta solución posee un eje de simetría de rotación de orden  $|2q-n|$  en el origen, v.g. la simetría de la función  $\exp [i(2q-n)\theta]$  correspondiente al término  $R_{nq}(\epsilon, \theta)$ . Ahora bien, la evolución temporal de la función distribución debe ser tal que conserve su simetría al transcurrir el tiempo, por lo cual sólo podrán poblarse momentos  $C_{n'q'}(t)$  tales que  $|2q'-n'|$  sea nulo o múltiplo de  $|2q-n|$ . La ecuación de momentos nos dice también que, en tanto que en el instante inicial todos los momentos de la solución anisotrópica simple son reales, permanecerán reales al transcurrir el tiempo. Esta propiedad está íntimamente relacionada con el hecho de que la función distribución conserve una simetría de reflexión respecto de una línea por el origen al transcurrir el tiempo.

Para  $N = 2$  no existe tal tipo de soluciones en tanto que  $C_{21}(t) = 0$ . Para  $N = 4$ , en cambio, es posible hallar varias de estas soluciones. Por ejemplo la dada por

$$R(\epsilon, \theta, 0) = 2C_{42}(0)L_2^0\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) - 2C_{41}(0)L_1^2\left(\frac{\epsilon}{kT}\right)\frac{\epsilon}{kT}\cos(2\theta) \quad (4.51)$$

que es un polinomio de segundo grado en la energía. Para asegurarnos de su positividad pedimos, junto con la restricción (4.50), que el discriminante de  $1+R(\epsilon, \theta, 0)$  como función de  $\epsilon$  sea negativo para todo ángulo  $\theta$ . Un conjunto de valores iniciales para los momentos que verifica estas condiciones es, por ejemplo,

$$C_{41}(0) = 0.04 \quad C_{42}(0) = 0.16 \quad (4.52)$$

que da origen a la distribución inicial mostrada en la figura 20. Esta distribución anisotrópica simple presenta

un anillo subpoblado en  $1 < \epsilon/kT < 4$ . Su evolución temporal fue calculada para el modelo de Tjon y Wu en base al desarrollo en serie de Laguerre truncado en  $N_0 = 32$ . Pequeñas variaciones del índice de corte  $N_0$  no alteran en forma perceptible los resultados obtenidos, lo cual indica que la convergencia de la serie de Laguerre es muy buena en este caso particular. Para  $\theta = 0^\circ$  la función distribución muestra un acercamiento monótono al equilibrio. Sin embargo un interesante fenómeno de relajación ocurre para  $\theta = 90^\circ$ . A medida que transcurre el tiempo las partículas de la zona de altas energías invaden la región subpoblada dando lugar a un efecto de sobrepoblación transitoria a energías de orden térmico. Este "efecto de proximidad" (Brey et al. 1984b) fue observado inicialmente por Barnsley y Cornille (1980) para una solución positiva fundamental isotrópica. Este efecto parece ser de un interés físico muy limitado en vista de su pequeña magnitud y su localización en energía (Barnsley y Turchetti 1981). Sin embargo es importante destacar que desde un punto de vista práctico este efecto de proximidad involucra  $\sim 10^4$  más partículas y una energía neta  $\sim 10^2$  mayor que el efecto Tjon.

Las soluciones anisotrópicas simples son, en virtud de su sencillez, sumamente adecuadas para analizar numéricamente la relajación al equilibrio de la solución de la ecuación de Boltzmann no lineal. El valor de la función distribución a un dado ángulo y una dada energía puede tender al estado de equilibrio en forma monótona, o también presentar oscilaciones alrededor del mismo. Estos procesos de relajación monótona, subpoblación y sobrepoblación transitoria pueden ocurrir simultáneamente para una dada función distribución inicial, e inclusive para una misma energía a diferentes ángulos, tal como puede verse en la figura 22 para una condición inicial

$$R(\epsilon, \theta, 0) = -\frac{2}{73} \left[ 6L_3^0\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) - \left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^{1/2} L_1^1\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) \cos(\theta) + \frac{\epsilon}{kT} L_1^2\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) \cos(2\theta) \right] \quad (4.53)$$

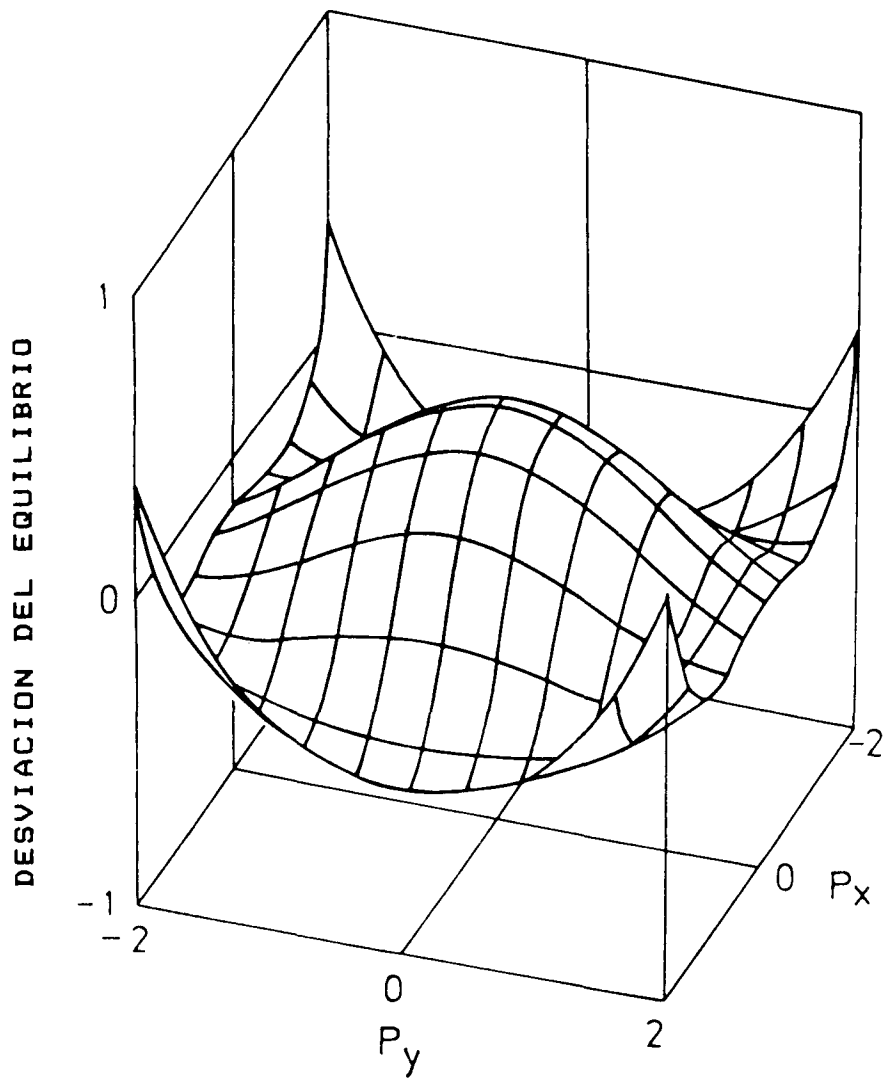


Figura 20. Desviación del equilibrio en el instante inicial  $R(\vec{p}, 0)$  para la solución anisotrópica simple dada por (4.51) y (4.52). El impulso se ha representado en unidades reducidas  $\vec{p} / \sqrt{m k T}$ .

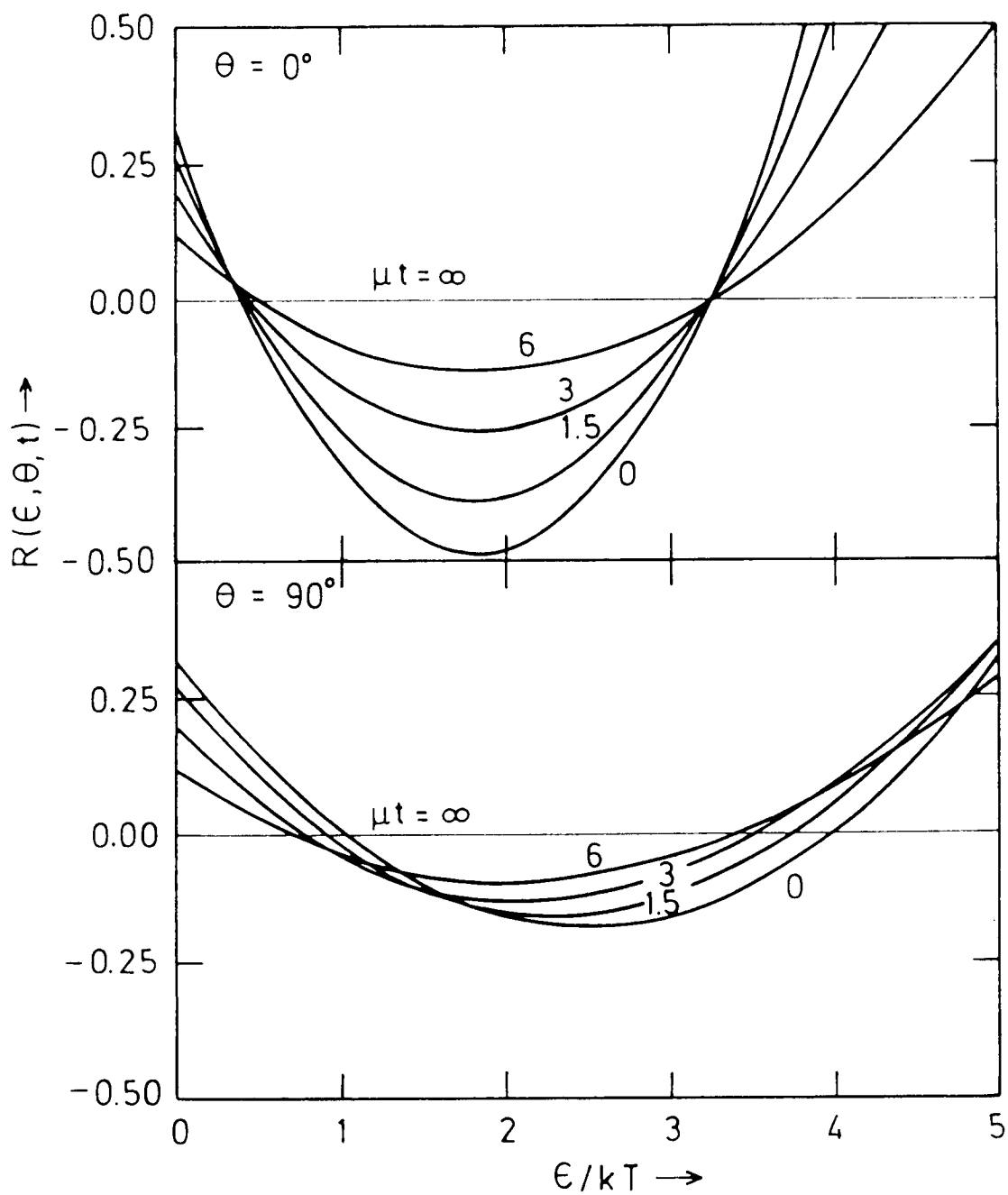


Figura 21. Desviación del equilibrio  $R(\epsilon, \theta, t)$  para el caso descrito en la figura 20 en el modelo de Tjon y Wu.

Para  $\epsilon = 6.2 kT$  y  $\theta = 125^\circ$  el valor de la función distribución inicialmente por debajo del valor de equilibrio crece rápidamente generando una sobrepoblación transitoria, para finalmente tender a la distribución de Maxwell por arriba. En cambio Para  $\theta = 0^\circ$  observamos el efecto opuesto: la función distribución se vuelve más pequeña que el valor de equilibrio para tender a él por debajo. Por último se observan procesos de relajación monótona por abajo y por arriba para  $\theta = 90^\circ$  y  $\theta = 180^\circ$  respectivamente.

Estos efectos simultáneos de decaimiento monótono y de transitorios subpoblados y sobrepoblados hablan claramente de la complejidad creciente de las características de los procesos de relajación en el caso anisotrópico respecto del relativamente simple caso isotrópico. Vemos además que no es necesario ir a valores de energía muy altos para observar estos fenómenos transitorios. En los casos indicados en las figuras tales efectos se observan a energías en el rango térmico.

Es muy importante tratar de entender como es que estos efectos transitorios dependen de la preparación de la distribución inicial. Este problema puede ser analizado en base al desarrollo de Laguerre de la función distribución. Consideremos valores fijos de la energía y del ángulo. Luego de un tiempo suficientemente largo los términos dominantes en dicho desarrollo son los de menor autovalor; o sea, en virtud de la degeneración (4.37),

$$R(\epsilon, \theta, t) \approx e^{-\Lambda_{31}t} \left[ 2 C_{42}(0) L_2^0\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) + (C_{31}(0)e^{i\theta} + C_{31}^*(0)e^{-i\theta}) \left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^{1/2} L_1^1\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) \right] \quad (4.54)$$

Vemos así que el estado inicial determina el acercamiento al equilibrio dependiendo del signo de la función entre corchetes para los valores indicados de energía y ángulo. Cuando el valor de energía que estamos analizando está muy por encima del orden térmico  $\epsilon \gg kT$

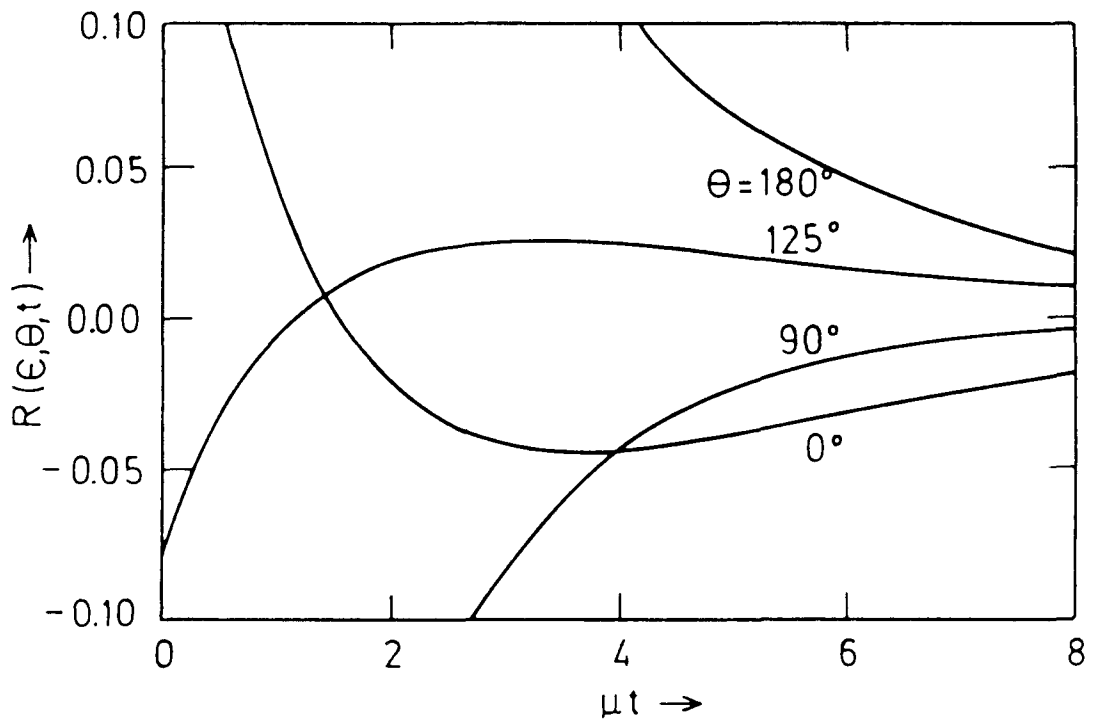


Figura 22. Evolución temporal de la desviación del equilibrio  $R(\epsilon, \theta, t)$  para una energía  $\epsilon = 6.2 \text{ kT}$  y distintos valores del ángulo en el modelo de Tjon y Wu. La condición inicial está dada por (4.53).

$$R(\epsilon, \theta, t) \approx e^{-\Lambda_{31}t} C_{42}(0) \left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^2 \quad (4.55)$$

y obtenemos el conocido criterio de Hauge (1979) y Alexanian (1979) del caso isotrópico. A grandes valores de la energía las características del acercamiento al equilibrio, y a diferencia de lo que ocurre a energías del orden térmico, no depende del valor del ángulo siempre que  $C_{42}(0)$  sea distinto de cero. De hecho la distribución anisotrópica simple de la figura 20 está caracterizada por un momento  $C_{42}(0)$  positivo y por ende el acercamiento al equilibrio es monótono por arriba. En general la condición de positividad (4.48) para las soluciones anisotrópicas simples con momentos  $C_{42}(0)$  no nulos conduce inevitablemente a un proceso de relajación por arriba en la cola de altas energías. Si el momento  $C_{42}(0)$  es nulo, el criterio debe ser extendido hasta incluir al término no nulo de decaimiento más lento. Por ejemplo el acercamiento final al equilibrio de la condición inicial caracterizada por  $C_{31}(0) = C_{32}(0) = C_{63}(0) = 1/30$  está controlado por el momento  $C_{31}(0)$ . Esto es consistente con el comportamiento que se muestra en la figura 23. Para  $\theta = 0^\circ$  el tercer cero de  $R(\epsilon, \theta, t)$  evoluciona moviéndose hacia la derecha, dando origen así a un efecto transitorio de subpoblación. Por otra parte la cola de alta energía muestra un acercamiento monótono al equilibrio por arriba para  $\theta = 180^\circ$ . Para  $\theta = 90^\circ$  el término  $n = 6$ ,  $q = 3$  domina la evolución monótona en vista de que los términos con  $n = 3$  son nulos en dicha dirección.

Digamos por último que no hay dificultad en extender estos cálculos a otros modelos de Maxwell. Sin embargo las características cualitativas de los procesos de relajación permanecen inalteradas, cambiando únicamente las escalas de tiempo.

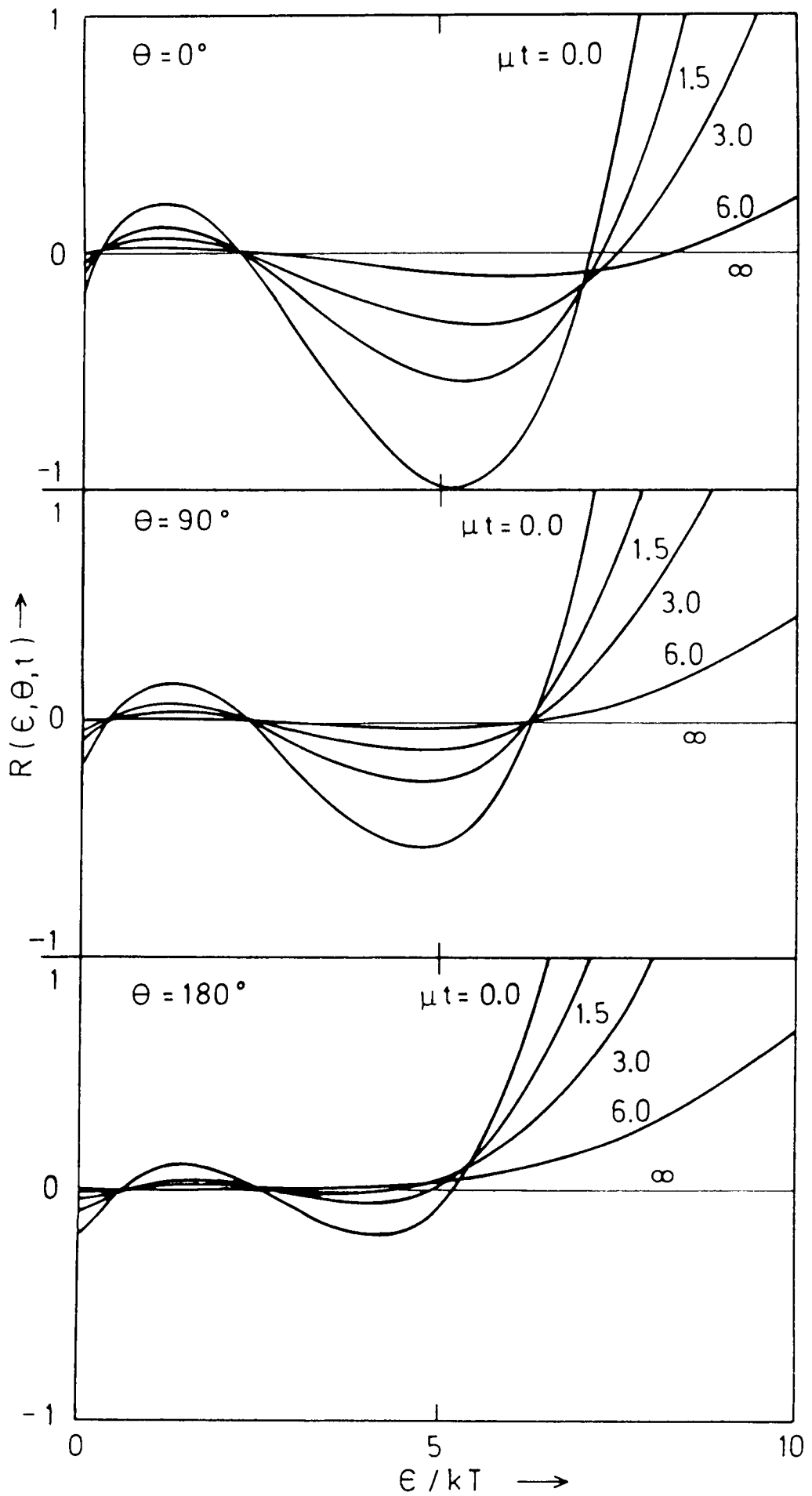


Figura 23. Desviación del equilibrio  $R(\epsilon, \theta, t)$  en el modelo de Tjon y Wu para una condición inicial (4.44) caracterizada por los siguientes momentos no nulos  $C_{31}(0) = C_{32}(0) = C_{63}(0) = 1/30$ .

#### 4.4 SERIE MODIFICADA DE LAGUERRE

En la sección 4.2 mostramos que el desarrollo (4.11) de la función distribución  $f(\vec{p}, t)$  converge numéricamente en un amplio rango de energías  $\epsilon < E$ , donde  $E$  crece con el orden de truncamiento  $N_0$  y el tiempo  $t$ . Sin embargo sería deseable poder aumentar este rango de convergencia, especialmente para tiempos chicos. Un método para lograrlo es el descrito en el parágrafo 3.5 para el caso isotrópico. Otro procedimiento alternativo es sugerido por la forma explícita (3.81) del modo BKW: Es obvio que podría lograrse una mejor descripción de una función distribución inicialmente despoblada a altas energías si se multiplica el desarrollo de Laguerre (4.11) por una función de peso  $\exp(-\sigma\epsilon/kT)$ , suponiendo que fuese posible formular un criterio para una adecuada elección del parámetro  $\sigma$ . Si bien un desarrollo de este tipo es adecuado en el instante inicial, el factor de peso podría llegar a representar un estorbo para la convergencia de la serie cerca del equilibrio. En principio esta dificultad puede evitarse permitiendo que el parámetro  $\sigma$  sea función del tiempo. Una elección afortunada del comportamiento asintótico de  $\sigma(t)$  podría dar origen a una descripción aproximadamente correcta de la relajación al equilibrio a altas energías. Varios autores (Alexanian 1979, Cornille y Gervois 1980a, Ernst 1981) han empleado recientemente un desarrollo modificado para  $f(\vec{p}, t)$  con estas características, pero limitado exclusivamente al caso isotrópico en impulso. Nuestro propósito es plantear un desarrollo similar para el caso anisotrópico.

Al igual que en el caso isotrópico la simetría de Bobylev (1976a) sugiere la posibilidad de obtener un desarrollo alternativo de la solución general. Esta si-

metría indica que si  $\phi(\vec{k}, t)$  es una solución transformada Fourier de la ecuación de Boltzmann, entonces

$$\phi'(\vec{k}, t) = e^{-\sigma \frac{1}{2} m k T k^2} \phi(\vec{k}, t) \quad (4.56)$$

también lo es. Sin embargo  $\phi'$  no satisface las leyes de conservación y tiende asintóticamente hacia una distribución  $\phi_{\sigma}(k)$  donde

$$\phi_{\sigma}(k) = \eta e^{-\frac{(1-\sigma)}{2} m k T k^2} \quad (4.57)$$

es una distribución de equilibrio de temperatura modificada  $T = T(1-\sigma)$ . Desarrollando  $\phi'(\vec{k}, t)$  en términos de las autofunciones (4.12) del problema de autovalores correspondiente a la ecuación de Boltzmann linealizada, e invirtiendo la relación (4.56) obtenemos el siguiente desarrollo para  $\phi(\vec{k}, t)$ :

$$\phi(\vec{k}, t) = \phi_{\sigma(t)}(k) \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{q=0}^n \delta_{nq}(t) \varphi_{nq}(\vec{k}) \right] \quad (4.58)$$

Las leyes de conservación del número de partículas, el impulso y la energía aplicadas al desarrollo anterior nos indican que

$$\delta_{10}(t) = \delta_{11}(t) = 0 \quad (4.59)$$

Y además

$$\sigma(t) = \delta_{21}(t) \quad (4.60)$$

Si elegimos  $1-\sigma$  positivo, o sea

$$\delta_{21}(t) < 1 \quad (4.61)$$

podemos aplicar la transformada inversa de Fourier a cada término de la serie por separado y obtener así un

desarrollo de Laguerre modificado para la solución general de la ecuación de Boltzmann en el espacio  $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^2)$ ,

$$f(\vec{p}, t) = \frac{1}{1 - \delta_{21}(t)} e^{-\frac{\delta_{21}(t)}{1 - \delta_{21}(t)} \frac{p^2}{2mkT}} f_0(p) \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{q=0}^n \frac{\delta_{nq}(t)}{[1 - \delta_{21}(t)]^{n/2}} R_{nq} \left( \frac{p^2/2m}{1 - \delta_{21}(t)}, \theta \right) \right] \quad (4.62)$$

con

$$R_{nq}(\epsilon, \theta) = (-1)^{\frac{n+12q-n1}{2}} \left( \frac{n-12q-n1}{2} \right)! \left( \frac{\epsilon}{kT} \right)^{\frac{12q-n1}{2}} L_{\frac{n-12q-n1}{2}}^{12q-n1} \left( \frac{\epsilon}{kT} \right) e^{i(2q-n)\theta} \quad (4.63)$$

Los coeficientes  $\delta_{nq}(t)$  son momentos generalizados de la función distribución  $f(\vec{p}, t)$

$$\delta_{nq}(t) = \frac{[1 - \delta_{21}(t)]^{n/2}}{\left( \frac{n+12q-n1}{2} \right)! \left( \frac{n-12q-n1}{2} \right)!} \frac{1}{\eta} \int f(\vec{p}, t) R_{nq} \left( \frac{p^2/2m}{1 - \delta_{21}(t)}, \theta \right) d\vec{p} \quad (4.64)$$

con el siguiente comportamiento asintótico

$$\delta_{nq}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \delta_{n, 2q} \frac{[\delta_{21}(\infty)]^q}{q!} \quad (4.65)$$

Siendo  $f(\vec{p}, t)$  real, tenemos que

$$\delta_{nq}(t) = \delta_{n, n-q}^*(t) \quad (4.66)$$

Reemplazando el desarrollo (4.62) en la ecuación de Boltzmann obtenemos un conjunto infinito de ecuaciones para los momentos generalizados  $\delta_{nq}(t)$ .

$$\left[ \frac{d}{dt} + \Lambda_{NQ} \right] \delta_{NQ}(t) = \delta_{N-2, Q-1}(t) \frac{d\delta_{21}}{dt} + \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{q=q_0}^{q_1} (-1)^q \mu_n^{NQ} \delta_{nq}(t) \delta_{N-n, Q-q}(t) \quad (4.67a)$$

$$q_0 = \max(0, Q - N + n) \quad ; \quad q_1 = \min(n, Q) \quad (4.67b)$$

donde  $\delta_{nq} = 0$  si no se verifica  $0 \leq q \leq n$ .

Cada momento  $\delta_{nq}(t)$  puede ser hallado en forma secuencial dado  $\delta_{21}(t)$  y los valores iniciales  $\delta_{nq}(0)$  de todos los

momentos. Dicha solución está dada formalmente por:

$$\delta_{00}(t) = 1 \quad , \quad \delta_{10}(t) = 0 \quad (4.68a)$$

$$\delta_{20}(t) = \delta_{20}(0) e^{-\Lambda_{20}t} \quad ; \quad \delta_{21}(t) < 1 \text{ arbitrario} \quad (4.68b)$$

$$\delta_{30}(t) = \delta_{30}(0) e^{-\Lambda_{30}t} \quad (4.68c)$$

$$\begin{aligned} \delta_{N0}(t) = & \delta_{N0}(0) e^{-\Lambda_{N0}t} + \int_0^t e^{-\Lambda_{N0}(t-\tau)} [ \delta_{21}(\tau) \delta_{N-2Q-1}(\tau) + \\ & + \sum_{n=2}^{N-2} \sum_{q=q_0}^{q_1} (-)^q \mu_n^{NQ} \delta_{nq}(\tau) \delta_{N-nQ-q}(\tau) ] d\tau \end{aligned} \quad (4.68d)$$

Estas ecuaciones, junto con el desarrollo modificado (4.62), representan una expresión alternativa de la solución general en  $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^2)$  de la ecuación de Boltzmann para modelos de Maxwell. Si elegimos  $\delta_{21} = 0$  recuperamos el desarrollo usual (4.11) para la función distribución.

El desarrollo modificado (4.62) constituye una representación diferente de la función distribución que puede llegar a resultar muy conveniente cuando es posible formular un criterio para una buena elección de  $\delta_{21}(t) < 1$ . Así, por ejemplo, si elegimos  $\delta_{21}(t) = \sigma e^{-\Lambda_{21}t/2}$  la solución particular  $\delta_{N0}(t) = 0$  es una solución exacta muy simple, v.g. el modo BKW descrito con anterioridad.

La serie modificada (4.62) representa una reordenación de la serie de Laguerre original. La conexión entre los coeficientes  $\delta_{nq}$  y  $C_{nq}$  puede ser hallada fácilmente comparando ambos desarrollos

$$C_{nq}(t) = \sum_{m=0}^{\frac{n-12q-n1}{2}} \frac{[-\delta_{21}(t)]^m}{m!} \delta_{n-2mq-m}(t) \quad (4.69)$$

$$\delta_{nq}(t) = \sum_{m=0}^{\frac{n-12q-n1}{2}} \frac{[\delta_{21}(t)]^m}{m!} C_{n-2mq-m}(t) \quad (4.70)$$

En lo que sigue estudiaremos la evolución temporal de una función distribución caracterizada inicialmente por un

desarrollo modificado de Laguerre con sólo dos momentos no nulos. Una condición inicial con estas características es sumamente adecuada para aplicar los conceptos previos. Elegimos  $2\delta_{21} = -4\delta_{20} = 1$ , es decir

$$R(\epsilon, \theta, 0) = 4 e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \frac{\epsilon}{kT} [1 - \cos(2\theta)] - 1 \quad (4.71)$$

Esta distribución inicial presenta dos picos sobrepoblados para  $\epsilon = kT$  con  $\theta = 90^\circ$  y  $\theta = 270^\circ$  respectivamente, tal como muestra la figura 24. En contraste con las distribuciones anisotrópicas simples de la sección anterior, esta condición inicial está subpoblada a altas energías. Más aún, en vista de que  $C_{42}(0) = -1/8$ , el criterio de Hauge (1979) y Alexanian (1979) asegura que la zona de altas energías ha de tender al equilibrio monótonamente por debajo. Calculamos numéricamente la evolución temporal de esta distribución en base al desarrollo de Laguerre usual (4.11) truncado en  $N_0 = 16$ . En la figura 25 mostramos el error absoluto de dicha evaluación numérica para la condición inicial (4.71). Este error es pequeño en la región de interés  $\epsilon < 4kT$ . Dado que el rango de energías donde es posible lograr una buena aproximación aumenta con el tiempo, la validez de las conclusiones que hemos de obtener queda asegurada.

Las figuras 26 a 29 muestran la distribución (4.71) en cuatro instantes diferentes  $\mu t = 0, 1, 2$  y  $4$ . Se observa claramente un nuevo e interesante fenómeno de relajación: Los picos sobrepoblados presentan una expansión preferencial en la dirección angular, dando lugar a un anillo de máxima población para  $\epsilon \approx kT$ . Este efecto puede interpretarse de la siguiente manera: Inicialmente una gran proporción de partículas está restringida a una pequeña región del espacio de impulsos con  $\epsilon \approx kT$ . En instantes posteriores las leyes de conservación del impulso y la energía en cada colisión binaria tienden a forzar una relajación muy lenta en energía y rápida en ángulo para estas partículas.

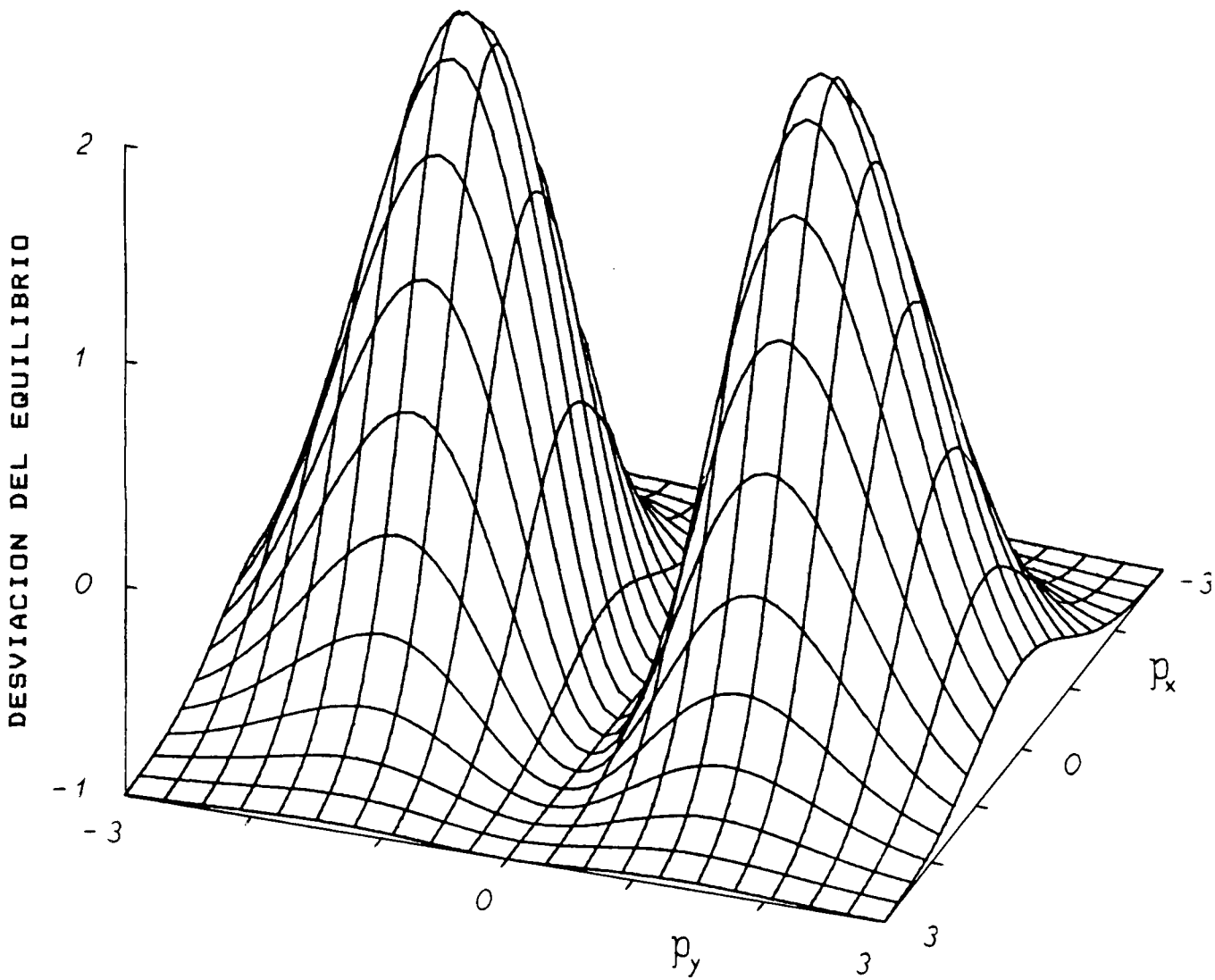


Figura 24. Desviación del equilibrio en el instante inicial  $R(\vec{p}, 0)$  para el caso (4.71). El impulso  $\vec{p}$  se ha representado en unidades reducidas  $\vec{p} / \sqrt{m k T}$ .

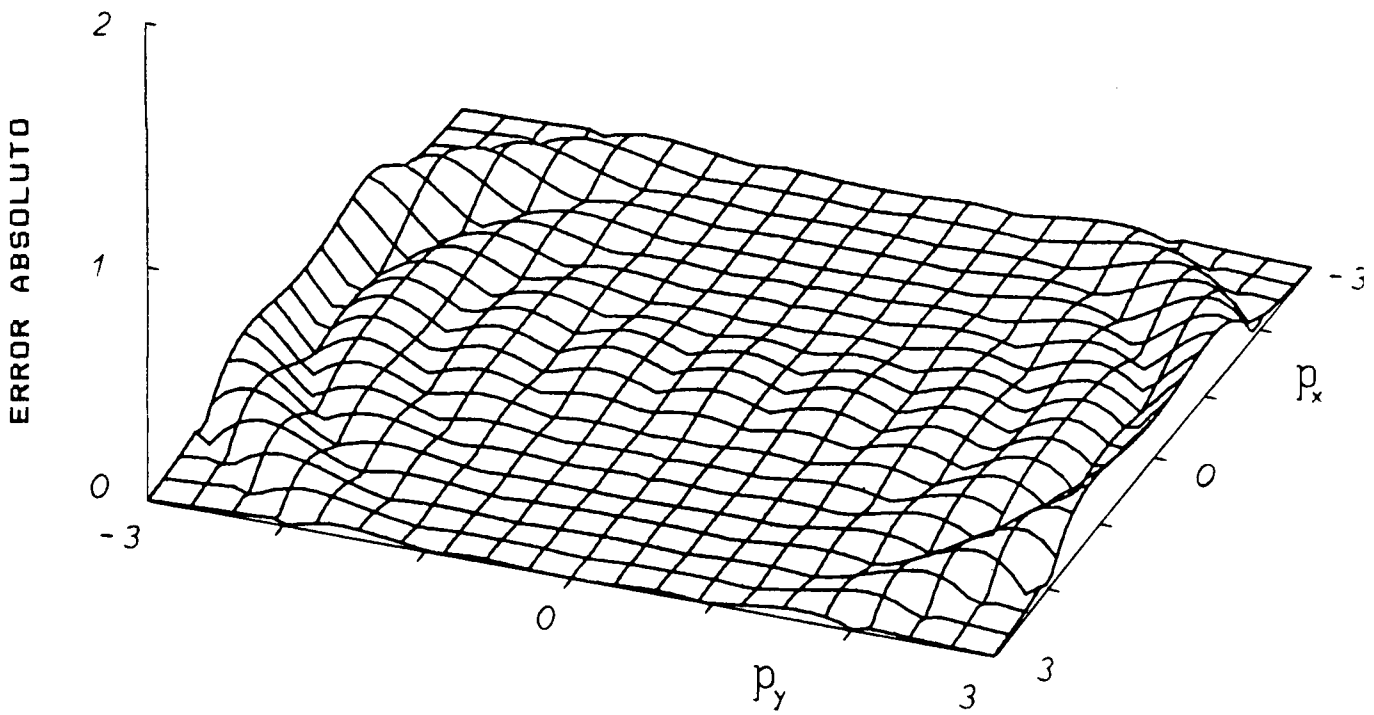


Figura 25. Error absoluto en la evaluación numérica de la condición inicial (4.71). El orden de truncamiento es  $N_0 = 16$ .

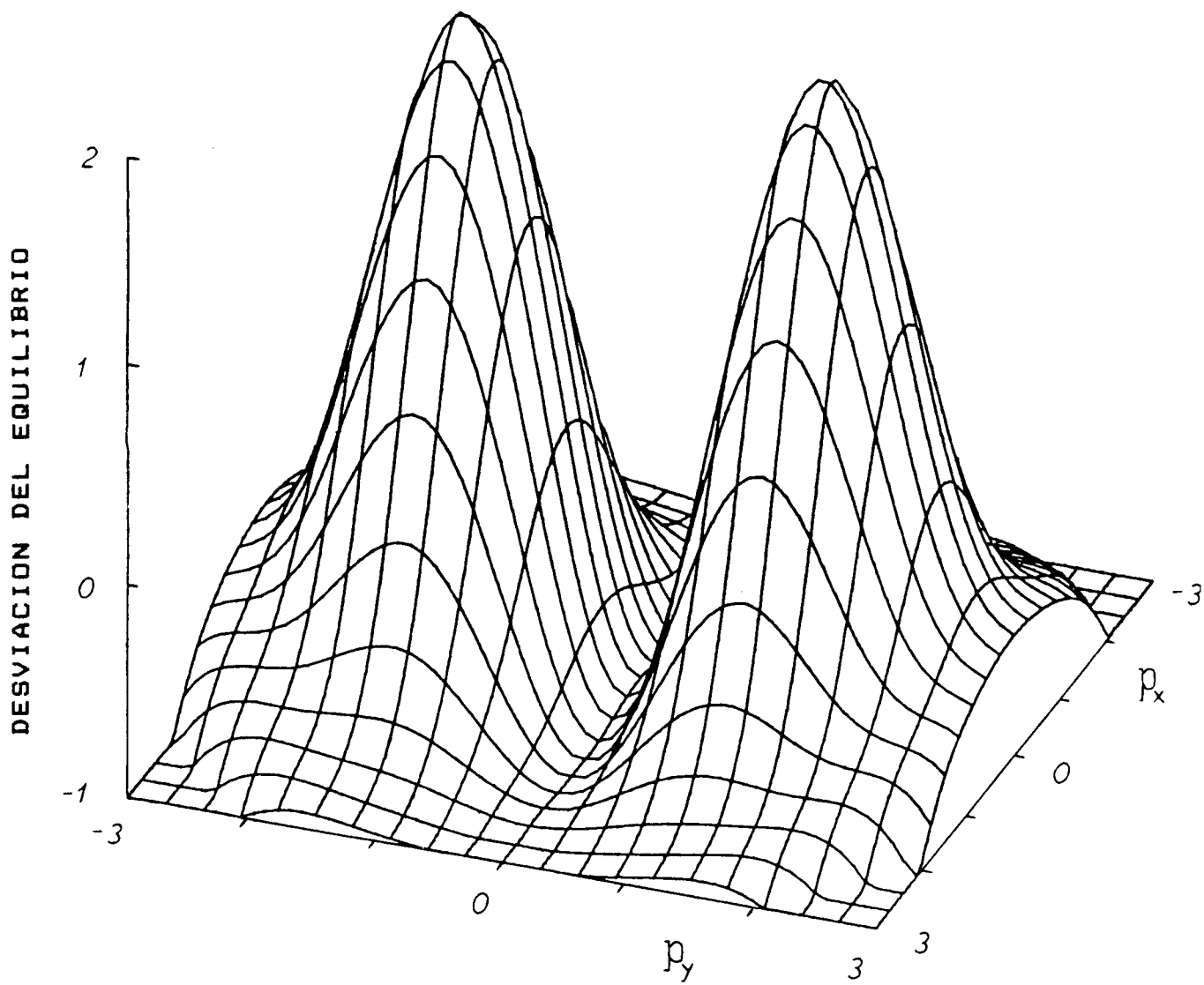


Figura 26. Desviación del equilibrio en el instante inicial  $R(\vec{p}, 0)$  para la condición (4.71) evaluada en base al desarrollo de Laguerre usual (4.11) truncado en  $N_0 = 16$ .

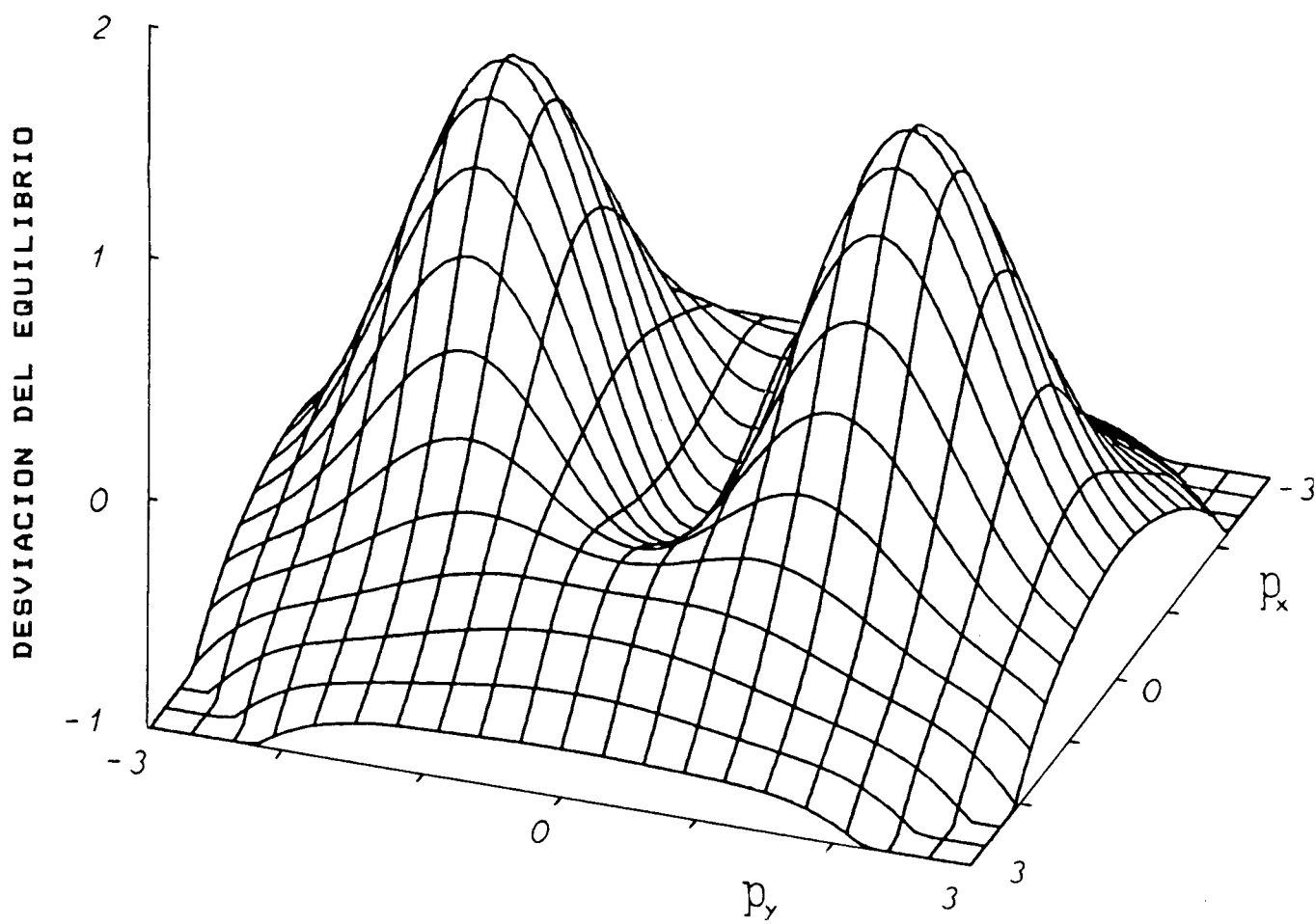


Figura 27. Como en la figura 26 en el instante  $\mu t = 1$  para el modelo de Tjon y Wu.

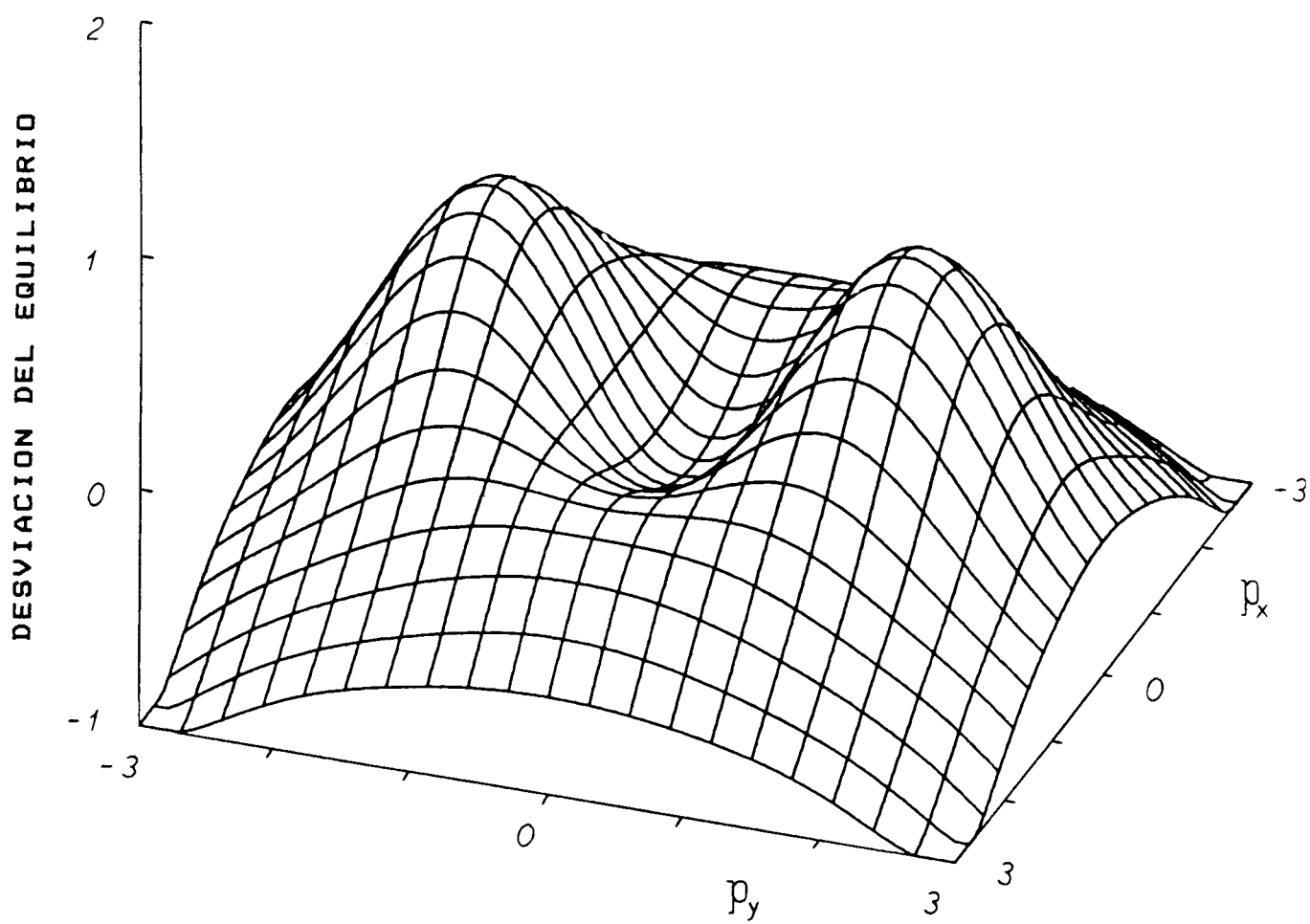


Figura 28. Como en la figura 27 para  $\mu t = 2$ .

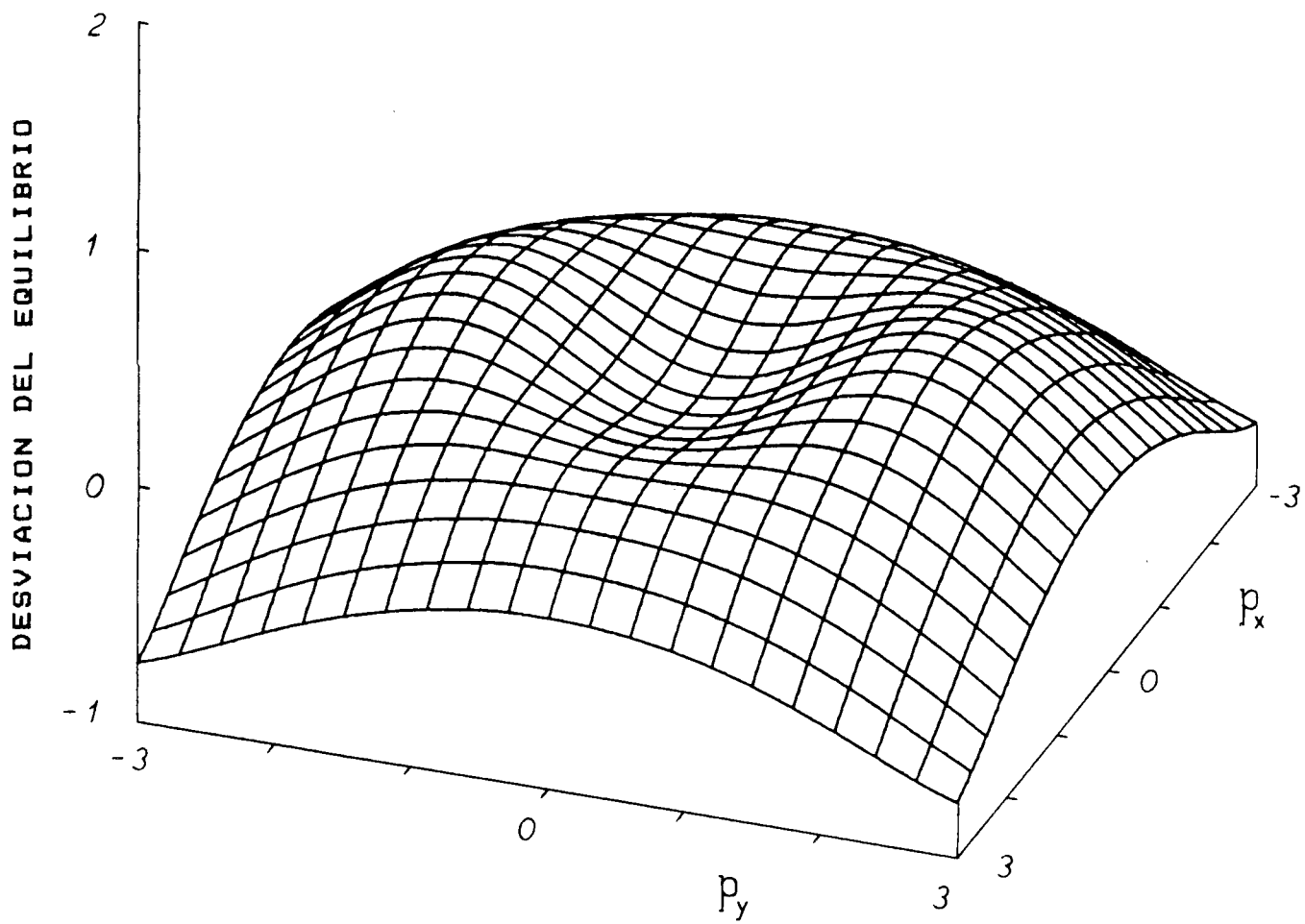


Figura 29. Como en la figura 27 para  $\mu_t = 4$ .

## 5 - CASCADAS NO LINEALES DE COLISIONES ATOMICAS EN LOS FENOMENOS DE SPUTTERING

---

El fenómeno de Sputtering, v.g. la emisión de átomos superficiales debido al bombardeo con partículas energéticas, es causado por las colisiones entre dichos proyectiles y los átomos de las capas superficiales del sólido. Si bien este fenómeno es conocido desde hace más de 125 años (Grove 1853, Gassiot 1858, Plucker 1858), recién en los últimos 25 años comenzó a desarrollarse una descripción cuantitativa del mismo (Thompson 1968, Sigmund 1969). En la actualidad el fenómeno de sputtering ya no es visto sólomente como un efecto indeseable que destruye cátodos y grillas, o contamina un plasma y las paredes que lo rodean. De hecho es utilizado para muchas aplicaciones y se ha transformada en un proceso indispensable en la tecnología moderna, relacionándose con tópicos tales como física de vacío, física de superficies, análisis de superficies, láminas delgadas, microscopía electrónica, colisiones atómicas, daños por radiación, implantación de iones y física de plasma (Behrish 1982). Tanto la remoción de átomos de una superficie en una escala casi atómica, como el flujo de dichos átomos, son efecto utilizados con éxito en el perfilado de láminas delgadas, en la limpieza de superficies o en el diseño de fuentes de iones por pulverización. Sin embargo una de las aplicaciones más usuales es el depósito de láminas delgadas sobre una gran variedad de sustratos, pudiendo alcanzarse áreas de varios  $m^2$  o sumamente pequeñas, útiles en microelectrónica (Behrish 1981b). Debemos mencionar, además, que el proceso de sputtering ha sido observado en distintos fenómenos naturales, como ser en la superficie de

la Luna y de otros cuerpos celestes debido al impacto del viento solar (Wehner et al. 1963).

Durante los últimos 25 años se han propuesto una gran variedad de mecanismos de erosión. En la actualidad, sin embargo, el consenso general es que no hay un sólo mecanismo de erosión que explique todas las observaciones. Por el contrario, la mayoría de los mecanismos propuestos opera bajo condiciones específicas (Sigmund 1981). Por razones históricas y de interés práctico la erosión de metales por bombardeo iónico ha sido el tópico más investigado. Se cree que el proceso dominante en dicho caso es el que se conoce como 'knock-on sputtering' (Keywell 1955). El evento elemental es una 'cascada de colisiones atómicas' donde se produce una transferencia de energía cinética del proyectil a los átomos del sólido. Estos átomos se mueven por el material, produciendo nuevas colisiones y causando eventualmente la eyección de algún átomo a través de la superficie del blanco. Esta imagen intuitiva del fenómeno de sputtering fue formulada por Almén (1961), Rol (1960) y Pease (1960).

Tanto en la Teoría de Sputtering de Sigmund (1969, 1972, 1981) como en la mayoría de los modelos desarrollados hasta el presente (Thompson 1968, Robinson 1968) se supone que los átomos en movimiento sólo pueden interactuar con átomos en reposo, dando origen así a un proceso de 'cascadas lineales'. A pesar de algunas obvias simplificaciones este tratamiento ha sido utilizado con éxito en los últimos años en la evaluación de eficiencias y espectros de energía cuando la energía del proyectil es tal que el frenamiento nuclear es dominante (Andersen y Bay 1981). Sin embargo este modelo de cascadas lineales no es aplicable en todos los casos: Se han observado discrepancias entre las predicciones de este modelo y los resultados experimentales cuando la masa del proyectil o la de los átomos del blanco es grande (Andersen y Bay 1972, 1973, 1975), o cuando el haz incidente está

constituido por iones moleculares (Andersen y Bay 1975). El modelo lineal falla también en la descripción del proceso de 'Sputtering Explosivo' propuesto por Haff (Haff 1976), donde como resultado de un fenómeno de frenamiento electrónico del proyectil en un blanco aislante, se produce una muy alta densidad de átomos en movimiento de baja energía. Además debemos tener en cuenta que la teoría de cascadas lineales no es aplicable a ningún proceso de sputtering en su última etapa, dado que en dicho instante hay una densidad muy alta de átomos en movimiento.

El propósito de este capítulo es investigar la validez de la suposición de linealidad en la teoría de cascadas, utilizando para ello la ecuación de Boltzmann no lineal desarrollada en el presente trabajo. Evaluamos los espectros de energía y la eficiencia del proceso de sputtering para el caso no lineal general, en los modelos de interacción de Maxwell y de Partícula muy Dura, comparando dichas expresiones con los resultados de la teoría de cascadas lineal. Con anterioridad este problema fué estudiado numéricamente para el modelo de esferas duras por Weller y Weller (1982), y más recientemente por Williams (1984).

Como en la gran mayoría de los modelos relacionados con los procesos de sputtering, supondremos que los átomos del blanco se comportan como partículas de un gas ideal. Antes de la irradiación de la superficie, la correspondiente función distribución es la distribución Gamma de equilibrio  $F_{S_1}(\epsilon)$ , caracterizada por una temperatura inicial  $(1-s_1)T$ . Inmediatamente después del pasaje del proyectil, y como resultado de una transferencia de energía a una fracción  $\alpha$  de los átomos del blanco, la función distribución inicial está dada por la superposición (3.39) de dos distribuciones Gamma

$$F(\epsilon, 0) = (1-\alpha) F_{S_1}(\epsilon) + \alpha F_{S_2}(\epsilon) \quad (5.1)$$

Si suponemos (Thompson, 1968) que la superficie del sólido puede ser aproximada por una superficie imaginaria dentro de un medio isotrópico infinito, entonces para tiempos  $t > 0$  la función distribución de los átomos del blanco será  $F(\epsilon, t)$ , solución de la ecuación de Boltzmann no lineal (2.26). Resulta claro que la suposición de interacciones binarias entre partículas aplicada a un sólido no ha de dar una descripción física tan satisfactoria como la que se obtiene en gases diluidos. Sin embargo suponemos que los resultados que obtendremos serán indicativos de las características generales del proceso (Williams 1984). Todo átomo cuya energía sea suficiente como para superar la barrera de potencial  $\epsilon_b$  de la superficie del sólido podrá escapar del mismo. Luego el espectro de energía  $S(\epsilon)$  de las partículas emitidas en el proceso de sputtering resulta ser proporcional a

$$S(\epsilon) \sim \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon + \epsilon_b}} \int_0^{\infty} [F(\epsilon + \epsilon_b, t) - F_0(\epsilon + \epsilon_b)] dt \quad (5.2)$$

donde el término  $\epsilon/\sqrt{\epsilon + \epsilon_b}$  está relacionado con la proporción de átomos de energía  $\epsilon + \epsilon_b$  que efectivamente son emitidos a través de la superficie: Cuando la componente normal a la superficie de la velocidad del átomo es menor que  $\sqrt{2\epsilon_b/m}$ , se produce un efecto de refracción total y el átomo no puede escapar del material.

Anotamos finalmente (Thompson 1968)

$$S(\epsilon) = \xi \mu \frac{\epsilon}{(kT)^2} e^{-\frac{\epsilon + \epsilon_b}{kT}} \int_0^{\infty} R(\epsilon + \epsilon_b, t) dt \quad (5.3)$$

donde  $R(\epsilon, t)$  es la desviación del equilibrio definida en (3.42), y  $\xi$  es un factor que depende del flujo de partículas incidentes y que de aquí en adelante supondremos normalizado a la unidad.

En primer lugar evaluamos esta cantidad para el caso particular de los modelos de interacción de Maxwell estudiados en el párrafo 3.5. Reemplazando el desarrollo de

Laguerre (3.65) en (5.3) resulta

$$S(\epsilon) = \frac{\epsilon}{(kT)^2} e^{-\frac{\epsilon + \epsilon_b}{kT}} \sum_{n=0}^{\infty} \Gamma_n L_n^{\nu-1} \left( \frac{\epsilon}{kT} \right) \quad (5.4)$$

donde

$$\begin{aligned} \Gamma_0 &= 0 \\ \Gamma_n &= \mu \int_0^{\infty} C_n(t) dt \end{aligned} \quad (5.5)$$

Integrando (5.4) respecto de la energía obtenemos la siguiente expresión para la eficiencia total de sputtering

$$\begin{aligned} Y &= \int_0^{\infty} S(\epsilon) d\epsilon = \\ &= e^{-\frac{\epsilon_b}{kT}} \sum_{n=0}^{\infty} (\Gamma_{n+2} - 2\Gamma_{n+1} + \Gamma_n) L_n^{\nu-1} \left( \frac{\epsilon_b}{kT} \right) \end{aligned} \quad (5.6)$$

En el caso linealizado  $C_n(t) = C_n(0) e^{-\Lambda_n t}$  con lo cual

$$\begin{aligned} \Gamma_0 &= 0 \\ \Gamma_n &= [(1-\alpha) s_1^n + \alpha s_2^n] \mu / \Lambda_n \end{aligned} \quad (5.7)$$

En el caso no lineal, en cambio, cada momento  $C_n(t)$  puede ser hallado en forma secuencial en base a la ecuación (3.74). Dado que todos los momentos  $C_n(t)$  para  $n \neq 0$  son sumas de términos transitorios exponenciales, los correspondientes coeficientes  $\Gamma_n$  pueden calcularse fácilmente. Conocidos estos coeficientes tanto el espectro de energía (5.4) como la eficiencia de sputtering (5.6) pueden ser evaluados en la forma de un desarrollo de Laguerre truncado en cualquier orden  $N_0$  arbitrario.

En la figura 30 mostramos la eficiencia total de sputtering en función de la barrera de potencial  $\epsilon_b$  en el caso no lineal para el modelo de interacción de Tjon y Wu con  $\alpha = 0.01$ ,  $s_1 = 0.5$  y  $s_2 = -49.5$ . Vemos que la eficiencia

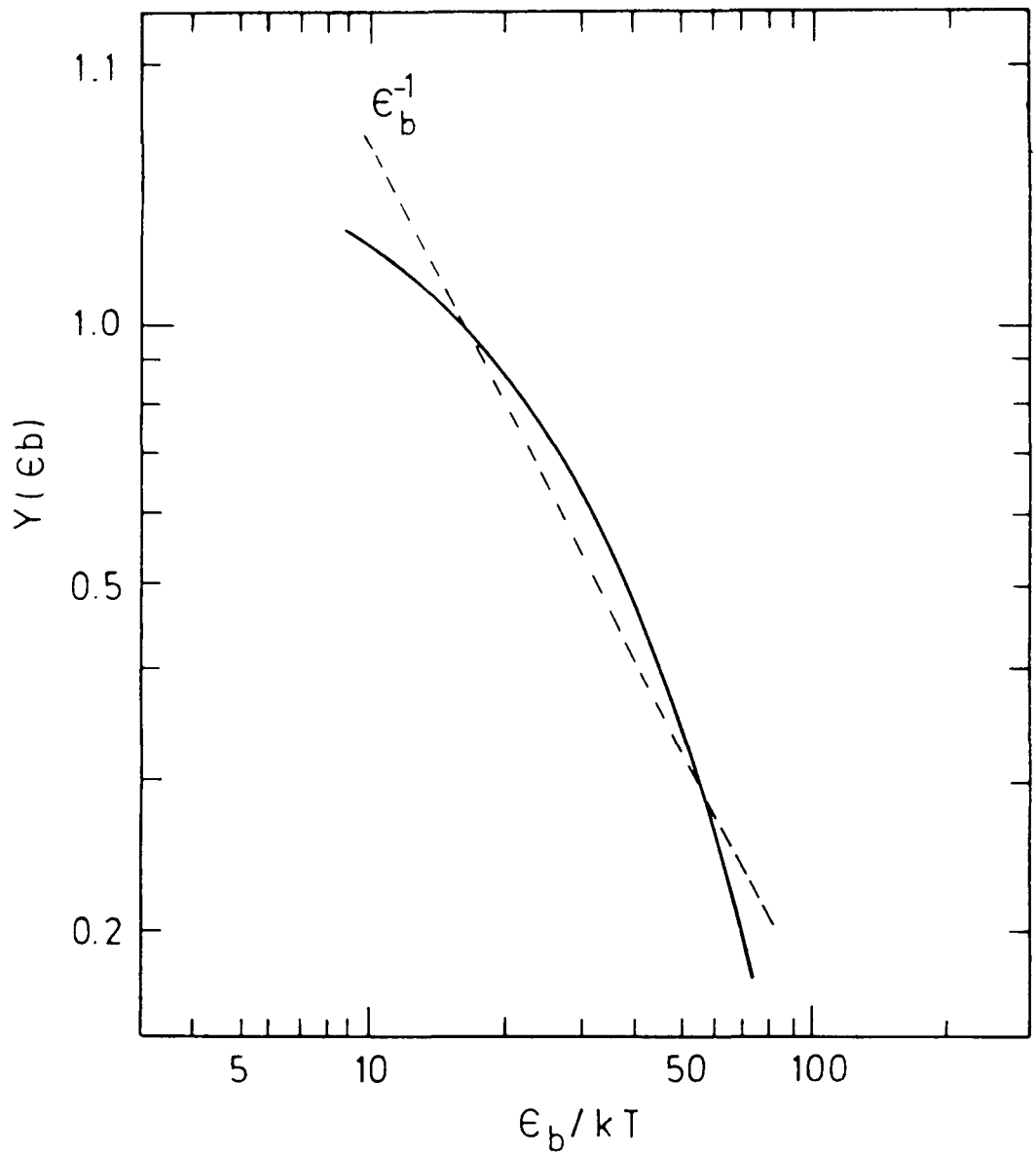


Figura 30. Eficiencia de Sputtering en el modelo de Tjon y Wu para el caso no lineal con  $S_1 = 0.5$  y  $S_2 = -49.5$ .

total de sputtering no verifica la ley  $1/\epsilon_b$  predicha por resultados numéricos anteriores (Weller y Weller 1982). Con el objeto de acelerar la lenta convergencia del desarrollo de Laguerre (5.6) empleamos un aproximante generalizado de Padé  $\{2/3\}$  (Baker 1975). Lamentablemente la utilización de este aproximante racional enmascara las posibles diferencias entre el caso lineal y no lineal, tornando imposible cualquier comparación entre ambos resultados.

Analicemos ahora el modelo de interacción de partícula muy dura (VHP) introducido en el parágrafo 3.3, calculando los espectros de energía de las partículas emitidas en el proceso de sputtering para el caso lineal y no lineal respectivamente (Williams 1984).

$$S_L(\epsilon) = \frac{\epsilon}{\epsilon + \epsilon_b + kT} \left\{ \frac{(1-\alpha)}{(1-s_1)kT} e^{-\frac{\epsilon + \epsilon_b}{(1-s_1)kT}} + \frac{\alpha}{(1-s_2)kT} e^{-\frac{\epsilon + \epsilon_b}{(1-s_2)kT}} + \frac{2}{(\epsilon + \epsilon_b + kT)^2} \left[ (1-\alpha)(\epsilon + \epsilon_b - s_1 kT) e^{-\frac{\epsilon + \epsilon_b}{(1-s_1)kT}} + \alpha(\epsilon + \epsilon_b - s_2 kT) e^{-\frac{\epsilon + \epsilon_b}{(1-s_2)kT}} \right] \right\} \quad (5.8)$$

$$S_N(\epsilon) = \frac{\epsilon}{(kT)^2} e^{-\frac{\epsilon + \epsilon_b}{kT}} \mu \int \left[ \frac{\alpha_1(t)}{1 - \sigma_1(t)} e^{-\frac{\sigma_1(t)(\epsilon + \epsilon_b)}{(1 - \sigma_1(t))kT}} + \frac{\alpha_2(t)}{1 - \sigma_2(t)} e^{-\frac{\sigma_2(t)(\epsilon + \epsilon_b)}{(1 - \sigma_2(t))kT}} - 1 \right] dt \quad (5.9a)$$

donde  $\sigma_i(t)$  son raíces de la ecuación cuadrática

$$\left[ (s_1 s_2 - 1) - (1 - s_1)(1 - s_2)\mu t - s_1 s_2 e^{-\mu t} \right] \sigma^2 + \left[ 2s_1 s_2 e^{-\mu t} - (s_1 s_2 - 1) - (1 - s_1)(1 - s_2)(1 + \mu t) \right] \sigma - s_1 s_2 e^{-\mu t} = 0 \quad (5.9b)$$

y los coeficientes  $\alpha_i(t)$  están dados por

$$\alpha_1(t) = \frac{\sigma_2(t)}{\sigma_2(t) - \sigma_1(t)} \quad \alpha_2(t) = \frac{\sigma_1(t)}{\sigma_1(t) - \sigma_2(t)} \quad (5.9c)$$

Ambas expresiones son comparadas en la figura 31 para

$\epsilon_b = 9 \text{ kT}$ ,  $s_1 = 0.5$  y  $s_2 = -12$ . Si bien ambos resultados muestran el mismo comportamiento cualitativo, el espectro de energía del caso linealizado es aproximadamente un 50 % menor que en el caso no lineal, produciéndose además una sobreestimación de la posición del máximo. En la figura 32 observamos claramente que  $S(\epsilon)$  muestra, tanto en el caso lineal como en el no lineal, un decaimiento exponencial con la energía. Este último resultado no contradice, sin embargo, las conclusiones obtenidas numéricamente en trabajos anteriores (Thompson 1968, Sigmund 1969) que predicen un comportamiento del tipo  $1/c^2$ . En efecto, de la expresión (5.8) vemos que  $S_L(\epsilon)$  presenta un comportamiento del tipo  $1/\epsilon^2$  en el rango de energías  $\epsilon_b \ll \epsilon \ll (1-s_2)kT$ . En la situación indicada en la figura 31 este rango de energías es muy estrecho y por ende tal comportamiento no es observable. Esta conclusión es aplicable muy especialmente en el proceso de Sputtering explosivo propuesto por Haff, donde la condición inicial está caracterizada por una muy alta densidad  $\alpha$  de átomos en movimiento de baja energía media  $(1-s_2)kT$ . En la figura 33, en cambio, mostramos el espectro de energía en el caso lineal  $S(\epsilon)$  para  $\epsilon_b = 9kT$ ,  $s_1 = 0.5$  y  $s_2 = -9999.5$ , verificando claramente la ley  $1/\epsilon^2$  en el rango  $\epsilon_b \ll \epsilon \ll (1-s_2)kT$ . Para  $\epsilon \gg (1-s_2)kT$ , en cambio, la expresión (5.8) predice un comportamiento de tipo exponencial para  $S_L(\epsilon)$ , el cual se manifiesta en la figura 33 como un apartamiento de la ley  $1/\epsilon^2$  a altas energías. En la figura 32 vemos además que tal comportamiento de decaimiento exponencial está presente tanto en el caso lineal como en el no lineal. En la figura 34 mostramos el espectro de energía de los átomos emitidos en el proceso de sputtering por bombardeo con  $\text{Xe}^+$  a 45 keV sobre Au policristalino (Thompson 1968), observando claramente el comportamiento indicado anteriormente y representado en la figura 33.

Integrando las expresiones (5.8) y (5.9) obtenemos las eficiencias totales de sputtering en los casos lineal y no

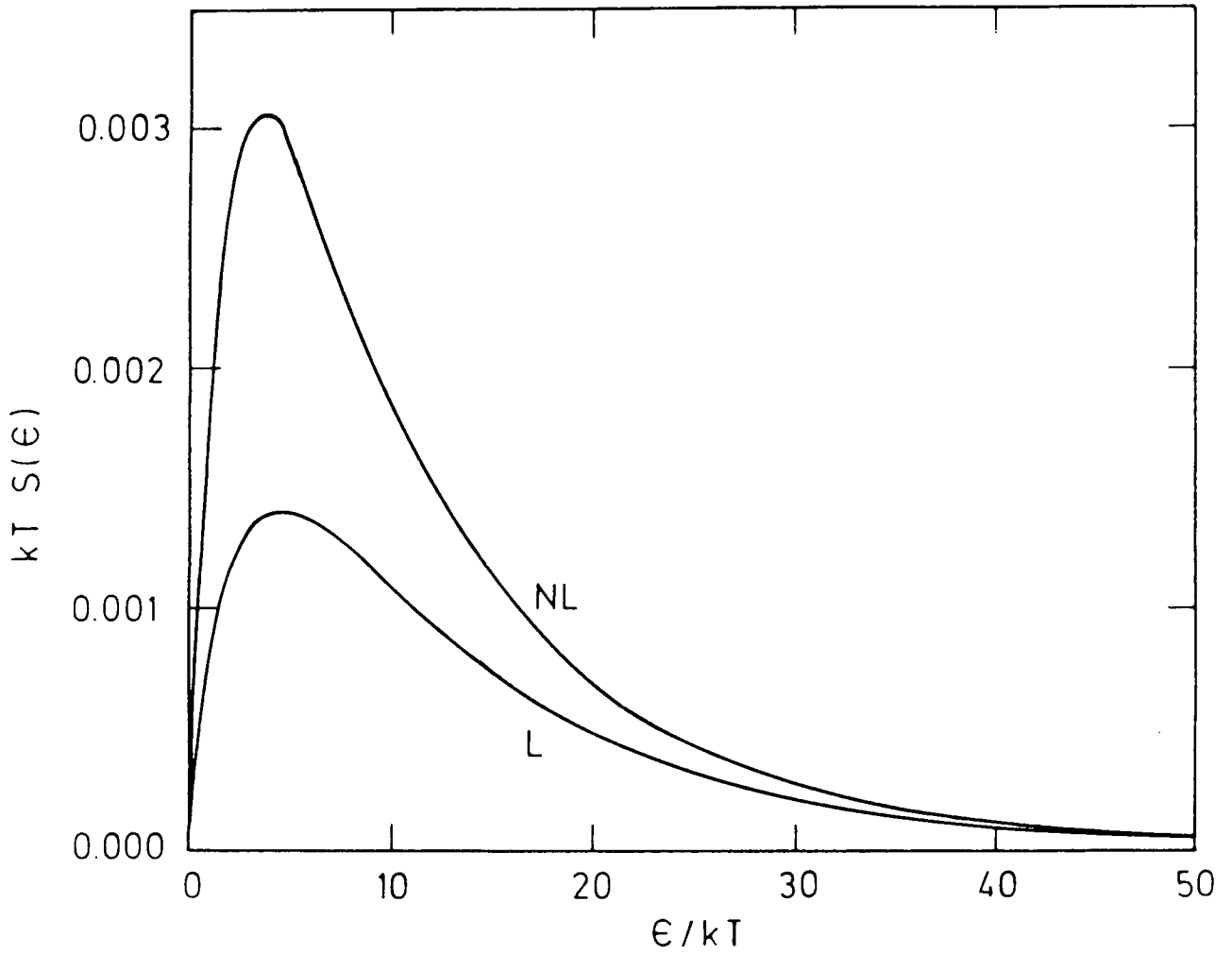


Figura 31. Espectro de energía  $S(\epsilon)$  de los átomos emitidos en el proceso de Sputtering para el modelo de partícula muy dura con  $\epsilon_b = 9 kT$ ,  $S_1 = 0.5$  y  $S_2 = -12$  en el caso lineal (L) y no lineal (NL).

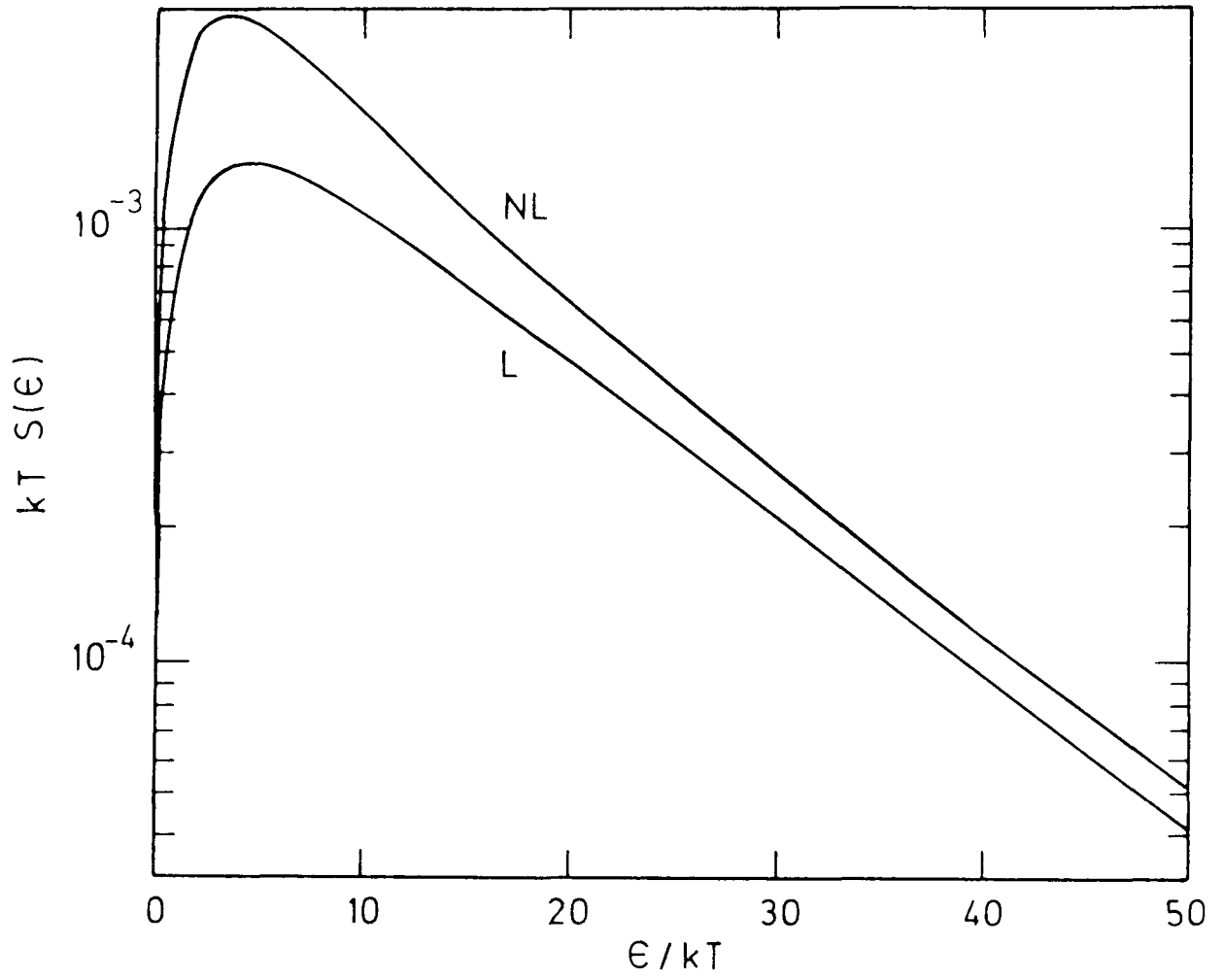


Figura 32. Idem figura anterior.

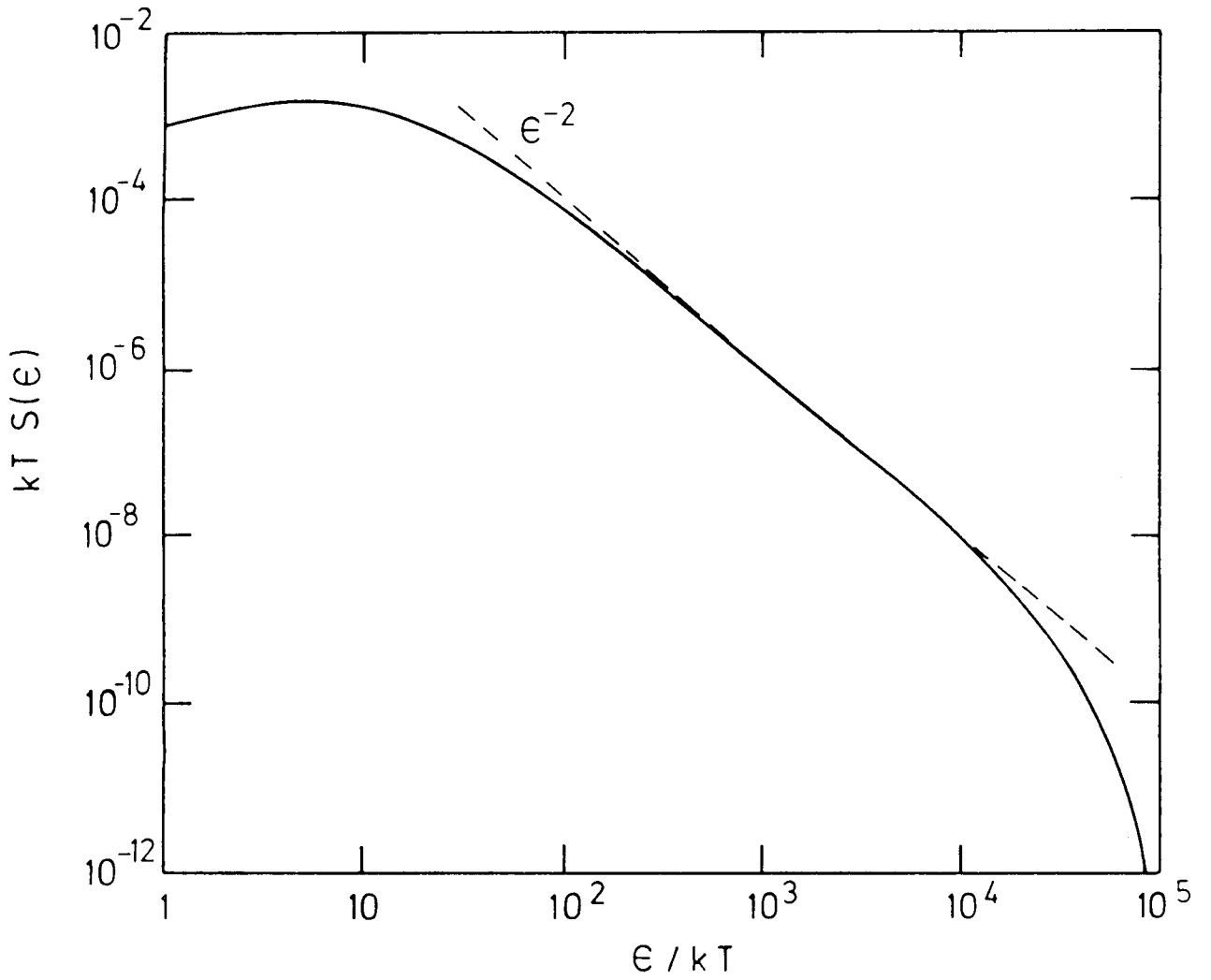


Figura 33. Espectro de energía en el caso linealizado  $S_1(\epsilon)$  para el modelo de partícula muy dura con  $\epsilon_b = 9 kT$ ,  $S_1 = 0.5$  y  $S_2 = -9999.5$ .

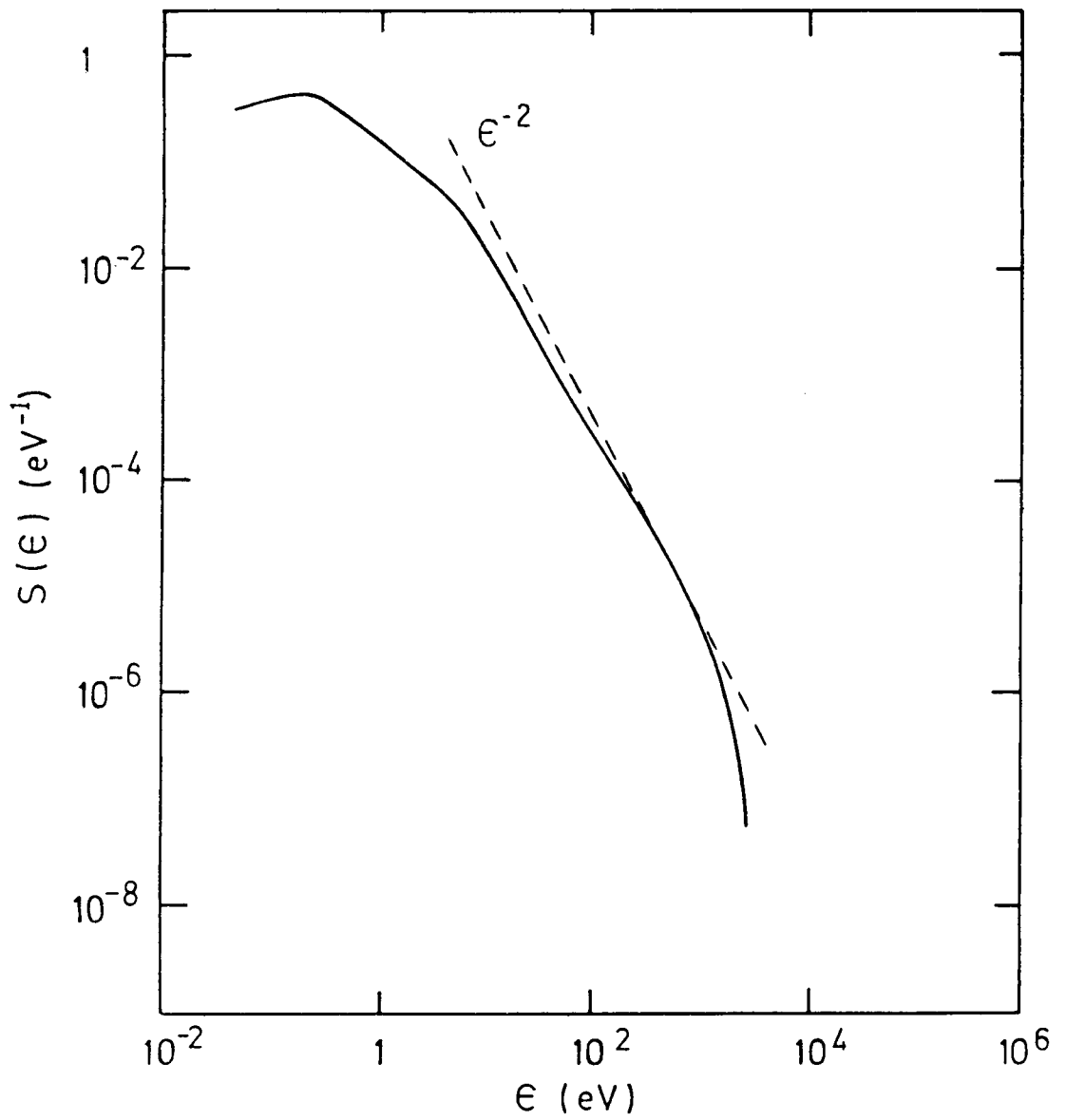


Figura 34. Espectro de energía de los átomos emitidos en el proceso de Sputtering por bombardeo con  $\text{Xe}^+$  a 45 keV sobre Au policristalino (Thompson 1968).

lineal respectivamente.

$$Y_L = \int_0^{\infty} \frac{\epsilon d\epsilon}{\epsilon + \epsilon_b + kT} \left\{ (1-\alpha) \left[ \frac{1}{(1-s_1)kT} + \frac{2(\epsilon + \epsilon_b - s_1 kT)}{(\epsilon + \epsilon_b + kT)^2} \right] e^{-\frac{\epsilon + \epsilon_b}{(1-s_1)kT}} + \right. \\ \left. + \alpha \left[ \frac{1}{(1-s_2)kT} + \frac{2(\epsilon + \epsilon_b - s_2 kT)}{(\epsilon + \epsilon_b + kT)^2} \right] e^{-\frac{\epsilon + \epsilon_b}{(1-s_2)kT}} \right\} \quad (5.10)$$

$$Y_N = \int_0^{\infty} \left[ \alpha_1(t) (1-\sigma_1(t)) e^{-\frac{\epsilon_b}{(1-\sigma_1(t))kT}} + \right. \\ \left. + \alpha_2(t) (1-\sigma_2(t)) e^{-\frac{\epsilon_b}{(1-\sigma_2(t))kT}} - e^{-\frac{\epsilon_b}{kT}} \right] dt \quad (5.11)$$

En la figura 35 vemos nuevamente que el resultado linealizado es un 50 % menor que el resultado no lineal general; y que, tal como habíamos verificado para el modelo de Maxwell, ninguna de ambas expresiones verifica la ley  $1/\epsilon_b$ .

Concluimos entonces que varias de las discrepancias observadas experimentalmente respecto de las predicciones del modelo lineal pueden ser debidas a efectos no lineales no considerados en dicho modelo. Entendemos que sería deseable poder lograr ciertas mejoras en el modelo no lineal desarrollado en este capítulo. En primer lugar deberíamos tener en cuenta la dependencia espacial de la cascada de colisiones, cuya importancia en la descripción del fenómeno de sputtering ha sido puesta claramente de manifiesto en recientes modelos hidrodinámicos (Hiraoka et al. 1981). Además la suposición de isotropía en el impulso debería ser evitada, dado que en general la condición inicial (5.1) ha de presentar una muy importante anisotropía en la dirección de incidencia del proyectil. Esta anisotropía en la velocidad, al estar dirigida hacia adentro del sólido, debería manifestarse en una disminución de la eficiencia total de sputtering. Al respecto los resultados presentados en el capítulo 4 pueden constituir una forma de atacar el problema general.

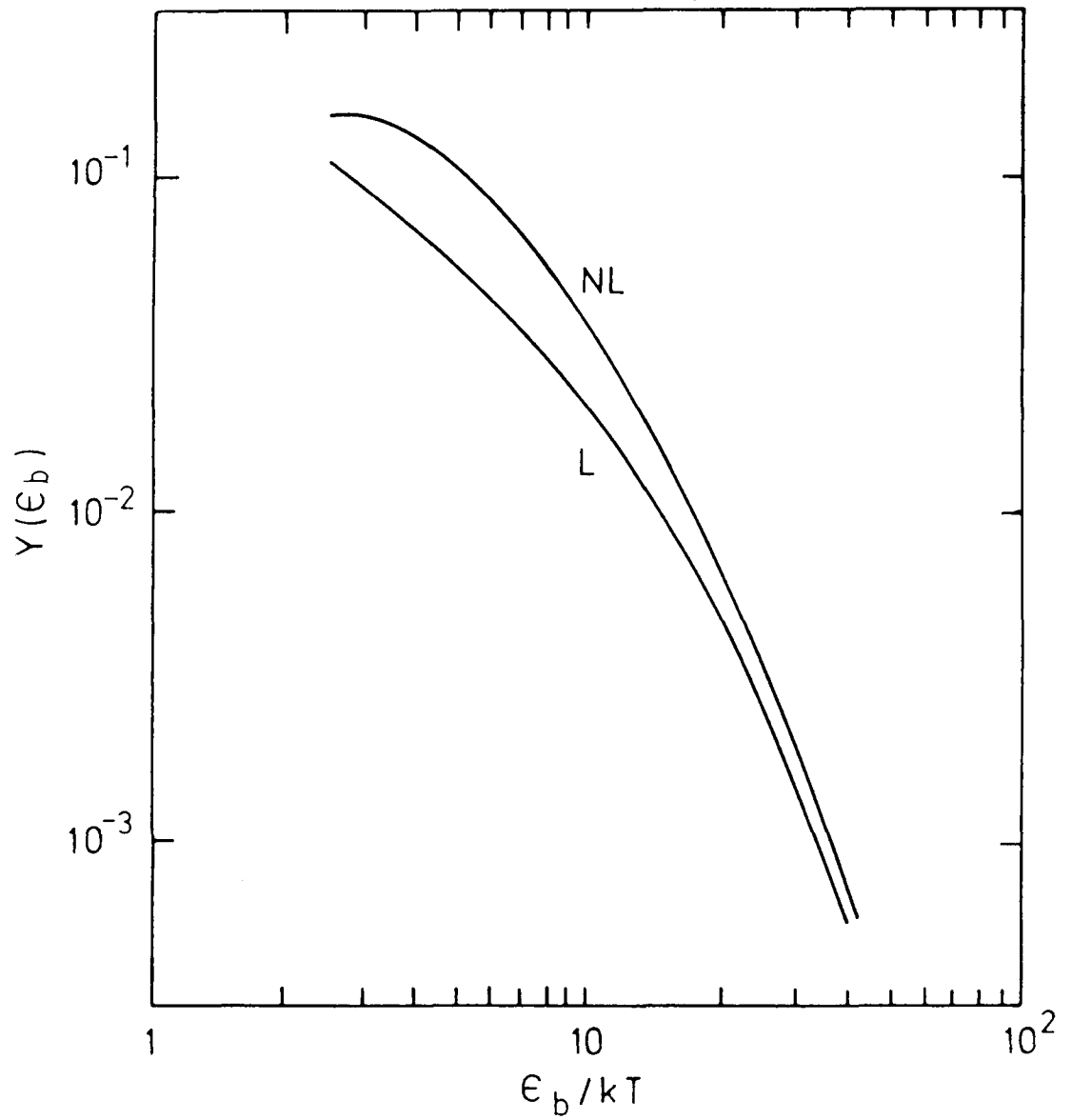


Figura 35. Eficiencia de Sputtering en el modelo de partícula muy dura con  $S_1 = 0.5$  y  $S_2 = -12$  en los casos lineal (L) y no lineal (NL).

## 6 - CONCLUSIONES

---

En este trabajo hemos estudiado la ecuación de Boltzmann no lineal, introduciendo para ello una transformación integral de la función distribución en el caso espacialmente homogéneo e isotrópico en el impulso. Mostramos la relación de este método con otras técnicas destinadas a obtener formas más accesibles de la ecuación. Estas son a) la transformada de Fourier empleada por Bobylev, b) la transformada de Laplace aplicada por Krook y Wu, y c) la transformada de Alexanian. Obtenemos que la transformada en temperatura  $G(s,t)$  propuesta en este trabajo es capaz de incluir una variedad de modelos mucho más amplia que los métodos mencionados. Su característica más importante radica en que la evolución temporal de la función distribución está completamente determinada por el comportamiento de las singularidades de la correspondiente función transformada en temperatura. La relajación al equilibrio de estos puntos singulares puede describirse bajo condiciones muy generales y no depende tanto de la condición inicial impuesta a la función distribución como del modelo de interacción especificado. Aplicamos este método a varios modelos particulares: Para el modelo de partícula muy dura el proceso de relajación está determinado por un único polo simple que evoluciona hacia el valor de equilibrio  $s = 0$ , y que denominamos polo de Maxwell. Para los modelos de interacción de Maxwell, en cambio, todos los polos tienen un comportamiento maxwelliano. La trayectoria de los polos da una visión muy precisa acerca de la evolución del sistema hacia el equilibrio. En efecto, el acercamiento al equilibrio a alta energías será por arriba o por debajo

dependiendo de que los polos de Maxwell tiendan al punto de equilibrio por la izquierda o por la derecha respectivamente. En este sentido debemos señalar que el efecto Tjon, según el cual la zona de altas energías puede presentar una o más oscilaciones alrededor del valor de equilibrio, está relacionado con el hecho de que los polos de Maxwell crucen el eje imaginario antes de tender al punto de equilibrio. Estas propiedades de las singularidades de la función transformada en temperatura nos orientan a proponer un nuevo método de aproximación, donde suponemos que la distribución transformada en temperatura tiene  $N$  polos simples. Esto es equivalente a expresar la función distribución como una superposición de estados de equilibrio con densidades y temperaturas dependientes del tiempo. Además de su simplicidad encontramos que este método preserva las propiedades de la evolución temporal que son características de cada modelo de interacción. Debemos mencionar que no hemos estudiado el problema de la convergencia de estos aproximantes. Esto se debe a que las únicas soluciones exactas conocidas -el modo BKW y las soluciones del modelo de partícula muy dura- son reproducidas fielmente por aproximantes racionales. En este sentido el estudio de la convergencia de este método en los modelos de interacción de Maxwell constituye una posible línea de investigación futura. En los casos tratados la técnica de aproximantes multipolares nos permitió mostrar que la relajación al equilibrio del modo BKW presenta peculiaridades que le son exclusivas. En otras palabras la conjetura de Krook y Wu resulta no ser cierta, ni siquiera de manera aproximada.

Teniendo en cuenta la complicada estructura matemática del término no lineal de colisión, la aproximación linealizada que se obtiene al desprestigiar términos cuadráticos en la desviación respecto del equilibrio constituye una simplificación inmediata. Hemos visto que esta ecuación de Boltzmann linealizada, al presentar una estructura similar a la de la ecuación de Boltzmann no lineal, permite obtener

una descripción cualitativa acerca de sus características, pero que naturalmente no incluye los efectos no lineales debidos al término de colisión. Al respecto hemos investigado la solución linealizada de la ecuación de Boltzmann para el modelo de partícula muy dura en términos de la transformada en temperatura, encontrando que el correspondiente esquema de singularidades presenta discrepancias básicas con relación al caso no lineal. En este contexto hemos definido un método iterativo para resolver la ecuación de Boltzmann, el cual equivale a incrementar paulatinamente la participación de los efectos no lineales. Este método resulta ser muy eficaz para estudiar la relajación al equilibrio a tiempos grandes y, a diferencia del método iterativo de Wild, presenta la evidente ventaja de respetar las leyes de conservación del número de partículas, el impulso y la energía, como así también la condición asintótica, en cada orden de iteración.

En el capítulo IV generalizamos el estudio de la ecuación de Boltzmann no lineal para incluir el caso anisotrópico en el impulso. Esta generalización había sido relegada en los últimos años debido a su dificultad matemática. Es por ello que un problema aparentemente simple, como es la inyección de un haz monoenergético de partículas de sección transversal estrecha en un gas diluido, no pudo ser resuelto hasta el presente. Este proceso, que puede considerarse como una primera aproximación al problema de la penetración de un haz de partículas en la materia, nos motivó para intentar resolver la ecuación de Boltzmann anisotrópica para modelos de Maxwell en la forma de un desarrollo en términos de las autofunciones del correspondiente operador linealizado de colisión. Estudiamos el caso bidimensional. Sin embargo debemos destacar que el mismo análisis puede ser generalizado sin mayor dificultad para incluir a sistemas de cualquier dimensión. El desarrollo en autofunciones es adecuado para el estudio numérico de la relajación al equilibrio a energías no muy altas. Diseñamos un algoritmo

que, al permitir operar con los momentos  $C_{NQ}(t)$  como expresiones algebraicas, hace posible resolver la ecuación de Boltzmann anisotrópica en la forma de un desarrollo para  $f(\vec{p}, t)$  truncado en órdenes  $N_0 = 30$  o mayores. Para ciertas condiciones iniciales simples observamos, además del conocido efecto Tjon, interesantes fenómenos de decaimiento monótono y de transitorios subpoblados y sobrepoblados a energías de orden térmico. Estos efectos pueden ocurrir simultáneamente en un mismo valor de la energía para distintos ángulos, lo cual habla de la complejidad creciente de los procesos de relajación en el caso anisotrópico, respecto del relativamente simple caso isotrópico. Debemos mencionar además el 'efecto de proximidad' el cual ocurre cuando partículas de una zona muy poblada invaden una región despoblada cercana dando lugar a un muy fuerte efecto de sobrepoblación transitoria. Encontramos también un nuevo fenómeno de relajación que denominamos de "expansión preferencial". En este fenómeno una gran proporción de partículas inicialmente restringidas a un estrecho rango de energías puede llegar a presentar una relajación muy rápida en la dirección angular y lenta en la dirección radial en el espacio de los impulsos. Por último establecimos un criterio para deducir a partir de la condición inicial las características generales del acercamiento final al equilibrio a altas energías. En general el acercamiento al equilibrio no depende del valor del ángulo siempre que el momento  $C_2 = \int L_2^{N-1}(p^2/2mkT) \cdot f(\vec{p}, 0) \cdot d\vec{p}$  sea distinto de cero. El acercamiento al equilibrio será por arriba o por debajo dependiendo de que  $C_2$  sea positivo o negativo respectivamente. Si el momento  $C_2$  es nulo el criterio debe ser extendido hasta incluir al término no nulo de decaimiento más lento.

Hemos intentado aplicar estos últimos resultados al problema de la inyección de un haz momenergético de partículas en un gas en equilibrio, modelando esta situación con una distribución inicial caracterizada por un pico muy agudo centrado en el impulso del haz incidente. Sin

embargo en este caso se han presentado serios problemas de convergencia en el desarrollo de Laguerre asociado. Para vencer estas dificultades hemos comenzado a investigar la posibilidad de desarrollar una técnica de aproximantes racionales de varias variables, de tipo similar a los empleados en el caso isotrópico.

En el último capítulo investigamos la validez de la suposición de linealidad en el modelo de cascadas para el proceso de Sputtering por bombardeo iónico, aplicando para ello los resultados obtenidos en los capítulos anteriores. Evaluamos los espectros de energía  $S(\epsilon)$  de las partículas emitidas y la eficiencia del proceso de Sputtering para el caso no lineal en los modelos de interacción de Maxwell y partícula muy dura, comparando dichas expresiones con los resultados de la teoría de cascadas lineales. Si bien encontramos el mismo comportamiento cualitativo, varias de las discrepancias observadas experimentalmente respecto de las predicciones teóricas podrían ser debidas a efectos no lineales no considerados en dicho modelo: En general los resultados obtenidos en el caso linealizado son aproximadamente un 50 % menores que en el caso no lineal. Encontramos que en cierto rango de energías el espectro  $S(\epsilon)$  muestra un comportamiento del tipo  $1/\epsilon^2$ , el cual ha sido ampliamente verificado por la experiencia. Sin embargo en ciertos casos, como ser en el proceso de 'Sputtering Explosivo' propuesto por Haff, dicho rango de energías es muy estrecho y por ende tal comportamiento no es observable. En tales situaciones el espectro de energía presenta un comportamiento de tipo exponencial. En cuanto a la dependencia de la eficiencia total de sputtering con respecto a la barrera de potencial  $\epsilon_b$  encontramos que no verifica la ley  $1/\epsilon_b$  predicha en trabajos anteriores.

Ya hemos mencionado la necesidad de lograr algunas mejoras en el modelo no lineal desarrollado en este trabajo. Las suposiciones de isotropía y homogeneidad representan una aproximación a la descripción de la penetración de partícu-

las en la materia. En particular la primera contradice el hecho de que la condición inicial presenta una muy importante anisotropía en la dirección de incidencia del proyectil. En este sentido el análisis establecido en el capítulo 4 provee la técnica necesaria para atacar esta generalización del modelo. Sin embargo los problemas de convergencia mencionados anteriormente deben ser resueltos para lograr el desarrollo de esta línea de investigación. En cuanto a la suposición de homogeneidad es mucho más difícil de evitar. De hecho es muy poco lo que se ha estudiado hasta el presente sobre la ecuación de Boltzmann no lineal inhomogénea. La presencia simultánea de las variables espacio e impulso plantea una formidable dificultad. Naturalmente sería una línea de trabajo muy prometedora pero por el momento, también, demasiado ambiciosa.

## 7 - REFERENCIAS

- 
- Abramowitz M. y Stegun I.A. 1972, 'Handbook of Mathematical Functions' (Dover Publ., New York).
- Alexanian M. 1979, Phys.Lett.74 A, 1.
- Almén O. y Bruce G. 1961, Nucl.Instrum.Methods 11, 257, 279.
- Andersen H.H. y Bay H. 1972, Rad.Eff.13, 67.
- 1973, Rad.Eff.19, 139.
- 1975, J.Appl.Phys.46, 2416.
- 1981, 'Sputtering Yield Measurements' en 'Sputtering by Particle Bombardment I', editor: Behrisch R. (Springer-Verlag, Berlin).
- Arkeryd L. 1972, Arch.Rat.Mech.Anal.45, 1.
- Arkeryd L. 1981, Arch.Rat.Mech.Anal.77, 11.
- Bahcall J.N. y Davis Jr. R. 1976, Science 191, 264.
- Baker Jr. G.A. 1975, 'Essentials of Padé Approximants', (Academic Press, New York).
- Barnsley M.F. y Cornille H. 1980, J.Math.Phys.21, 1176.
- Barnsley M.F. y Turchetti G. 1979a, Lett.Nuov.Cim.26, 188.
- 1979b, Phys.Lett.72 A, 417.
- 1981, Nuov.Cim.65, 1.
- Behrisch R.(ed.) 1981a, 'Sputtering by Particle Bombardment I' (Springer-Verlag, Berlin).
- 1981b, 'Sputtering by Particle Bombardment II' (Springer-Verlag, Berlin).
- 1982, 'Sputtering by Particle Bombardment III' (Springer-Verlag, Berlin).
- Bobylev A.V. 1976a, Sov.Phys.Dokl.20, 820.
- 1976b, Sov.Phys.Dokl.20, 822.
- 1980, Sov.Phys.Dokl.25, 257.
- 1982, Sov.Phys.Dokl.27, 29.

- Brey J.J., Gómez Ordóñez J. y Santos A. 1982, Phys.Rev.A 26, 2817.
- 1984a, J.Chem.Phys.80, 5155.
- Brey J.J., León J. y Santos A. 1984b, Phys.Lett.106 A, 123.
- Brush S.G. 1972, 'Kinetic Theory III' (Pergamon Press, Oxford).
- Caflisch R.E. 1980, Comm.Math.Phys.74, 97.
- Carleman T. 1957, 'Problemes mathématiques dans la théorie cinétique des gaz' (Almqvist and Wiksells, Uppsala).
- Cercignani C. 1969, 'Mathematical Methods in Kinetic Theory' (Plenum Press, New York).
- 1975, 'Theory and applications of the Boltzmann Equation', (Scottish Academic Press).
- 1983, 'Solution of the Boltzmann Equation' en 'Studies in Statistical Mechanics X: Nonequilibrium Phenomena I', editores: Lebowitz J. y Montroll E., 122 (North Holland Publ.Co., Amsterdam).
- Clayton D.D., Dwek E., Newman M.J. y Talbot R.J. 1975, Astrophys.J.199, 494.
- Cornille H. y Gervois A. 1980a, Phys.Lett.79 A, 291.
- 1980b, J.Stat.Phys.23, 167.
- 1982a, Physica 6D, 1.
- 1982b, Physica 6D, 29.
- Chapman S. 1917, Proc.Roy.Soc.London A 93, 1. Una copia de este trabajo ha sido publicada en Brush 1972.
- Chapman S. y Cowling T.G. 1958, 'The Mathematical Theory of Non-uniform gases' (Cambridge University Press).
- Duderstand J. y Martin W. 1979, 'Transport Theory' (Wiley & Sons, New York).
- Elmroth T. 1983, Arch.Rat.Mech.Anal.82, 1.
- Enskog D. 1917, 'Kinetische Theorie der Vorgänge in massig verdunnten Gasen (Almqvist & Wiksells Boktritzceri-A.B., Uppsala). Una traducción al inglés de este trabajo ha sido publicada en Brush 1972.
- Erdélyi A., ed. 1953, 'Higuer Transcendental Functions, vol I (Mc.Graw Hill Book Company, New York).
- Ernst M.H. 1979, Phys.Lett.69 A, 390.

- 1981, Phys.Rep.78, 1.
- 1984, J.Stat.Phys.34, 1001.
- Ernst M.H. y Hendriks E.M. 1981, Phys.Lett.B1 A, 371.
- Gassiot J.P. 1858, Proc.R.Soc.London 9, 146.
- Gordon R.G. 1968, J.Math.Phys.9, 655.
- Grad H. 1949, Comm.Pure Appl.Math.4, 331.
- 1958, 'Handbuch der Physik, band XII, editor: Flugge S. (Springer-Verlag, Berlin).
- 1965, Proc.Symp.Appl.Math.17, Amer.Math.Soc., 154.
- Grove W.R. 1853, Philos.Mag.5, 203.
- Haff P.K. 1976, Appl.Phys.Lett.29, 473.
- Hardy J., Pomeau Y. y de Pazzis O. 1973, J.Math.Phys.14, 1746.
- Hauge E.H. 1979, Phys.Lett.74 A, 183.
- Hauge E.H. y Praestgaard E. 1981, J.Stat.Phys.24, 21.
- Hendriks E.M. y Ernst M.H. 1983, Physica 120A, 545.
- Hendriks E.M. y Nieuwenhuizen T.M. 1982, J.Stat.Phys.29, 591.
- Henrici P. 1977, 'Applied and Computational Complex Analysis' (John Wiley & Sons, New York).
- Hilbert D. 1912, Math.Ann. 72, 562. Una copia de este trabajo se encuentra en Brush 1972.
- Hiraoka N., Kilazue Y. y Yamamura Y. 1981, Rad.Eff.Lett. 67, 7.
- Huang K. 1965, 'Statistical Mechanics' (John Wiley & Sons, New York).
- Ikenberry E. y Truesdell C. 1956, J.Rat.Mech.Anal.5, 1.
- Illner R. y Shinbrot M. 1984, 'The Boltzmann Equation: Global Existence for a Rare Gas in an Infinite Vacuum', trabajo no publicado.
- Keywell F. 1955, Phys.Rev.97, 1611.
- Klein M.J., ed. 1959, 'Collected Scientific Papers of Paul Ehrenfest', pag.229 (North Holland Publ.Co., Amsterdam).
- Krook M. y Wu T.T. 1976, Phys.Rev.Lett.36, 1107.
- 1977a, Phys.Fluids 20, 1589.
- 1977b, Phys.Rev.Lett.38, 991.
- Morgenstern D. 1955, J.Rat.Anal.4, 533.

- Nikol'skii A.A. 1964, Sov.Phys.Dokl.8, 633, 639.
- Palczewski A. 1981, Arch.Mech.33, 973.
- 1982, Arch.Mech.34, 287.
- Pao Y.P. 1967, J.Math.Phys.8, 1893.
- Pease R.S. 1960, Rendiconti della Scuola Internazionale di Fisica 'Enrico Fermi', Corso XIII, 158.
- Plucker J. 1858, Ann.Phys.(Leipzig) 105, 67.
- Reed M. y Simon B. 1972, 'Methods of Modern Mathematical Physics, vol I (Academic Press, New York).
- Robinson M. 1968, Phil.Mag.17, 639.
- Rol P.K., Fluit J.M. y Kistemaker J. 1960, Physica 26, 1000.
- Rutishauser H. 1957, 'Der Quotienten-Differenzen Algorithmus' (Birkhauser, Basel/Stuttgart).
- Shizuta Y. 1983, Comm.Pure Appl.Math.36, 705.
- Sigmund P. 1969a, Phys.Rev.184, 383.
- 1969b, Phys.Rev.187, 768.
- 1972, Rev.Roum.Phys.17, 823, 969, 1079.
- 1981, 'Sputtering by Ion Bombardment, Theoretical Concepts' en 'Sputtering by Particle Bombardment I', editor: Behrisch R. (Springer-Verlag, Berlin).
- Simons S. 1978, Phys.Lett.69 A, 239.
- Tjon J.A. 1979, Phys.Lett.70 A, 369.
- Tjon J.A. y Wu T.T. 1979, Phys.Rev.A 19, 883.
- Thompson M.W. 1968, Philos.Mag.18, 377.
- Truesdell C. y Muncaster R.G. 1980, 'Fundamentals of Maxwell's Kinetic Theory of a Simple Monatomic Gas' (Academic Press, New York).
- Turchetti G. y Paolilli M. 1982, Phys.Lett.90 A, 123.
- Ukai S. 1974, Proc.Japan.Acad.50, 179.
- Uhlenbeck G. y Ford G. 1963, 'Lectures in Statistical Mechanics' (Math.Soc., Providence).
- Vedenyapin V.V. 1981, Sov.Phys.Dokl.26, 26.
- Wehner G.K., Kenknight C.E. y Rosenber D.L. 1963, Plane. Space Sci.11, 885.
- Weller R.A. y Weller M.R. 1982, Radiat.Effects 60, 209.
- Wild E. 1951, Proc.Camb.Phil.Soc.47, 602.
- Williams M.M.R. 1984, J.Phys.D 17, 2165.

Zweifel P.F. 1984, 'The Boltzmann Equation and its Properties', trabajo no publicado.

