

Mathematik kollektiven Verhaltens

Einführung in mikroskopische Modelle

Christian Himpe

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Sommersemester 2008

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung

- Das Modell
- Voraussetzung an die Partikel
- Ableitungen nach der Zeit
- Die Newtonschen Axiome
- Evolutionsgleichung
- Vorgehen

2. Die Newtonschen Bewegungsgleichungen

- Newtonschen Bewegungsgleichungen für 1 Teilchen
- Newtonschen Bewegungsgleichungen für 2 Teilchen
- Newtonschen Bewegungsgleichungen für N Teilchen
- Beispiel

3. Die Liouville Gleichung

- Der $6N$ -dimensionale Phasenraum
- Beispiel
- Herleitung der Liouville Gleichung

4. Die BBGKY-Hierarchie

- Die Ein-Teilchen Distribution
- Herleitung der BBGKY-Hierarchie

5. Die Vlasov Gleichung

- Molekulares Chaos
- Herleitung der Vlasov-Gleichung
- Eigenschaften der Vlasov-Gleichung

6. Die Boltzmann Gleichung

- Herleitung

7. Literaturverzeichnis

1. Einleitung

Das Modell

Bei der Betrachtung von Systemen von Partikeln unterscheidet man drei verschiedene Modelle. Zum einen das mikroskopische Modell, bei welchem jeder Partikel durch eine Evolutionsgleichung ausgewertet wird. Bei dem makroskopischen Modell werden Durchschnitte über lokale Gruppen von Partikeln betrachtet. Bei dem statistischen Modell wird das gesamte System von Partikeln ausgewertet. Im Folgenden wird ausschließlich das mikroskopische Modell gezeigt.

Voraussetzungen an die Partikel

Das Ziel ist es, ein System von N Partikeln in Form von kleinen harten Kugeln zu beschreiben. Es wird angenommen, dass nur inelastische Stöße zwischen den kugelsymmetrischen Partikeln bei Kollisionen miteinander stattfinden. Alle Partikel können sich frei in alle Richtungen bewegen. Die Position eines Partikels wird durch die Position seines Masseschwerpunktes bestimmt. Sei nun $\Omega \in \mathbb{R}^3$ der Raum in dem sich die Partikel ($x_k \in \Omega : k=1, \dots, N$) mit Radius σ befinden. Desweiteren stelle man sich die Partikel nummeriert vor. Physikalisch soll der Raum ein Vakuum sein, so dass keine Kräfte wie beispielsweise Luftreibung auftreten. So ist den Partikeln eine geradlinig gleichförmige Bewegung möglich nur mit ihrer Startgeschwindigkeit.

Ableitungen nach der Zeit

Ableitungen nach der Zeit (für gewöhnlich durch t symbolisiert), also $\frac{d}{dt}$, werden an den differenzierten Funktionen durch einen Punkt über Funktion gekennzeichnet, im Gegensatz zu dem in der Mathematik üblichen Strich ('). Ein Beispiel: $\frac{df}{dt} = \dot{f}$. Ebenso werden höhere Zeitableitungen durch die entsprechende Punktzahl kenntlich gemacht.

Die Newtonschen Axiome

Die Grundlage der klassischen Mechanik bilden die Newtonschen Axiome. Diese sind die Voraussetzung an die kommenden Modelle, insbesondere an das der Newtonschen Bewegungsgleichungen.

1. Galileische Trägheitsgesetz

Ein Koordinatensystem, in dem sich ein oder mehrere Körper geradlinig gleichförmig bewegen (das schließt die Ruheposition ein), heißt Inertialsystem.

2. Bewegungsgesetz

Eine Kraft verhält sich proportional zu der zeitlichen Änderung des Impulses, also: $F = \dot{p} = d(m_t * v) / dt$. Für nicht zeitabhängige Masse ergibt sich: $F = m_0 * \ddot{x} = m_0 * a$.

3. Reaktionsprinzip

Die Kraft, die Körper A auf Körper B ausübt, ist gleich der negativen, Kraft, die Körper B auf Körper A ausübt. $F_{AB} = -F_{BA}$

Evolutionsgleichung

Der Begriff Evolutionsgleichung, der im Folgenden verwendet wird, ist nicht klar definiert. Hier soll er für eine (gewöhnliche oder partielle) Differentialgleichung stehen, die die zeitliche Veränderung des Systems von Partikeln beschreibt.

Vorgehen

Zuerst wird die Lösung mittels klassischer Mechanik betrachtet, danach die Liouville Gleichung und daraus folgend die BBGKY-Hierarchie. Dann die Vlasov-Gleichung für stoßfreie Systeme und die Boltzmann-Gleichung für Systeme mit Kollisionen.

2. Die Newtonschen Bewegungsgleichungen

Newtonsche Bewegungsgleichung für 1 Teilchen

Für ein System mit einem Partikel gilt:

$$\ddot{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{F}}{m} = \frac{\mathbf{f}_{ex}}{m} \Rightarrow \begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v} \\ \dot{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{F}}{m} \end{cases} \quad (2.1)$$

Um die Bewegung dieses trivialen Systems zu lösen, muss man eine Differentialgleichung 2.ter Ordnung bzw ein System aus zwei Differentialgleichungen 1.ter Ordnung lösen. Angenommen, es wirken keine äußeren Kräfte auf das System, also $\mathbf{f}_{ex} = 0$, dann bewegt sich dieser Partikel, entsprechend seiner Anfangsbedingungen, vom Startpunkt $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^3$ in Richtung $\dot{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{v}_0 \in \mathbb{R}^3$ mit der Geschwindigkeit $|\mathbf{v}_0|$.

Newtonsche Bewegungsgleichung für 2 Teilchen

Für ein System mit zwei Partikeln kann man nun ebenso ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen schreiben:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}}_1 = \mathbf{v}_1 \\ \dot{\mathbf{v}}_1 = \frac{\mathbf{f}_{ex}}{m_1} + \frac{\mathbf{f}_{21}}{m_1} \\ \dot{\mathbf{x}}_2 = \mathbf{v}_2 \\ \dot{\mathbf{v}}_2 = \frac{\mathbf{f}_{ex}}{m_2} + \frac{\mathbf{f}_{12}}{m_2} \end{cases} \quad (2.2)$$

mit den entsprechenden Anfangsbedingungen für $\mathbf{x}_{1_0}, \mathbf{v}_{1_0}, \mathbf{x}_{2_0}, \mathbf{v}_{2_0}$. Man kann bei einem solchen System aber auch anders vorgehen. Dann führt man zuerst eine

Schwerpunktkoordinate: $\mathbf{R} = \frac{m_1 * \mathbf{x}_1 + m_2 * \mathbf{x}_2}{m_1 + m_2}$ (2.3) ein, sowie eine

Relativkoordinate: $\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ (2.4)

Damit gilt zunächst (nach dem Schwerpunktsatz) $\ddot{\mathbf{R}} = \frac{\mathbf{f}_{ex}}{(m_1 * m_2)}$ (2.5)

und für die Relativkoordinate: $\ddot{\mathbf{r}} = \ddot{\mathbf{r}}_1 - \ddot{\mathbf{r}}_2 = \frac{\mathbf{f}_{1_{ex}}}{m_1} - \frac{\mathbf{f}_{2_{ex}}}{m_2} + \frac{\mathbf{f}_{12}}{m_1} - \frac{\mathbf{f}_{21}}{m_2}$ (2.6)

Nun definiert man sich eine reduzierte Masse: $\mu := \frac{m_1 * m_2}{m_1 + m_2}$ (2.7)

Man erhält so eine Relativbeschleunigung: $\ddot{r} = \frac{f_{1ex}}{m_1} - \frac{f_{2ex}}{m_2} + \frac{f_{12}}{\mu}$ (2.8)

Ist dieses System abgeschlossen, wirken also keine äußeren Kräfte ($F_{1ex} = F_{2ex} = 0$), dann sind die Gleichungen (2.5 und 2.8) entkoppelt. Die Relativbewegung erscheint nun wie ein einziges Teilchen im Kraftfeld f_{12} . Man hat also ein 2-Partikel System auf ein effektives 1-Partikel System reduziert.

Newtonsche Bewegungsgleichung für N Teilchen

Für ein System mit N Partikeln gilt folgendes System gewöhnlicher Differentialgleichungen:

$$\begin{cases} \dot{x}_k = v_k \\ \dot{v}_k = \frac{F_k}{m_k} = \frac{f_{kex}}{m_k} + \frac{1}{m_k} \sum_{l=1}^N f_{lk} \end{cases} \quad (2.9)$$

mit den Anfangsbedingungen

$$x_k(0) = x_{k_0} \quad (2.10)$$

$$v_k(0) = v_{k_0} \quad (2.11)$$

wobei zu beachten ist

$$f_{lk} = f_{kl} \text{ und } f_{kk} = 0 \quad (2.12)$$

Dies ist ein sehr großes System von Differentialgleichungen (2N Gleichungen) und daher in der Praxis sehr aufwendig zu berechnen. Desweiteren ist es sehr schwierig, hinterher von diesem mikroskopischen Modell auf ein makroskopischen Modell zu schließen. Dies ist leicht zu zeigen am Beispiel der durchschnittlichen Dichte $\rho = m * n / x$, wenn hier $n \rightarrow \infty$ (viele Partikel) und $x \rightarrow 0$ (kleine Partikel) ist das Problem offensichtlich.

Beispiel: Restringierte 3-Körper Problem

3. Die Liouville Gleichung

Der 6N- dimensionale Phasenraum

Ausgehend von dem N-Partikel System $x_k \in \Omega; k=1, \dots, N$ führt man

$$Z = (\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)_1 \times \dots \times (\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)_N \quad (3.1)$$

mit $(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)_i = (x_{i_1}, x_{i_2}, x_{i_3}, \dot{x}_{i_1}, \dot{x}_{i_2}, \dot{x}_{i_3}) = (x_{i_1}, x_{i_2}, x_{i_3}, v_{i_1}, v_{i_2}, v_{i_3})$

ein, es ist also $\dim(Z) = 6N$.

Ein $z \in Z$ gibt nun einen Zustand des Systems von Partikeln wieder. Wegen der nur inelastischen Stöße zwischen den Partikeln entfernt man alle Teile des Phasenraums, in dem sich zwei Partikel überlappen. Desweiteren schließt man alle Kollisionen von 3 oder mehr Partikel aus.

Beispiel: Zwei 1-dimensionale Teilchen.

Herleitung der Liouville Gleichung

Zumeist kennt man den Zustand des Systems von Partikeln nicht oder nur ungenau, daher führt man eine Wahrscheinlichkeitsdichte $P(z, t) = P(x, v, t)$ ein. Beschreibt man ein System zum Zeitpunkt $t + dt$, so erhält man:

$$P(x, v, t + dt) = P(x - v dt, v - \dot{v} dt, t) \quad (3.2)$$

Wendet man die Taylor Entwicklung (1.Ordnung) auf die linke und rechte Seite an, erhält man:

$$P(x, v, t + dt) = P(x, v, t) + dt * \frac{\partial P}{\partial t} + O(dt^2) \quad (3.3)$$

$$P(x - v dt, v - \dot{v} dt, t) = P(x, v, t) - dt * v * \frac{\partial P}{\partial x} - dt * \dot{v} * \frac{\partial P}{\partial v} + O(dt^2) \quad (3.4)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial P}{\partial t} = - v * \frac{\partial P}{\partial x} - \dot{v} * \frac{\partial P}{\partial v} \Rightarrow \frac{\partial P}{\partial t} + v * \frac{\partial P}{\partial x} + \dot{v} * \frac{\partial P}{\partial v} = 0 \quad (3.5)$$

die Liouville Gleichung.

Mit einem Anfangszustand $P_0(x_0, v_0)$ und der Annahme, dass P konstant entlang der Kurve $(x(t), v(t))$ ist, gilt:

$$P(x(t), v(t), t) = P_0(x_0, v_0) \quad (3.6)$$

Satz: Wenn $\sum_{i=1}^N (\frac{\partial \dot{x}}{\partial x} + \frac{\partial \dot{v}}{\partial v}) = 0 \forall t > 0$ dann ist (3.6) erfüllt.

Beweis:

Die Anzahl der Partikel im (infinitesimalen) Volumenelement $dx dv$ zur Zeit t ist gegeben durch

$$P(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t), t) dx dv(t) \quad (3.7)$$

Da keine Partikel verloren gehen gilt auch:

$$P(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t), t) dx dv(t) = P_0(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0) dx_0 dv_0 \quad (3.8)$$

Deshalb reicht es aus zu zeigen, dass:

$$dx dv = dx_0 dv_0 \quad (3.9)$$

Nach dem Transformationssatz gilt:

$$dx dv = J(t) * dx_0 dv_0 \quad (3.10)$$

mit:
$$J(t) = \left| \det \left(\frac{\partial(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t))}{\partial(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0)} \right) \right| = \left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{x}(t)}{\partial \mathbf{x}_0} & \frac{\partial \mathbf{x}(t)}{\partial \mathbf{v}_0} \\ \frac{\partial \mathbf{v}(t)}{\partial \mathbf{x}_0} & \frac{\partial \mathbf{v}(t)}{\partial \mathbf{v}_0} \end{pmatrix} \right|$$

Jetzt zeigt man, dass $\partial_t J(t) = 0$. Zuerst macht man folgende Taylor-Entwicklungen:

$$\mathbf{x}(t+\epsilon) = \mathbf{x}(t) + \epsilon \dot{\mathbf{x}}(t) + O(\epsilon^2) \quad (3.11)$$

$$\mathbf{v}(t+\epsilon) = \mathbf{v}(t) + \epsilon \dot{\mathbf{v}}(t) + O(\epsilon^2) \quad (3.12)$$

Das heißt einerseits:

$$\frac{\partial \mathbf{x}(t+\epsilon)}{\partial \mathbf{x}(t)} = I + \epsilon * \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}(t)}{\partial \mathbf{x}(t)} + O(\epsilon^2) \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}(t+\epsilon)}{\partial \mathbf{v}(t)} = I + \epsilon * \frac{\partial \dot{\mathbf{v}}(t)}{\partial \mathbf{v}(t)} + O(\epsilon^2) \quad (3.14)$$

Und da $\mathbf{x}(t)$ und $\mathbf{v}(t)$ unabhängig, sind gilt:

$$\frac{\partial \mathbf{x}(t)}{\partial \mathbf{v}(t)} = \frac{\partial \mathbf{v}(t)}{\partial \mathbf{x}(t)} = 0 \quad (3.15)$$

Andererseits:

$$\frac{\partial \mathbf{x}(t+\epsilon)}{\partial \mathbf{v}(t)} = \epsilon * \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}(t)}{\partial \mathbf{v}(t)} + O(\epsilon^2) \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial v(t+\epsilon)}{\partial x(t)} = \epsilon * \frac{\partial \dot{v}(t)}{\partial x(t)} + O(\epsilon^2) \quad (3.17)$$

Damit kann man folgende Determinante berechnen:

$$\begin{aligned} \det \frac{\partial(x, v)(t+\epsilon)}{\partial v(t)} &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial x(t+\epsilon)}{\partial x(t)} & \frac{\partial x(t+\epsilon)}{\partial v(t)} \\ \frac{\partial v(t+\epsilon)}{\partial x(t)} & \frac{\partial v(t+\epsilon)}{\partial v(t)} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 1 + \epsilon * \frac{\partial \dot{x}(t)}{\partial x(t)} & \epsilon * \frac{\partial \dot{x}(t)}{\partial v(t)} \\ \epsilon * \frac{\partial \dot{v}(t)}{\partial x(t)} & 1 + \epsilon * \frac{\partial \dot{v}(t)}{\partial v(t)} \end{pmatrix} + O(\epsilon^2) \\ &= 1 + \epsilon * \sum_i \left(\frac{\partial \dot{x}_i(t)}{\partial x_i(t)} + \frac{\partial \dot{v}_i(t)}{\partial v_i(t)} \right) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Unter der Annahme des zu beweisenden Satzes wird aus (3.18):

$$= 1 + O(\epsilon^2) \quad (3.19)$$

Und:

$$\begin{aligned} J(t+\epsilon) &= \left| \det \left(\frac{\partial(x, v)(t+\epsilon)}{\partial(x, v)(t)} * \frac{\partial(x, v)(t)}{\partial(x_0, v_0)} \right) \right| = \left| \det \left(\frac{\partial(x, v)(t+\epsilon)}{\partial(x, v)(t)} \right) * \det \left(\frac{\partial(x, v)(t)}{\partial(x_0, v_0)} \right) \right| \\ &= \left| \det \frac{\partial(x, v)(t)}{\partial(x_0, v_0)} \right| + O(\epsilon^2) = J(t) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Dann kann man endlich eine Aussage über $\partial_t J(t)$ machen:

$$\partial_t J(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} * (J(t+\epsilon) - J(t)) - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} O(\epsilon) = 0 \quad (3.21)$$

Die Transformation $(x_0, v_0) \rightarrow (x(t), v(t))$ ist die Identität für $t=0$, so dass $J(0)=1$. Daraus folgt $J(t) = 1$ für alle $t>0$, und somit ist der Satz bewiesen.

Ist P differenzierbar in

$z \in \Lambda = \{((\Omega \subset \mathbb{R}^3)^N \times \mathbb{R}^{3N}) \setminus \{|x_i - x_j| < \sigma : i, j \in \{1, 2, \dots, N(i \neq j)\}\}\}$ und $t \in \mathbb{R}, t > 0$, so erhält man die Liouville-Gleichung

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \sum_{i=1}^N v_i * \frac{\partial P}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^N \dot{v}_i * \frac{\partial P}{\partial v_i} = 0 \quad z \in \Lambda \quad (3.22)$$

Bewegen sich die Partikel geradlinig gleichförmig, erfahren also keine Beschleunigung, und wirkt keine äußere Kraft auf das System, so fällt die zweite Summe weg.

Die Liouville-Gleichung ist eine partielle Differentialgleichung. Die Randwerte sind von zwei Faktoren abhängig, zum einen der Form von Ω , zum anderen von den Rändern, die in der Menge Λ in Abhängigkeit vom Partikelradius σ entstanden sind. Da an den letzteren Rändern die Geschwindigkeit von vor einer Kollision in die nach einer Kollision unstetig überführt wird, legt

man für z (vor der Kollision) und z' (nach der Kollision) fest:

$$P(z, t) = P(z', t) \quad (z \in \partial \Lambda \setminus \partial \Omega) \quad (3.23)$$

Zuletzt sei noch angemerkt, dass die Startwerte symmetrisch sind bezüglich des Vertauschens, da alle Partikel identisch sind.

$$P_0(x_1, v_1, \dots, x_i, v_i, \dots, x_j, v_j, \dots, x_N, v_N) = P_0(x_1, v_1, \dots, x_j, v_j, \dots, x_i, v_i, \dots, x_N, v_N) \quad (3.24)$$

Auch dieser Ansatz ist in der Praxis sehr kompliziert zu benutzen, da man eine partielle Differentialgleichung mit sehr vielen (sich verändernden) Rändern und eine gesuchte Funktion mit sehr vielen Variablen hat.

4. Die BBGKY- Hierarchie

Die Ein-Teilchen Distribution

Aus der Liouville Gleichung lässt sich aus der Wahrscheinlichkeitsdichte $P(z,t)$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte für den als ersten markierten Partikel

$$\text{herleiten, } P^{(1)}(x_1, v_1, t) = \int_{\Omega \times \mathbb{R}^{3N-3}} P(x_1, v_1, x_2, v_2, \dots, x_N, v_N, t) dx_2 dv_2 \dots dx_N dv_N \quad (4.1)$$

$P^{(1)}$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, den ersten Partikel in einem gewissen Zustand zu finden, unabhängig von den Zuständen von den Partikeln 2...N.

Vernachlässigt man Kollisionen, so entspricht $P = P^{(1)}$ mit $N=1$.

Allgemein gilt aber für glattes P , für eine s -Teilchen Distribution:

$$P^{(s)}(x_1, v_1, x_2, v_2, \dots, x_s, v_s, t) = \int_{\Omega^s \times \mathbb{R}^{3s}} P(x_1, v_1, x_2, v_2, \dots, x_N, v_N, t) \prod_{j=s+1}^N dx_j dv_j \quad (4.2)$$

Herleitung der BBGKY- Hierarchie

Oftmals ist die spezifische Verteilung der Partikel (also die Verteilung markierter Partikel) uninteressant, in der Praxis ist allgemeine Verteilung (also die Verteilung irgendwelcher Partikel) wichtiger. Die Wahrscheinlichkeit, irgendwelche s Partikel des Systems von N Partikeln zu finden, wird gegeben durch:

$$p^{(s)} = \frac{N!}{N-s} * P^{(s)} \quad (4.3)$$

Nun teilt man \dot{v}_i aus der Liouville Gleichung in einen Anteil, der von einer externen Kraft stammt, und einen Anteil, der von der Interaktion der Partikel stammt, auf.

$$\dot{v}_i = k_{i_{ex}} + \sum_{i \neq j} k_{ij} \quad (4.4)$$

und definiert:

$$k_i^{(s)} := k_{i_{ex}} + \sum_{j=1}^s k_{ij} \quad (4.5)$$

Daraus folgt für die letzte Summe der Liouville Gleichung:

$$\sum_{i=1}^N \dot{v}_i * \frac{\partial P}{\partial v_i} = \sum_{i=1}^{N-1} \left((k_{i_{ex}} + k_{i,N}) * \frac{\partial P}{\partial v_i} + \sum_{j=1}^{N-1} k_{i,j} * \frac{\partial P}{\partial v_i} \right) + \sum_{j=1}^{N-1} k_{N,j} * \frac{\partial P}{\partial v_N} + k_{N_{ex}} * \frac{\partial P}{\partial v_j} \quad (4.6)$$

Integriert man nun die Liouville Gleichung über die Orts- und Geschwindigkeitskoordinaten nach der obigen Aufspaltung der Summe, erhält man die BBGKY-Hierarchie von Verteilungen:

$$\frac{\partial P^{(s)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^s v_i^* \frac{\partial P^{(s)}}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^s k_i^{(s)} * \frac{\partial P^{(s)}}{\partial v_i} + (N-s) \int \sum_{i=1}^s k_{i,s+1} * \frac{\partial P^{(s+1)}}{\partial v_i} dx_{s+1} dv_{s+1} = 0 \quad (4.7)$$

oder als allgemeine Verteilung (mit 4.3):

$$\frac{\partial p^{(s)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^s v_i^* \frac{\partial p^{(s)}}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^s k_i^{(s)} * \frac{\partial p^{(s)}}{\partial v_i} + \int \sum_{i=1}^s k_{i,s+1} * \frac{\partial p^{(s+1)}}{\partial v_i} dx_{s+1} dv_{s+1} = 0 \quad (4.8)$$

Zur Bestimmung der s-Teilchendichte benötigt man also nicht nur die s-Teilchen-Distribution, sondern auch die (s+1)-Teilchen-Distribution. Diese Hierarchie von Gleichungen für die zeitliche Entwicklung des Systems heißt, nach Bogolyubov- Born- Green- Kirkwood- Yvon, die BBGKY Hierarchie.

5. Die Vlasov Gleichung

Molekulares Chaos

Da die Partikel im Verhältnis zu dem Gebiet, in dem sie sich befinden, sehr klein sein sollen, wird es sehr selten sein, dass 2 ausgesuchte Partikel miteinander kollidieren. Daher kann man die Teilnehmer an einer Kollision oder Interaktion als rein zufällig betrachten. Es soll also molekulares Chaos herrschen; diese Annahme bedeutet, dass die Geschwindigkeiten der kollidierenden Partikel unkorreliert und unabhängig von der Position der Partikel sind. Deshalb ist die Wahrscheinlichkeit $P^{(2)}$ das Produkt:

$$P^{(2)}(x_1, v_1, x_2, v_2, t) = P^{(1)}(x_1, v_1, t) * P^{(1)}(x_2, v_2, t) \quad (5.1)$$

Herleitung der Vlasov Gleichung

Will man nun die Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion mithilfe der BBGKY-Hierarchie bestimmen, müsste man auch die gesamte Hierarchie von Gleichungen lösen. Dieses Problem wäre äquivalent zum Lösen der Liouville Gleichung. Mit geeigneten Zusatzannahmen kann man den Aufwand erheblich reduzieren, indem man das Abarbeiten der Gleichungen der Hierarchie nach wenigen Schritten abbricht. Eine Möglichkeit besteht darin, auszuschließen, dass die Partikel miteinander durch Stöße interagieren. Das bedeutet für die Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial t} + v * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_1} + k_{1,ex}^{(1)} * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial v_1} + (N-1) \int \underbrace{(k_{1,2}^{Stoss} + k_{1,2}^{Feld})}_{=0} * \frac{\partial p^{(2)}}{\partial v_1} dx_2 dv_2 \\ = \frac{\partial p^{(1)}}{\partial t} + v * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_1} + k_{1,ex}^{(1)} * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial v_1} + (N-1) \int k_{1,2}^{Feld} * \frac{\partial p^{(2)}}{\partial v_1} dx_2 dv_2 \\ = \frac{\partial p^{(1)}}{\partial t} + v * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_1} + k_{1,ex}^{(1)} * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial v_1} + \frac{(N-1)}{N} \int N * k_{1,2}^{Feld} * \frac{\partial p^{(2)}}{\partial v_1} dx_2 dv_2 = 0 \end{aligned} \quad (5.2)$$

mit obigen molekularem Chaos wird aus (5.2):

$$\frac{\partial p^{(1)}}{\partial t} + v * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_1} + k_{1,ex}^{(1)} * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial v_1} + \underbrace{\frac{(N-1)}{N}}_{\approx 1} \int 2 * N * k_{1,2}^{Feld} * p^{(1)} * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial v_1} dx_2 dv_2 = 0 \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial p^{(1)}}{\partial t} + v * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_1} + k_{1,ex}^{(1)} * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial v_1} + \int 2 * k_{eff,1,2}^{Feld} * p^{(1)} * \frac{\partial p^{(1)}}{\partial v_1} dx_2 dv_2 = 0 \quad (5.4)$$

So erhält man die so genannte Vlasov-Gleichung (auch: Wlassow-Gleichung oder stoßfreie Boltzmann-Gleichung):

$$\frac{\partial p^{(1)}}{\partial t} + v \frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_1} + \dot{v}_1 \frac{\partial p^{(1)}}{\partial v_1} = 0 \quad (5.5)$$

Eigenschaften der Vlasov-Gleichung

Die Verteilungsfunktionen $p^{(1)}$ bzw. $P^{(1)}$ sind an einem Ort jeweils stets gleich. Sind die Partikel in dem System stationär, so ist $p^{(1)}$ bzw. $P^{(1)}$ konstant. Die Vlasov-Gleichung ist zudem zeitlich umkehrbar, das heißt, man kann von einem Zeitpunkt t_z an durch das Ersetzen von t durch $-t$ und v durch $-v$ vorherige Zustände wiederherstellen.

Die Vlasov-Gleichung ist zwar vergleichsweise einfach zu lösen, sie beschreibt das System aber auch nicht (physikalisch) vollständig. Das Weglassen von Kollisionen ist auch nur sinnvoll, wenn der dem System zugrunde liegende Raum Ω sehr viel größer ist als das Volumen der Partikel, oder dass nur wenige Partikel im System sind. Beides bedeutet, dass Kollisionen seltener vorkommen.

6. Die Boltzmann-Gleichung

Lässt man wieder Kollisionen zu (zumindest zwischen jeweils zwei Partikeln), braucht man ebenso eine Vereinfachung der Liouville-Gleichung, die aus numerischen Gründen zu komplex zu lösen wäre.

Herleitung

Die Wahrscheinlichkeit für eine Zweier-Kollision ist gleich der Wahrscheinlichkeit, zwei Partikel zu finden dessen Zentren einen Partikel-Durchmesser Abstand haben. Um nun eine Evolutionsgleichung für $P^{(1)}$ zu finden, braucht man also $P^{(2)}=P^{(2)}(x_1, v_1, x_2, v_2, t)$, welche die Wahrscheinlichkeit angibt, zu einer Zeit t einen Partikel bei x_1 mit Geschwindigkeit v_1 , sowie einen Partikel bei x_2 mit Geschwindigkeit v_2 zu finden. Ausgehend von der Vlasov-Gleichung (5.2) setzt man den Anteil der externen Kräfte (wenn gewünscht) gleich Null, und ersetzt den Korrelationsterm durch eine Differenz von L (für das Verlassen von Partikeln aus dem Gebiet) und G (für das Eintreten in das Gebiet). Das heißt:

$$\frac{\partial P^{(1)}}{\partial t} + v_1 * \frac{\partial P^{(1)}}{\partial x_1} = G - L \quad (6.1)$$

mit:

$$L = (N-1) \sigma^2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S_a} P^{(2)}(x_1, v_1, x_1 + \sigma n, v_2, t) * |(v_2 - v_1) * n| dv_2 dn \quad (6.2)$$

$$G = (N-1) \sigma^2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S_b} P^{(2)}(x_1, v_1, x_1 + \sigma n, v_2, t) * |(v_2 - v_1) * n| dv_2 dn \quad (6.3)$$

Die Gleichung (6.1) kann nur gelten, wenn das Boltzmann-Grad Limit erfüllt ist, welches besagt: für $N \rightarrow \infty$ und $\sigma \rightarrow 0$ muss $N * \sigma^2 < \infty$.

Wie in Kapitel 5 im Abschnitt 1 beschrieben, gilt auch hier molekulares Chaos. Daher gilt auch hier:

$$P^{(2)}(x_1, v_1, x_2, v_2, t) = P^{(1)}(x_1, v_1, t) * P^{(1)}(x_2, v_2, t) \quad (6.4)$$

Dies kann man nun in L direkt einsetzen. Für das Einsetzen in G muss vorher noch v_i durch $\tilde{v}_i = v_i - n(n * V); i=1,2$ ersetzt werden.

$$L = (N-1) \sigma^2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S_a} P^{(1)}(x_1, v_1, t) P^{(1)}(x_1 + \sigma n, v_2, t) * |(v_2 - v_1) * n| dv_2 dn \quad (6.5)$$

$$G = (N-1) \sigma^2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S_b} P^{(1)}(x_1, \tilde{v}_1, t) P^{(1)}(x_1 + \sigma n, \tilde{v}_2, t) * |(v_2 - v_1) * n| dv_2 dn \quad (6.6)$$

Damit erhält man die Boltzmann-Gleichung in folgender Form:

$$\frac{\partial P^{(1)}}{\partial t} + v_1 * \frac{\partial P^{(1)}}{\partial x_1} = N \sigma^2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S_a} [P^{(1)}(x_1, \tilde{v}_1, t) P^{(1)}(x_1 + \sigma n, \tilde{v}_2, t) - P^{(1)}(x_1, v_1, t) P^{(1)}(x_1 + \sigma n, v_2, t)] * |(v_2 - v_1) * n| dv_2 dn \quad (6.7)$$

In dieser Gleichung kommt nur noch ein unabhängiges $P^{(1)}$ vor, kein $P^{(2)}$.

7. Literaturverzeichnis

verwendete Bücher:

Wolfgang Nolting, „Grundkurs Theoretische Physik 1 Klassische Mechanik“, Springer (2005)

Nicola Bellomo, „Modeling Complex Living Systems. A Kinetic Theory and Stochastic Game Approach (Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology)“, Birkhäuser (2007)

Carlo Cercignani, Reinhard Illner, Mario Pulvirenti, „The Mathematical Theory of Dilute Gases“, Applied Mathematical Sciences 106, Springer (1994)

Wilhelm H. Kegel, „Plasmaphysik: Eine Einführung“, Springer (1998)

verwendete Artikel:

W. Braun, K. Hepp, „The Vlasov Dynamics and Its Fluctuations in the $1/N$ Limit of Interacting Classical Particles“, Commun. math. Phys. 56, 125-146 (1977)

Skripte:

Prof. Wolfgang Hillebrandt, PD Dr. Ewald Müller, „Hydrodynamik: Grundlagen und Numerische Verfahren“, (2005)

Prof. Dr. Ansgar Jüngel, „Transport Equations for Semiconductors“, (2004)