Das Anfangswertproblem der statistischen Mechanik

RUDOLF KURTH

Vorgelegt von E. HOPF

Übersicht. In §1 wird die Hauptgleichung (3) für die statistische Behandlung von gewöhnlichen Differentialgleichungssystemen aufgestellt. Ohne zusätzliche Voraussetzungen und Hypothesen kann man aus ihr jedoch keine Schlüsse über die Lösungen ziehen. In §2 werden solche zusätzliche Annahmen für Massensystemen von sehr vielen Freiheitsgraden genannt. Damit wird das Anfangswertproblem der statistischen Mechanik formuliert. Schliesslich werden einige unmittelbare, sehr allgemeine Folgerungen aus der Grundgleichung gezogen. In §3 wird in aller Kürze gezeigt, dass die mechanische Grundgleichung §2(3) bei vorgegebener Anfangsbedingung genau eine Lösung besitzt, die von der Anfangsbedingung stetig abhängt und mittels sukzessiver Approximationen berechnet werden kann.

Im folgenden soll ein mechanisches System mit einer endlichen, aber sehr grossen Anzahl von Freiheitsgraden untersucht werden. Seine Bewegungsgleichungen seien

$$\dot{x}_i = f_i(x, t), \quad i = 1, 2, \dots, k.$$

Dabei bedeuten

t die Zeitvariable,

Punkte die Differentiation nach t ,

T die Zeitachse,

x_i , $i = 1, 2, \dots, k$, rechtwinklige kartesische Koordinaten des k -dimensionalen Zahlenraumes (des *Phasenraumes*) Γ ,

x den Vektor $(x_1, x_2, \dots, x_k)$,

$f_i(x, t)$ gegebene Funktionen, welche überall in $\Gamma \times T$ erklärt sind und stetige partielle Ableitungen erster und zweiter Ordnung nach den x_i besitzen.

Die allgemeine Aufgabe der Mechanik ist es nun, den Verlauf der Bewegungen bei beliebig gegebener Anfangsbedingung

$$x = \overset{\circ}{x} \quad \text{für} \quad t = \overset{\circ}{t}$$

vorauszusagen, d. h. also diejenige Lösung

$$x = \chi(\overset{\circ}{x}, \overset{\circ}{t}, t)$$

des Differentialgleichungssystems zu berechnen oder zu charakterisieren, für

welche

$$\chi(\overset{\circ}{x}, \overset{\circ}{t}, \overset{\circ}{t}) = \overset{\circ}{x}, \quad \overset{\circ}{x} \in \Gamma \quad \text{und} \quad \overset{\circ}{t} \in T \quad \text{beliebig.}$$

Nach den Voraussetzungen existiert genau eine für alle $\overset{\circ}{x}, \overset{\circ}{t}, t$ definierte Lösung, und die Lösungsfunktionen besitzen überall in $\Gamma \times T \times T$ stetige partielle Ableitungen erster Ordnung nach jedem ihrer $(k + 2)$ Argumente; nach den $\overset{\circ}{x}$, sogar auch stetige partielle Ableitungen zweiter Ordnung [3].

Wenn nun k sehr gross ist, so wird selbst die angenäherte numerische Berechnung der Lösung praktisch unmöglich. Überdies ist der Anfangspunkt $\overset{\circ}{x}$ nicht mehr wirklich beobachtbar. (Man denke an die Moleküle eines Gases oder an die Sterne einer Galaxie.) Jedoch lassen sich trotzdem noch gewisse Schlüsse über die Entwicklung des Systems ziehen, wenn es aus sehr vielen gleichartigen *Molekülen* besteht, wenn man ferner zu gewissen Hypothesen bereit ist und wenn man schliesslich sich mit einer statistischen Beschreibung der Entwicklung begnügt. Die statistische Beschreibung gibt z.B. an, wieviele Moleküle sich in einem beliebigen Teil des (*realen* dreidimensionalen euklidischen) Raumes zu irgendeinem Zeitpunkt t befinden; sie sagt aber nichts darüber, welche individuellen Moleküle das gerade sind.

Das soll im folgenden gezeigt werden. Wir beginnen mit einigen allgemeinen Betrachtungen über die Lösungen des vorgelegten Differentialgleichungssystems (§1), wenden diese auf die Hamiltonschen Gleichungen der Mechanik an (§2) und beschreiben schliesslich eine Methode, den mathematischen Teil des Problems zu lösen (§3).

1. Einführung des Wahrscheinlichkeitsbegriffs. Der Grundgedanke der statistischen Methode besteht in folgendem: Wir führen in den Phasenraum eine Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Anfangspunkt $\overset{\circ}{x}$ der *Phasenbahn* $x = \chi(\overset{\circ}{x}, 0, t)$ ein und verfolgen die Veränderungen, die sie im Laufe der Zeit durch die *Phasenströmung* χ erleidet. Praktisch ist das natürlich ebensowenig möglich wie die Auflösung des Differentialgleichungssystems. Der entscheidende Schritt ist nun: Wir projizieren die Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einen Unterraum Γ' mit einer kleinen Dimensionenzahl k' . Sind die Partikel alle äquivalent, d.h. sind gewisse Symmetriebedingungen und sind ferner gewisse statistische Voraussetzungen erfüllt, so lässt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung in Γ' in Abhängigkeit von der Zeit berechnen, wenn sie zur Zeit $t = 0$ gegeben ist.

1. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung in Γ sei als nicht-negative, additive und totalstetige Mengenfunktion $\overset{\circ}{P}(\overset{\circ}{B})$ gegeben, die für alle Borelschen Teilmengen $\overset{\circ}{B}$ von Γ erklärt ist und der Normierungsbedingung

$$\overset{\circ}{P}(\Gamma) = 1$$

genügt. Wir nehmen an, sie sei mittels einer Wahrscheinlichkeitsdichte $\overset{\circ}{w}(\overset{\circ}{x})$

gegeben, die überall in Γ stetig differenzierbar ist und für $|\overset{\circ}{x}| \rightarrow \infty$ so stark nach Null abfällt, dass alle folgenden Integrationen legitim sind. Würden wir z.B. voraussetzen, dass $\overset{\circ}{w}(\overset{\circ}{x})$ nur in einem beschränktem Teilgebiet von Γ von Null verschieden ist, so wäre das offensichtlich keine Beschränkung der physikalischen Allgemeinheit. Ebenso wenig schränkt die Annahme der Differenzierbarkeit die physikalische Allgemeinheit ein, da ja jede integrable Funktion durch eine stetig differenzierbare im Mittel beliebig genau angenähert werden kann.

Es sei nun B irgendeine Borelsche Teilmenge von Γ und $\overset{\circ}{B}$ diejenige Borel-Menge, von der B das vermittelt der Phasenströmung $x = \chi(\overset{\circ}{x}, 0, t)$ erzeugte Bild $\chi(\overset{\circ}{B}, 0, t)$ zur Zeit t ist. Da aus $x = \chi(\overset{\circ}{x}, \overset{\circ}{t}, t)$ folgt: $\overset{\circ}{x} = \chi(x, t, \overset{\circ}{t})$, so ist $\overset{\circ}{B} = \chi(B, t, 0)$. Als Wahrscheinlichkeitsverteilung für den *laufenden Phasenpunkt* $x = \chi(\overset{\circ}{x}, 0, t)$ zur Zeit t definieren wir nun die Mengenfunktion

$$P(B, t) = \overset{\circ}{P}[\chi(B, t, 0)].$$

(Begründung: Zwei *Ereignisse*, die sich gegenseitig mit Notwendigkeit bedingen, besitzen dieselbe Wahrscheinlichkeit.) Die Mengenfunktion $P(B, t)$ ist nicht-negativ, additiv, totalstetig und normiert. Daher gehört zu ihr eine (Lebesguesche) Dichtefunktion $w(x, t)$ derart, dass

$$\int_B w(x, t) dx = P(B, t) \quad \text{für alle } B \text{ und } t.$$

$w(x, t)$ ist für jedes feste t *fast überall* eindeutig bestimmt. Es sei nun $\Delta(\overset{\circ}{x}, t)$ die Funktionaldeterminante

$$\left| \frac{\partial}{\partial \overset{\circ}{x}_i} \chi_i(\overset{\circ}{x}, 0, t) \right|.$$

Dann ist

$$(1) \quad w(x, t) = \frac{\overset{\circ}{w}[\chi(x, t, 0)]}{\Delta[\chi(x, t, 0), t]}$$

eine Dichtefunktion von $P(B, t)$, die für alle x, t definiert ist und überall in $\Gamma \times T$ stetige Ableitungen nach x_i , $i = 1, \dots, k$, und t besitzt. Sie soll für alles folgende zugrunde gelegt werden.

Dass der Nenner positiv ist, folgt aus dem folgenden bekannten Hilfssatz [3]:
Setzen wir

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_i} \equiv f_{i,i}(x, t),$$

so ist

$$\frac{\partial \Delta}{\partial t} = \Delta \cdot \sum_{i=1}^k f_{i,i}[\chi(\overset{\circ}{x}, 0, t), t].$$

Die Differenzierbarkeit ergibt sich aus den Voraussetzungen über die Funktionen f_i [3], und durch einfaches Ausrechnen zeigt man, dass für alle $\overset{\circ}{B}, t$

$$\int_B w(x, t) dx = \int_{\overset{\circ}{B}} \overset{\circ}{w}(\overset{\circ}{x}) d\overset{\circ}{x},$$

wobei

$$B = \chi(\overset{\circ}{B}, 0, t).$$

2. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x, t)$ genügt der folgenden Differentialgleichung:

$$(2) \quad \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \frac{\partial}{\partial x_i} (w f_i) = 0.$$

Zum Beweise differenzieren wir die aus (1) folgende Gleichung

$$w[\chi(\overset{\circ}{x}, 0, t), t] \Delta(\overset{\circ}{x}, t) = \overset{\circ}{w}(\overset{\circ}{x})$$

nach t , ersetzen die unabhängigen Variablen $\overset{\circ}{x}, t$ durch die neuer unabhängigen Variablen x, t und wenden die Bewegungsgleichungen an. Das ergibt zunächst:

$$\left(\frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \frac{\partial w}{\partial x_i} f_i \right) \Delta + w \frac{\partial \Delta}{\partial t} = 0.$$

Mittels des Hilfssatzes für Δ folgt nun die Behauptung.

3. Aus der Gleichung (2) für die Wahrscheinlichkeitsdichte w in Γ leiten wir nun eine Differentialgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte w' in dem Unterraum Γ' von Γ her. Wir setzen:

$$\begin{cases} (x_1, x_2, \dots, x_{k'}) = x', & (1 \leq k' < k), \\ (x_{k'+1}, \dots, x_k) = x'', \\ \{x'\} = \Gamma', & \{x''\} = \Gamma'', \end{cases}$$

so dass also $\Gamma = \Gamma' \times \Gamma''$. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(B, t)$ in Γ induziert die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P'(B', t) = P(B' \times \Gamma'', t)$$

in Γ' . (B' bedeutet hierbei irgendeine Borel-Teilmenge von Γ' .) Für die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte $w'(x', t)$ gilt offensichtlich

$$w'(x', t) = \int_{\Gamma''} w(x, t) dx''.$$

Ferner erklären wir in Γ'' eine Dichte der nach x' bedingten Wahrscheinlichkeit $\overset{\circ}{w}(x, t)$ durch

$$\overset{\circ}{w}(x, t) = \begin{cases} w(x, t)/w'(x', t), & \text{wenn } w' > 0, \\ 0, & \text{wenn } w' = 0. \end{cases}$$

Ist $F(x, t)$ irgendeine in $\Gamma \times T$ erklärte, über Γ integrable Funktion, so nennen wir die Grösse

$$\tilde{F} = \int_{\Gamma''} F(x, t) \tilde{w}(x, t) dx''$$

ihren (nach x') bedingten Erwartungswert. Er ist eine Funktion von x' und t . *Unter diesen Bezeichnungen gilt nun für die Wahrscheinlichkeitsdichte $w'(x', t)$ in Γ' die Gleichung*

$$(3) \quad \frac{\partial w'}{\partial t} + \sum_{i=1}^{k'} \frac{\partial}{\partial x_i} (w' \tilde{f}_i) = 0 \quad \text{für alle } x', t.$$

Zum Beweise hat man nur die Gleichung (2) über Γ'' zu integrieren, Teilintegration anzuwenden und die soeben eingeführten Definitionen zu berücksichtigen.

Der anschauliche Inhalt der Gleichung (3) ist klar: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung in Γ' entwickelt sich so, als ob die Phasenströmung in Γ' durch das Differentialgleichungssystem

$$\dot{x}_i = \tilde{f}_i(x', t), \quad i = 1, 2, \dots, k',$$

erzeugt würde. Interpretieren wir Γ' als Phasenraum eines Moleküls und die Funktionen $f_i(x, t)$ als allgemeine Kraftkomponenten, so bewegt sich dieses Molekül in Γ' also so, als ob der örtlich bedingte Erwartungswert der Kraft auf ihn einwirke.

4. Sind diese Erwartungswerte $\tilde{f}_i(x', t)$ bekannt und ist für $w'(x', t)$ eine Anfangsbedingung $w'(x', 0) = \overset{\circ}{w}'(x')$ vorgegeben, so können wir $w'(x', t)$ mittels der folgenden Umkehrung des Satzes (2) berechnen:

Genügt eine Funktion $w(x, t)$ den beiden Bedingungen

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \frac{\partial}{\partial x_i} (w f_i) = 0 & \text{für alle } x, t, \\ w(x, 0) = \overset{\circ}{w}(x) & \text{für alle } x, \end{cases}$$

so ist

$$(4) \quad w(x, t) = \frac{\overset{\circ}{w}[\chi(x, t, 0)]}{\Delta[\chi(x, t, 0), t]}.$$

Zum Beweise hat man den Gedankengang, der von (1) zu (2) führte, nur umzukehren.

In Wirklichkeit sind die Funktionen $\tilde{f}_i(x', t)$ nicht bekannt, da ihre Berechnung ja die Kenntnis der Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x, t)$ voraussetzt. Um zu sehen, wie wir weiter vorgehen sollen, wenden wir im folgenden die grundlegende Gleichung (3) auf die Bewegungsgleichungen der Mechanik an.

2. Formulierung des mechanischen Anfangswertproblems.

1. Es liege ein System von n Massenpunkten vor mit den Hamiltonschen

Bewegungsgleichungen

$$\left. \begin{aligned} \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \\ \dot{q}_i &= +\frac{\partial H}{\partial p_i}, \end{aligned} \right\} \quad i = 1, 2, \dots, 3n,$$

wobei

$$H = H(p, q, t)$$

und

$$\left\{ \begin{aligned} p &= (p_1, p_2, \dots, p_{3n}), \\ q &= (q_1, q_2, \dots, q_{3n}). \end{aligned} \right.$$

H besitze stetige Ableitungen erster und zweiter Ordnung nach den p_i und q_i . (Die Existenz von Ableitungen zweiter Ordnung für die Kraftkomponenten brauchen wir nicht zu fordern. Diese wurde nämlich in §1 ausschliesslich für die Differentiation der Funktional-Determinante $\Delta(\overset{\circ}{x}, t)$ benötigt. Nach dem Hilfssatz in §1.1 gilt nun im vorliegenden Falle der *Liouvillesche Satz* $\Delta \equiv 1$, so dass $\Delta(\overset{\circ}{x}, t)$ schon von selbst differenzierbar ist.) Setzen wir jetzt

$$x' = (p', q') = (p_1, p_2, p_3, q_1, q_2, q_3),$$

so lautet die Fundamentalgleichung von §1.3:

$$(1a) \quad \frac{\partial w'}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_\lambda} \left(w' \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_\lambda} \right) - \frac{\partial}{\partial p_\lambda} \left(w' \frac{\partial \tilde{H}}{\partial q_\lambda} \right) = 0.$$

Dabei soll in diesem Paragraphen über gleiche griechische Indizes $\kappa, \lambda, \dots$ innerhalb eines Gliedes stets von 1 bis 3 summiert werden.

Indem wir die Produkte auf der linken Seite ausdifferenzieren und mittels der Beziehungen

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_\lambda} &= \int_{\Gamma''} \frac{\partial H}{\partial p_\lambda} \tilde{w} dx'' + \int_{\Gamma''} H \frac{\partial \tilde{w}}{\partial p_\lambda} dx'' = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_\lambda} + \int_{\Gamma''} H \frac{\partial \tilde{w}}{\partial p_\lambda} dx'', \\ \frac{\partial \tilde{H}}{\partial q_\lambda} &= \int_{\Gamma''} \frac{\partial H}{\partial q_\lambda} \tilde{w} dx'' + \int_{\Gamma''} H \frac{\partial \tilde{w}}{\partial q_\lambda} dx'' = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial q_\lambda} + \int_{\Gamma''} H \frac{\partial \tilde{w}}{\partial q_\lambda} dx'', \end{aligned} \right. \quad \lambda = 1, 2, 3,$$

die partiellen Ableitungen des Erwartungswertes $\tilde{H}$ einführen, können wir der Fundamentalgleichung auch die Form

$$(1b) \quad \frac{\partial w'}{\partial t} + \frac{\partial w'}{\partial q_\lambda} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_\lambda} - \frac{\partial w'}{\partial p_\lambda} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial q_\lambda} = \int_{\Gamma''} \left[\frac{\partial(w'H)}{\partial q_\lambda} \frac{\partial \tilde{w}}{\partial p_\lambda} - \frac{\partial(w'H)}{\partial p_\lambda} \frac{\partial \tilde{w}}{\partial q_\lambda} \right] dx''$$

geben.

2. Es sei nun $m_{3i-2} = m_{3i-1} = m_3$, die Masse des i -ten Partikels. Ferner

habe die Hamilton-Funktion die spezielle Gestalt

$$\begin{cases} H \equiv \sum_{i=1}^{3n} \frac{p_i^2}{2m_i} + V(q, t), \\ V \equiv \sum_{i=1}^n V_i(q^i, t) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} V_{ij}(q^i, q^j, t). \end{cases}$$

$q^i = (q_{3i-2}, q_{3i-1}, q_{3i})$ bedeutet hierbei den Ortsvektor des i -ten Massenpunktes. Es soll also nur zwei Arten von Kräften geben: Kräfte, die von aussen her auf die einzelnen Partikel einwirken, und Wechselwirkungskräfte zwischen je zwei Partikeln.

Wir bezeichnen nun den Impulsvektor des i -ten Massenpunktes mit p^i , setzen $(p^i, q^i) = x^i$, bezeichnen seine Wahrscheinlichkeitsdichte mit $w_i(x^i, t)$ und die des Partikelpaares (i, j) mit $w_{ij}(x^i, x^j, t)$. Die entsprechenden Phasenräume seien Γ_i und $\Gamma_{ij} = \Gamma_i \times \Gamma_j$. Ferner definieren wir:

$$\omega_{ij} \equiv w_{ij}(x^i, x^j, t) - w_i(x^i, t)w_j(x^j, t)$$

und

$$\begin{cases} H_1 \equiv \frac{p^1 p^1}{2m_1} + U_1(q^1, t), \\ U_1 \equiv V_1(q^1, t) + \sum_{i=2}^n \int_{\Gamma_i} V_{1i}(q^1, q^i, t) w_i(x^i, t) dx^i. \end{cases}$$

Dann folgt aus §2(1) unmittelbar die folgende Gleichung für $w_1 \equiv w'$:

$$(2) \quad \frac{\partial w_1}{\partial t} + \frac{\partial w_1}{\partial q_\lambda} \frac{\partial H_1}{\partial p_\lambda} - \frac{\partial w_1}{\partial p_\lambda} \frac{\partial H_1}{\partial q_\lambda} = \sum_{i=2}^n \int_{\Gamma_i} \left(\frac{\partial V_{1i}}{\partial q_\lambda} \frac{\partial \omega_{1i}}{\partial p_\lambda} - \frac{\partial V_{1i}}{\partial p_\lambda} \frac{\partial \omega_{1i}}{\partial q_\lambda} \right) dx^i.$$

(Das letzte Glied ist übrigens Null; nur der Symmetrie halber haben wir es hinzugefügt.) Gleichung (2) ist eine Verallgemeinerung der Boltzmannschen Gleichung der statistischen Mechanik.

3. Es seien nun die n Massenpunkte *ununterscheidbar* oder *äquivalent*. Der präzise Sinn dieser Worte ist hier: Die Massen m_i haben alle denselben Wert m , und die Anfangsdichte $\overset{\circ}{w}(x^1, x^2, \dots, x^n)$ sei in $x^1, x^2, \dots, x^n$ symmetrisch. (Die Hamilton-Funktion H ist es wegen der Gleichheit aller Massen ohnehin.) Dann ist auch $w(x, t)$ in $x^1, \dots, x^n$ und sind auch die Funktionen $w_{ij}(x^i, x^j, t)$ in x^i und x^j symmetrisch. Ferner sind sowohl die Funktionen $w_{ij}(x^1, x^2, t)$ für alle Indexpaare (i, j) als auch die Funktionen $w_i(x^1, t)$ für alle Indizes i identisch. Damit ergeben sich die Funktionen $\partial H_1 / \partial p_\lambda, \partial H_1 / \partial q_\lambda$ auf der linken Seite der Gleichung (2) als gewisse Transformationen der Funktion w_1 . Ihre rechte Seite ist wegen der unbekannten Funktionen $\omega_{ij} \equiv \omega_{12}$ zunächst völlig unbekannt. Als einziges wissen wir von ihnen nur, dass

$$\int_{\Gamma_1} \int_{\Gamma_2} \omega_{12} dx^1 dx^2 = 0.$$

Hier ist es nun Sache der Physik und der Astronomie, mittels plausibler Hypothesen weiterzuhelfen. Gewisse Annahmen z.B. der Gastheorie oder der Stelldynamik sind mit der Identität $\omega_{12} \equiv 0$ äquivalent. Sie besagt, dass die Bewegungen je zweier Partikel statistisch unabhängig sind [1], [6]. Die physikalischen Theorien der Flüssigkeiten benötigen kompliziertere Annahmen. Sie laufen samt und sonders darauf hinaus, die rechte Seite der Gleichung (2) als eine bestimmte und bekannte Transformation der unbekannten Funktion w_1 anzusetzen. Die Flüssigkeitstheorie gründet man im übrigen besser nicht auf die Gleichung (2) für w_1 , sondern stattdessen auf die entsprechende Gleichung für w_{12} , die wieder als Spezialfall der allgemeinen Gleichung §1(3) gewonnen werden kann [1]. Somit ordnen sich all diese Gleichungen dem folgenden allgemeinen Typ unter:

$$(3) \quad \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \frac{\partial w}{\partial x_i} X_i w = Y w,$$

wobei X_i , $i = 1, \dots, k$, und Y gewisse Transformationen bedeuten. Das Anfangswertproblem der statistischen Mechanik ist ein Spezialfall der Aufgabe, die Lösungen $w(x, t)$ der Gleichung (3) bei gegebener Anfangsbedingung $w(x, 0) \equiv w_1(x)$ zu konstruieren.

4. Wir wollen aus der Annahme $Y w \equiv 0$ noch eine physikalische Konsequenz ziehen. Aus

$$(4) \quad \frac{\partial w_1}{\partial t} + \frac{\partial w_1}{\partial q_\lambda} \frac{\partial H_1}{\partial p_\lambda} - \frac{\partial w_1}{\partial p_\lambda} \frac{\partial H_1}{\partial q_\lambda} = 0$$

folgt, dass $w_1(x^1, t)$ ein Erstes Integral der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\left. \begin{aligned} \dot{p}_\lambda &= -\frac{\partial H_1}{\partial q_\lambda}, \\ \dot{q}_\lambda &= +\frac{\partial H_1}{\partial p_\lambda}, \end{aligned} \right\} \quad \lambda = 1, 2, 3,$$

ist, d.h. dass

$$w_1(x^1, t) = w_1(x^1, 0),$$

wenn

$$x^1 = x^1(x^1, 0, t).$$

Nach dem Hilfssatz in §1.1 ist nämlich die Funktionaldeterminante $\Delta_1 \equiv |\partial \chi^1 / \partial x^1| = 1$. So folgt die Behauptung unmittelbar aus §1(4). Daher gilt weiter:

$$\int_{\Gamma_1} w_1(x^1, t) \ln w_1(x^1, t) dx^1 = \int_{\Gamma_1} w_1(x^1, 0) \ln w_1(x^1, 0) dx^1,$$

wenn $w_1 \ln w_1 = 0$ gesetzt wird für $w_1 = 0$. Die linke Seite ist die *Entropie* des Systems. Diese ist also insbesondere für verdünnte Gase und Sternsysteme zeitlich (nahezu) konstant.

5. Ist die Hamilton-Funktion H von der Zeit t unabhängig und darf auch die Wahrscheinlichkeitsdichte w_1 als zeitunabhängig vorausgesetzt werden, so ist H_1 und daher auch jede Funktion $\Phi(H_1)$ eine Lösung der Gleichung (4). Angenommen nun, w_1 sei auf grund physikalischer Erwägungen als eine bestimmte Funktion $\Phi(H_1)$ vorgegeben, und es werde die Aufgabe gestellt, w_1 explizit als Funktion der Koordinaten und der Zeit darzustellen. Nach Abschnitt 2 läuft sie auf die Lösung der nicht-linearen Integralgleichung

$$(5) \quad w_1(x_1) = \Phi \left[\frac{p^1 p^1}{2m} + V_1(q^1) + (n-1) \int_{\Gamma_n} V_{12}(q^1, q^2) w_1(x^2) dx^2 \right]$$

hinaus. Diese Aufgabe scheint bisher überhaupt nur für Sternsysteme formuliert worden zu sein und ist auch für sie bisher nur zum kleineren Teil gelöst [7].

6. Integrieren wir die exakte Gleichung (1a) für w_1 über alle Impulse $p^1 = (p_1, p_2, p_3) = m(u_1, u_2, u_3)$, so ergibt sich die *Kontinuitätsgleichung der Hydrodynamik*:

$$(6a) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_\lambda} (\rho \bar{u}_\lambda) = 0.$$

Dabei ist

$$\rho = nm \int_{\{p^1\}} w_1(x^1, t) dp^1$$

die Dichte des Systems und

$$\bar{u}_\lambda = \frac{\int_{\{p^1\}} u_\lambda w_1(x^1, t) dp^1}{\int_{\{p^1\}} w_1(x^1, t) dp^1}$$

der örtlich bedingte Erwartungswert der Geschwindigkeit, d.h. die makroskopische Strömungsgeschwindigkeit. Übrigens hätten wir die Gleichung auch unmittelbar als Spezialfall von §1(3) gewinnen können.

Erweitern wir Gleichung (1) erst mit u_κ und integrieren dann über p^1 , so ergibt sich nach einer Reihe von elementaren Umformungen (insbesondere partiellen Integrationen und Anwendungen der Kontinuitätsgleichung) eine *Verallgemeinerung der Eulerschen Gleichungen der Hydrodynamik*:

$$(6b) \quad \begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_\kappa}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_\kappa}{\partial x_\lambda} \bar{u}_\lambda &= -\frac{1}{m} \frac{\partial \widetilde{V}}{\partial q_\kappa} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial q_\lambda} [\rho \overline{(u_\kappa - \bar{u}_\kappa)(u_\lambda - \bar{u}_\lambda)}] \\ &\quad - \frac{1}{m} \sum_{i=2}^n \int_{\Gamma_i} \frac{\partial V_{1i}}{\partial q_\kappa} \int_{\{p^1\}} \omega_{1i} dp^1 dx^i, \quad \kappa = 1, 2, 3. \end{aligned}$$

Der Unterschied gegen die gewöhnlichen Eulerschen Gleichungen ist zweifach. Einmal tritt anstelle eines skalaren Druckes ein Drucktensor $P_{\kappa\lambda}$ auf, der mit

der Dichte ρ und dem Tensor

$$T_{\kappa\lambda} \equiv \overline{(u_\kappa - \bar{u}_\kappa)(u_\lambda - \bar{u}_\lambda)}$$

durch die Gleichung

$$P_{n\lambda} = \rho T_{u\lambda}$$

verbunden ist. Die Deutung von $T_{\kappa\lambda}$ ist einfach: Ist $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ ein beliebiger Einheitsvektor, so ist offensichtlich der Ausdruck

$$T_{\kappa\lambda}\alpha_\kappa\alpha_\lambda = \overline{[(u_\kappa - \bar{u}_\kappa)\alpha_\kappa]^2}$$

dem örtlich bedingten Erwartungswert der kinetischen Energie in q' zur Zeit t in der Richtung α proportional. $T_{\kappa\lambda}\alpha_\kappa\alpha_\lambda$ ist also eine Verallgemeinerung des kinetischen Temperaturbegriffs.

Der zweite Unterschied liegt in dem Gliede mit ω_{12} in den neuen Gleichungen. Wenn es in der gewöhnlichen Hydrodynamik keine Rolle spielt, so kann man daraus nicht schliessen, dass $|\omega_{12}|$ sehr klein sei. Es könnte nämlich im Innern der Flüssigkeit die Summe nahezu Null sein, ohne dass die Summanden es sind. Anders dagegen auf dem Rande. Bei der Interpretation solcher Erscheinungen wie der Verdampfung oder der Oberflächenspannung dürfte das zusätzliche Glied von entscheidender Bedeutung sein.

3. Lösung des Anfangswertproblems. Nach diesen Veranschaulichungen wenden wir uns dem Anfangswertproblem von §2.3 zu, dem Problem

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \frac{\partial w}{\partial x_i} X_i w = Yw, \\ w(x, 0) = \overset{\circ}{w}(x). \end{cases}$$

Eine Lösung für den Fall $Yw = 0$ wurde schon in [5] gegeben, wo auch die Lösung des allgemeinen Falles angedeutet wurde. Hier gehen wir auf einem etwas anderem Wege vor. Wir machen uns die Lösungsmethode zunächst an linearen partiellen Differentialgleichungen klar.

1. Es sei das Anfangswertproblem

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \frac{\partial w}{\partial x_i} g_i(x, t) = 0, \\ w(x, 0) = \overset{\circ}{w}(x) \end{cases}$$

vorgelegt. Die Funktionen $g_i(x, t)$ seien in $\Gamma \times T$ definiert und stetig und mögen für alle Punktpaare $x, x' \in \Gamma$ eine Lipschitz-Bedingung erfüllen. $\overset{\circ}{w}(x)$ sei in Γ stetig differenzierbar. Dann besitzt das Differentialgleichungssystem

$$\dot{x}_i = g_i(x, t), \quad i = 1, 2, \dots, k,$$

eine eindeutig bestimmte Lösung

$$x_i = \chi_i(\overset{\circ}{x}, \overset{\circ}{t}, t), \quad \overset{\circ}{x}_i = \chi_i(\overset{\circ}{x}, \overset{\circ}{t}, \overset{\circ}{t}),$$

und die eindeutig bestimmte Lösung des Anfangswertproblems ist [5]

$$w(x, t) = \overset{\circ}{w}[\chi(x, t, 0)].$$

2. Das Anfangswertproblem sei jetzt

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \frac{\partial w}{\partial x_i} g_i(x, t) = h(x, t), \\ w(x, 0) = \overset{\circ}{w}(x), \end{cases}$$

wobei $h(x, t)$ in $\Gamma \times T$ definiert sei, von t stetig abhängen und überall in $\Gamma \times T$ stetige Ableitungen nach den x_i besitze. Dann gilt, wie man leicht nachrechnet [5],

$$w(x, t) = \overset{\circ}{w}[\chi(x, t, 0)] + \int_0^t h[\chi(x, t, \tau), \tau] d\tau.$$

3. Nun sei die Gleichung

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \frac{\partial w}{\partial x_i} g_i(w, x, t) = h(w, x, t)$$

bei derselben Anfangsbedingung zu lösen. Wenn überhaupt eine Lösung existiert, so führen wir sie explizit in die Funktionen g_i und h ein und haben dann nach Abschnitt 2

$$(3a) \quad w(x, t) = \overset{\circ}{w}[\chi(x, t, 0)] + \int_0^t h[w\{\chi(x, t, \tau), \tau\}, \chi(x, t, \tau), \tau] d\tau.$$

Umgekehrt: Genügen die Funktionen $w(x, t)$ und $\chi_i(x, t, \overset{\circ}{t})$ dieser Gleichung sowie den Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t} \chi_i(\overset{\circ}{x}, \overset{\circ}{t}, t) = g_i[w\{\chi(\overset{\circ}{x}, \overset{\circ}{t}, t), t\}, \chi(\overset{\circ}{x}, \overset{\circ}{t}, t), t],$$

d.h. den Gleichungen

$$(3b) \quad \chi_i(x, t, \overset{\circ}{t}) = x_i + \int_i^{\overset{\circ}{t}} g_i[w\{\chi(x, t, \tau), \tau\}, \chi(x, t, \tau), \tau] d\tau,$$

so ist $w(x, t)$ eine Lösung des Anfangswertproblems. Zum Beweise berechne man

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial w}{\partial x_i} g_i$$

durch Differentiation des Ausdrucks für $w(x, t)$ und berücksichtige, dass die Funktionen $\chi_i(x, t, \overset{\circ}{t})$ Erste Integrale des Differentialgleichungssystems $\dot{x}_i = g_i(w, x, t)$ sind.

Indem man auf das Gleichungssystem (3a, b) die Methode der sukzessiven Approximationen anwendet, kann man unter geeigneten Voraussetzungen über die Funktionen $\overset{\circ}{w}$, g_i und h nicht nur die Existenz, sondern auch die Eindeutigkeit der Lösung (w, χ) nachweisen und diese numerisch tatsächlich auch in beliebiger Annäherung berechnen. Sind z.B. $\overset{\circ}{w}$, $\partial \overset{\circ}{w} / \partial x_i$, g_i , h und $\partial h / \partial x_i$ sämtlich in $\Gamma \times T \times T$ beschränkt, so konvergiert das Iterationsverfahren für alle $x, t, \overset{\circ}{t}$. Sind $\overset{\circ}{w}$, g_i , h in allen Variablen analytisch, so auch w und χ .

4. Die Ergebnisse des vorigen Abschnitts bleiben gültig, wenn an die Stelle der Funktionen g_i und h Transformationen X_i und Y mit analogen Eigenschaften treten. Das Gleichungssystem lautet jetzt:

$$(4) \quad \begin{cases} \chi_i = x_i + \int_i^{\overset{\circ}{t}} g_i(\chi, \tau) d\tau, & g_i = X_i w, \\ w = \overset{\circ}{w}(\chi) + \int_0^{\overset{\circ}{t}} h(\chi, \tau) d\tau, & h = Yw. \end{cases}$$

Die sukzessiven Approximationen (χ^0, w^0) , (χ^1, w^1) , $\dots$ werden definiert durch die Gleichungen

$$\begin{cases} \chi^0 = x, \\ w^0 = \overset{\circ}{w} \end{cases}$$

und

$$\begin{cases} \chi_i^{\nu+1} = x_i + \int_i^{\overset{\circ}{t}} g_i^{\nu}(\chi^{\nu}, \tau) d\tau, & g_i^{\nu} = X_i w^{\nu}, \\ w^{\nu+1} = \overset{\circ}{w}(\chi^{\nu}) + \int_0^{\overset{\circ}{t}} h^{\nu}(\chi^{\nu}, \tau) d\tau, & h^{\nu} = Yw^{\nu}, \end{cases} \quad \nu = 0, 1, 2, \dots$$

Es sei nun G ein Gebiet in Γ , das die abgeschlossene Hülle von G_0 , des Gebietes, in dem allein $\overset{\circ}{w}$ von Null verschieden ist, umschliesst. Ferner sei T' ein Zeitintervall, das den Zeitnullpunkt enthält. Dann bildet die Menge aller in $G \times T' \times T'$ stetigen Funktionen $\varphi(x, t, \overset{\circ}{t})$ einen Banachschen Raum B , wenn wir die Norm durch

$$||\varphi|| = \sup_{G \times T' \times T'} |\varphi(x, t, \overset{\circ}{t})|$$

erklären. Die Folge (χ^{ν}, w^{ν}) konvergiert nun gegen eine Lösung (χ, w) des Anfangswertproblems, und zwar gegen seine einzige, wenn T' hinreichend klein ist und wenn ferner die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- $||X_i \overset{\circ}{w}||$ und $||Y \overset{\circ}{w}||$ sind beschränkt.
- Die Funktionen g_i^{ν} , h^{ν} besitzen in $G \times T'$ stetige und gleichgradig beschränkte Ableitungen nach den x_i . (Für die g_i^{ν} genügt tatsächlich schon eine gleichgradige Lipschitz-Bedingung.)

- (c) Die Transformationen X_i , Y genügen Lipschitz-Bedingungen für alle Elementen-Paare aus B .

Die so konstruierte Lösung hängt von der Anfangsbedingung stetig ab.

Der Beweis ist in den Einzelheiten dem in [5] gegebenen ähnlich, so dass es nicht nötig ist, auf sie weiter einzugehen. Der springende Punkt in ihm ist, dass man das Zeitintervall T' stets so kurz (die *Kerne* der Integralgleichungen (3a, b) so klein) wählen kann, dass die Iterationen konvergieren. Der Fall $Yw = 0$ reduziert sich auf die Auflösung einer gewissen Differentialgleichung $\chi = Z\chi$ in B , deren Theorie [2] man unmittelbar anwenden kann. Varianten der Lösungsmethode erscheinen möglich, indem man andere Banach-Räume B (Räume mit anderer Metrik) zugrunde legt.

Offensichtlich kann bei der Anwendung auf das Anfangswertproblem §2(1) der statistischen Mechanik stets dafür gesorgt werden, dass alle Voraussetzungen erfüllt sind. In praxis wird man sich mit einer der sukzessiven Approximationen, gewöhnlich schon mit der ersten, zufrieden geben müssen. Exakte Fehlerabschätzungen sind möglich, und auch die Länge des Zeitintervalls T' , in dem die Iterationen konvergieren, lässt sich nach unten abschätzen. Aber bei all diesen Abschätzungen verschenkt man so viel, dass ihr Wert für die Anwendung erheblich herabgemindert wird. Wir gehen deshalb nicht weiter auf sie ein. Für den Fall $Yw = 0$ wurden sie in [5] gegeben. Eine konkrete Anwendung der Methode auf Sternsysteme wird in [7] beschrieben.

LITERATUR

- [1] COLE, G.H.A.: Theory of Monatomic Liquids at Ordinary Temperatures. (Reports on Progress in Physics XIX, 1956.)
- [2] HILLE, E.: Functional Analysis and Semi-Groups. (American Mathematical Society, 1948.)
- [3] KAMKE, E.: Differentialgleichungen reeller Funktionen. (Leipzig, 1930.)
- [4] KHINCHIN, A. J.: Mathematical Foundations of Statistical Mechanics. (New York, 1949.)
- [5] KURTH, R.: Das Anfangswertproblem der Stelldynamik. (Z.f.Astrophysik 30, 213, 1952.)
- [6] KURTH, R.: Gibt es eine statistische Mechanik der Sternsysteme? (Zamp 6, 115, 1955.)
- [7] KURTH, R.: Introduction to the Mechanics of Stellar Systems. (Pergamon Press, London, New York, Paris 1957.)

The University
Manchester