Vol. XVII, 1 REVISTA MEXICANA DE FISICA 1968

DESARROLLOS EN LA DENSIDAD DE LAS FUNCIONES DE DISTRIBUCION DE BOGOLYUBOV

Asdrúbal Flores L.*
Escuela de Ciencias, Universidad Veracruzana,
Jalapa, Ver., México.
Roberto Alexander K.**
Departamento de Física,
Universidad de Manchester, Inglaterra.
Gualtiero Camisassa S.
Escuela de Ciencias, Universidad Veracruzana,
Jalapa, Ver., México.
(Recibido: 6 Marzo 1968).

RESUMEN

Se hace notar que en la teoría de los coeficientes de transporte de gases densos, la forma explícita de la condición de normalización no influye ni en la jerarquia BBGKY obtenida, ni en el desarrollo en potencias de la densidad de la función de distribución de dos partículas.

* Dirección del Reactor, Centro Nuclear de México, CNEN
** Becario CNEN, México.

ABSTRACT

In the scheme of the transport coefficients of a dense-gas theory it is shown that the explicit form of the normalization condition influences neither the BBGKY hierarchy nor the power-density expansion of the two-particle distribution function.

I. INTRODUCCION

Hasta hace poco, la mayor parte de los trabajos[1 a 13] que se relacionaban con el cálculo de coeficientes de transporte, y que utilizaban el formalismo de Bogolyubov para calcular la función de distribución de dos partículas F_2, usaban la condición de normalización para la función de distribución de las N partículas en la forma sugerida por el propio Bogolyubov[14]. Recientemente, sin embargo, Dorfman y Cohen[15] han propuesto una condición de normalización diferente, que es más conveniente en el sentido de que deja a las funciones de distribución para las N partículas, y a las funciones reducidas para las S partículas, con las mismas dimensiones. El propósito de esta nota es hacer ver que, contrariamente a lo conjeturado por algunos autores[*16], aún cuando se utilicen diferentes formas para la condición de normalización, la jerarquía BBGKY[**] que se obtiene es la misma, y los desarrollos en la densidad de la función de distribución F_S no presentan diferencias si se toma en cuenta una u otra condición de normalización. Este resultado hace ver, entonces, que cualquier tentativa para remover las divergencias que se encuentran en el cálculo de los coeficientes de transporte para un gas denso, que tenga como base la elección de una forma determinada de la condición de normalización, no tendrá resultados novedosos.

---

* Ver la excelente y completa bibliografía reunida en esta referencia así como los comentarios que ahí se vierten sobre este tema.

** BBGKY = Born, Bogolyubov, Green, Kirkwood, Yvon.

II. LA JERARQUIA BBGKY

Deduciremos paralelamente la jerarquía de ecuaciones BBGKY utilizando las dos condiciones de normalización

$$F_S (X_1^S ; t) = V^S \int \ldots \int D_N (X_1^N ; t)\, dX_{S+1}^N \tag{II-1a}$$

(Bogolyubov)

y

(Dorfman y Cohen)

$$F_S (X_1^S ; t) = V^S \int \ldots \int \frac{D_N (X_1^N ; t)}{V^N}\, dX_{S+1}^N \tag{II-1b}$$

donde hemos utilizado la notación

$$X_1^i \equiv x_1, x_2, \ldots, x_i$$
$$\text{(II-2)}$$
$$dX_1^i \equiv dx_1, dx_2, \ldots, dx_i$$

Ya que la evolución en el tiempo de la función de distribución para las N partículas está dado por la ecuación de Liouville,

$$\frac{\partial D_N}{\partial t} = - H_N D_N \tag{II-3}$$

donde $$H_N = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial q_1} - \sum_{i<j} \theta_{ij} \tag{II-4}$$

y

$$\theta_{ij} \equiv \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial \mathrm{q}_i} \frac{\partial}{\partial \mathrm{p}_i} + \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial \mathrm{q}_j} \frac{\partial}{\partial \mathrm{p}_j}$$

siendo ϕ_{ij} el potencial intermolecular; si tomamos la derivada parcial con respecto al tiempo de las expresiones (II-1), y utilizamos el hecho de que el operador Hamiltoniano H_N podemos escribirlo como

$$H_N = H_S + H_{S,\,N-S} \tag{II-5}$$

tal que $$H_S = \sum_{i=1}^{S} \frac{\mathrm{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathrm{q}_i} - \sum_{i<j} \theta_{ij}$$

y $$H_{S,\,N-S} = \sum_{i=S+1}^{N} \frac{\mathrm{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathrm{q}_i} - \sum_{i=S}^{N-1} \sum_{j=S+1}^{N} \theta_{ij} + \sum_{i=1}^{S} \sum_{j=S+1}^{N} \theta_{ij}$$

las ecuaciones (II-1) nos quedarán como

$$\frac{\partial F_S}{\partial t} + H_S F_S = V^S (N-S) \sum_{i\leqslant S} \int \ldots \int \theta_{i,\,S+1}\, D_N \, dX_{S+1}^N \tag{II-6a}$$

$$\frac{\partial F_S}{\partial t} + H_S F_S = V^S (N-S) \sum_{i\leqslant S} \int \ldots \int \theta_{i,\,S+1} \frac{D_N}{V_N} \, dX_{S+1}^N \tag{II-6b}$$

Asimismo tendremos

$$\mathcal{D} F_S = V^S (N-S) \sum_{i\leqslant S} \int dx_{S+1} \int \ldots \int \theta_{i,\,S+1}\, D_N \, dX_{S+2}^N \tag{II-7a}$$

$$\mathcal{D} F_S = V^S (N - S) \sum_{i \leq S} \int dx_{S+1} \int \ldots \int \theta_{i,S+1} \frac{D^N}{V^N} dX^N_{S+2} \qquad \text{(II-7b)}$$

donde hemos utilizado la notación

$$\mathcal{D} F_S \equiv \frac{\partial F_S}{\partial t} + H_S F_S$$

Ya que de (II-1a) y (II-1b) respectivamente se tiene

$$F_{S+1} (X_1^{S+1}; t) = V^{S+1} \int \ldots \int D_N (X_1^N; t)\, dX^N_{S+2} \qquad \text{(II-8a)}$$

y

$$F_{S+1} (X_1^{S+1}; t) = V^{S+1} \int \ldots \int \frac{D_N (X_1^N; t)}{V^N}\, dX^N_{S+2} \qquad \text{(II-8b)}$$

entonces (II-7a) y (II-7b) se reducirán a

$$\mathcal{D} F_S = \frac{(N - S)}{V} \sum_{i \leq S} \int dx_{S+1}\, \theta_{i,S+1} F_{S+1} (X_1^{S+1}; t)$$

lo cual en el límite termodinámico, cuando $N \to \infty$, $V \to \infty$, y $v = V/N =$ cte., se reduce a

$$\mathcal{D} F_S = \frac{1}{v} \sum_{i \leq S} \int dx_{S+1}\, \theta_{i,S+1} F_{S+1} (X_1^{S+1}; t) \qquad \text{(II-9)}$$

que es la jerarquía de ecuaciones BBGKY.

Esto es, las dos condiciones de normalización, (II-1a) y (II-1b) nos han conducido a la jerarquía BBGKY.

III. SOLUCION FORMAL DE LA JERARQUIA BBGKY[16]

Escribamos la jerarquía BBGKY en la forma siguiente

$$\frac{\partial}{\partial t} F_S (X_1^S ; t) = - H_S F_S (X_1^S ; t) + f(X_1^S ; t) \tag{III-1}$$

donde

$$f(X_1^S ; t) = \frac{1}{v} \int \sum_{i \leq S} dx_{S+1} \, \theta_{i, S+1} \, F_{S+1} (X_1^{S+1} ; t) \tag{III-2}$$

Construyamos una función $u(X_1^S ; t)$ tal que

$$F_S (X_1^S ; t) = \mathsf{S}_{-t}^{(S)} \, u(X_1^S ; t) \tag{III-3}$$

donde

$$\mathsf{S}_{-t}^{(S)} = e^{-H_S t} \tag{III-4}$$

es conocido como el operador de evolución en el tiempo. Entonces

$$\frac{\partial}{\partial t} F_S (X_1^S ; t) = - H_S \, \mathsf{S}_{-t}^{(S)} u(X_1^S ; t) + \mathsf{S}_{-t}^{(S)} \frac{\partial}{\partial t} u(X_1^S ; t)$$

pero de (III-3)

$$\frac{\partial}{\partial t} F_S (X_1^S ; t) = - H_S F_S (X_1^S ; t) + \mathsf{S}_{-t}^{(S)} \frac{\partial}{\partial t} u(X_1^S ; t) \tag{III-5}$$

Comparando (III-5) y (III-1) tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} u(X_1^S ; t) = \mathsf{S}_{t}^{(S)} f(X_1^S ; t)$$

de donde

$$u(X_1^S;\, t) = u(X_1^S,\, 0) + \int_0^t \mathsf{S}_\tau^{(S)} f(X_1^S;\, \tau)\, d\tau \qquad \text{(III-6)}$$

Substituyendo (III - 3) en (III - 6) se obtiene

$$\mathsf{S}_t^{(S)} F_S(X_1^S;\, t) = F_S(X_1^S;\, 0) + \int_0^t \mathsf{S}_\tau^{(S)} f(X_1^S;\, \tau)\, d\tau \qquad \text{(III-7)}$$

y finalmente, aplicando $\mathsf{S}_{-t}^{(S)}$ a los dos miembros de la ecuación (III - 7) se obtiene

$$F_S(X_1^S;\, t) = \mathsf{S}_{-t}^{(S)} F_S(X_1^S;0) + \frac{1}{v}\int d\tau\, \mathsf{S}_{-(t-\tau)}^{(S)} \int dx_{S+1} \sum_{i<S} \theta_{i,\,S+1} F_{S+1}(X_1^{S+1};\, \tau) \qquad \text{(III-8)}$$

donde el primer término del segundo miembro representa la "influencia" en la evolución de la función de distribución debida a la interacción mutua de las S partículas, y el segundo término representa la "influencia" de las demás partículas en la evolución de $F_S(X_1^S;\, t)$.

IV. DESARROLLO EN LA DENSIDAD.

Para $F_{S+1}(X_1^{S+1};\, t)$ la ecuación (III - 8) puede escribirse como

$$F_{S+1}(X_1^{S+1};\, t) = \mathsf{S}_{-t}^{(S+1)} F_{S+1}(X_1^{S+1};\, 0) +$$

$$\frac{1}{v}\int_0^t d\tau'\, \mathsf{S}_{-(t-\tau')}^{(S+1)} \int dx_{S+2} \sum \theta_{i,\,S+2} F_{S+2} \qquad \text{(IV-1)}$$

Substituyendo (IV - 1) en (III - 8) se obtiene

$$F_S(X_1^S; t) = \mathsf{S}_{-t}^{(S)} F_S(X_1^S; 0) + \frac{1}{v}\int_0^t d\tau\, \mathsf{S}_{-(t-\tau)}^{(S)} \int dx_{S+1} \times$$

$$\times \sum_{i<S} \theta_{i,S+1}\, \mathsf{S}_{-\tau}^{(S+1)} F_{S+1}(X_1^{S+1}; 0) +$$

$$+ \frac{1}{v^2}\int_0^t d\tau\, \mathsf{S}_{-(t-\tau)}^{(S)} \int dx_{S+1} \sum_{i=1}^{S} \theta_{i,S+1} \int_0^{\tau-(t-\tau)} \mathsf{S}_{-(\tau-\tau')}^{(S+1)} \int dx_{S+2} \times$$

$$\times \sum_{i<S} \theta_{i,S+2} F_{S+2}(X_1^{S+2}; \tau') + . \qquad \text{(IV - 2)}$$

Similarmente, si substituimos F_{S+2} en (IV - 2), obtendremos

$$F_S(X_1^S; t) = \mathsf{S}_{-t}^{(S)} F_S(X_1^S;0) + \frac{1}{v}\int_0^t d\tau\, \mathsf{S}_{-(t-\tau)}^{(S)} \int dx_{S+1} \times$$

$$\times \sum_{i<S} \theta_{i,S+1}\, \mathsf{S}_{-\tau}^{(S+1)} F_{S+1}(X_1^{S+1}; 0) +$$

$$+ \frac{1}{v^2}\int_0^t d\tau\, \mathsf{S}_{-(t-\tau)}^{(S)} \int dx_{S+1} \sum_{i=1}^{S} \theta_{i,S+1} \int_0^{\tau} d\tau'\, \mathsf{S}_{-(\tau-\tau')}^{(S+1)} \int dx_{S+2} \times$$

$$\times \sum_{i=1}^{S+1} \theta_{i,S+2}\, \mathsf{S}_{-\tau'}^{(S+2)} F_{S+2}(X_1^{S+2}; 0) + ..$$

Si continuamos substituyendo indefinidamente, llegaremos al desarrollo en potencias de la densidad obtenido por Bogolyubov.

Analizaremos ahora este desarrollo con respecto a las condiciones de normalización (II-1).

Escribamos la ecuación (IV-3) como

$$F_S(X_1^S;t) = \Xi^{(1)} F_S(X_1^S;0) + \frac{1}{v}\Xi^{(2)} F_{S+1}(X_1^{S+1};0) + \frac{1}{v^2}\Xi^{(3)} F_{S+2}(X_1^{S+2};0) + \ldots \tag{IV-4}$$

donde los $\Xi^{(j)}$ son operadores definidos como

$$\Xi^{(1)} = \mathsf{S}_{-t}^{(S)}$$

$$\Xi^{(2)} = \int_0^t d\tau\, \mathsf{S}_{-(t-\tau)}^{(S)} \int dx_{S+1} \sum_{i<S} \theta_{i,S+1}\, \mathsf{S}_{-\tau}^{(S+1)}$$

$$\Xi^{(3)} = \int_0^t d\tau\, \mathsf{S}_{-(t-\tau)}^{(S)} \int dx_{S+1} \sum_{i<S} \theta_{i,S+1} \int_0^\tau d\tau'\, \mathsf{S}_{-(\tau-\tau')}^{(S+1)} \int dx_{S+2} \sum_{i<S} \theta_{i,S+2}\, \mathsf{S}_{-\tau'}^{(S+2)}$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots \tag{IV-5}$$

Substituyendo, paralelamente, en (IV-4), las condiciones de normalización (II-1) obtendremos

$$[F_S(X_1^S;t)]_B = \Xi^{(1)} V^{(S)} \int\ldots\int D_N(X^N;0)\, dX_{S+1}^N +$$

$$+ \frac{1}{v}\,\Xi^{(2)} V^{(S+1)} \int\ldots\int D_N(X_1^N;0)\, dX_{S+2}^N +$$

$$+\frac{1}{v^2}\Xi^{(3)}\, V^{(S+2)}\int\ldots\int D_N\,(X_1^N;\,0)\,dX_{S+3}^N+\ldots$$

$$[F_S\,(X_1^S;\,t)\,]_C=\Xi^{(1)}\,V^{(S)}\int\ldots\int\frac{D_N\,(X_1^N;\,0)}{V^N}\,dX_{S+1}^N+$$

$$+\frac{1}{v}\,\Xi^{(2)}\,V^{(S+1)}\int\ldots\int\frac{D_N\,(X_1^N;\,0)}{V^N}\,dX_{S+2}^N+$$

$$+\frac{1}{v^2}\Xi^{(3)}\,V^{(S+2)}\int\ldots\int\frac{D_N\,(X_1^N;\,0)}{V^N}\,dX_{S+3}^N+\ldots$$

y de aquí escribimos

$$[\,\frac{1}{V^S}\,F_S\,(X_1^S;\,t)\,]_B=\Xi^{(1)}\int\ldots\int D_N\,dX_{S+1}^N+$$

$$+N\,\Xi^{(2)}\int\ldots\int D_N\,dX_{S+2}^N+N^2\,\Xi^{(3)}\int\ldots\int D_N\,dX_{S+3}^N+\ldots \qquad \text{(IV - 6a)}$$

$$[\,\frac{1}{V^S}\,F_S\,(X_1^S;\,t)\,]_C=\frac{1}{V^N}\,\Xi^{(1)}\int\ldots\int D_N\,dX_{S+1}^N+$$

$$\frac{N}{V^N}\,\Xi^{(2)}\int\ldots\int D_N\,dX_{S+2}^N+\frac{N^2}{V^N}\,\Xi^{(3)}\int\ldots\int D_N\,dX_{S+3}^N+\ldots \qquad \text{(IV - 6b)}$$

Esto es, en ambos casos (para las dos diferentes normalizaciones) existe un desarrollo en la densidad de la función de distribución de S partículas.

Trivialmente, si substituimos, respectivamente, en (IV - 6a) y (IV - 6b), las condiciones de normalización (II - 1a) y (II - 1b), encontraremos que los desarrollos en la densidad son idénticos.

V. CONCLUSIONES.

Como se hizo notar en la sección II, la forma de la jerarquía de ecuaciones BBGKY no depende de la condición de normalización que se emplee. En efecto, si utilizamos cualquiera de las siguientes condiciones de normalización,

$$
\begin{aligned}
&{}_{(1)}\, F_S(X_1^S;t) = V^S \int \ldots \int D_N(X_1^N;t)\, dX_{S+1}^N \\
&{}_{(2)}\, F_S(X_1^S;t) = V^S \int \ldots \int \frac{D_N(X_1^N;t)}{V}\, dX_{S+1}^N \\
&\qquad \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \\
&{}_{(N+1)}\, F_S(X_1^S;t) = V^S \int \ldots \int \frac{D_N(X_1^N;t)}{V^N}\, dX_{S+1}^N
\end{aligned}
\qquad (V-1)
$$

la jerarquía BBGKY que se obtiene de la ecuación de Liouville es la misma. Esto es, al menos formalmente, con respecto a esta jerarquía, hay $N+1$ formas diferentes de normalizar las funciones reducidas F_S.

Por otra parte, como vimos en la sección IV, el hecho de que las funciones F_S pueden aceptar diferentes formas de normalización, no afecta el desarrollo en la densidad de estas funciones.

Evidentemente entonces, el problema de las divergencias que presenta este desarrollo, no depende explícitamente de la condición de normalización impuesta sobre F_S.

REFERENCIAS

1. Choh, S. and Uhlenbeck, G., "The Kinetic Theory of Phenomena in Dense Gases", University of Michigan (No publicado).
2. Frieman, E., y Goldman, R.J., Math. Phys. 7, 2153 (1966).

3. Andrews, F., J.Math.Phys. **6**, 1496 (1965).
4. Sandri, G., ARAP Report No. 92 (1966).
5. Sandri, G. y Yates, J., ARAP Report No. 98 (1966).
6. Goldberg, P. y Sandri, G., Phys.Rev. **154**, 188 (1967).
7. Lewis, R., J.Math.Phys. **8**, 19448 (1967).
8. Flores, L.A., Rev.Mex.Fís. **2**, 129 (1966).
9. García-Colín, S.L., Green, M.S. y Chaos, F., Physica **32**, 450 (1966).
10. García-Colín, S.L. y Flores, L.A., J.Math.Phys. **7**, 254 (1966).
11. García-Colín, S.L. y Flores, L.A., Physica **32**, 289, 444 (1966).
12. Ernst, M.H., Physica **32**, 209 (1966).
13. Chaos, F. y García-Colín, S.L., Phys. Fluids **9**, 382 (1966).
14. Bogolyubov, N.N. "Problems of Dynamical Theory in Statistical Mechanics", Studies in Statistical Mechanics Vol. I, North Holland, 1962.
15. Dorfman, J.R. y Cohen, E.G.D., J.Math.Phys. **8**, 282 (1967).
16. García-Colín, S.L., "Teoría Cinética de los Gases Densos", Escuela Latinoamericana de Física, Universidad Central de Venezuela 1966 (Por publicarse por Gordon & Breach, Nueva York).