

KINETISK TEORI

och
Boltzmannekvationen

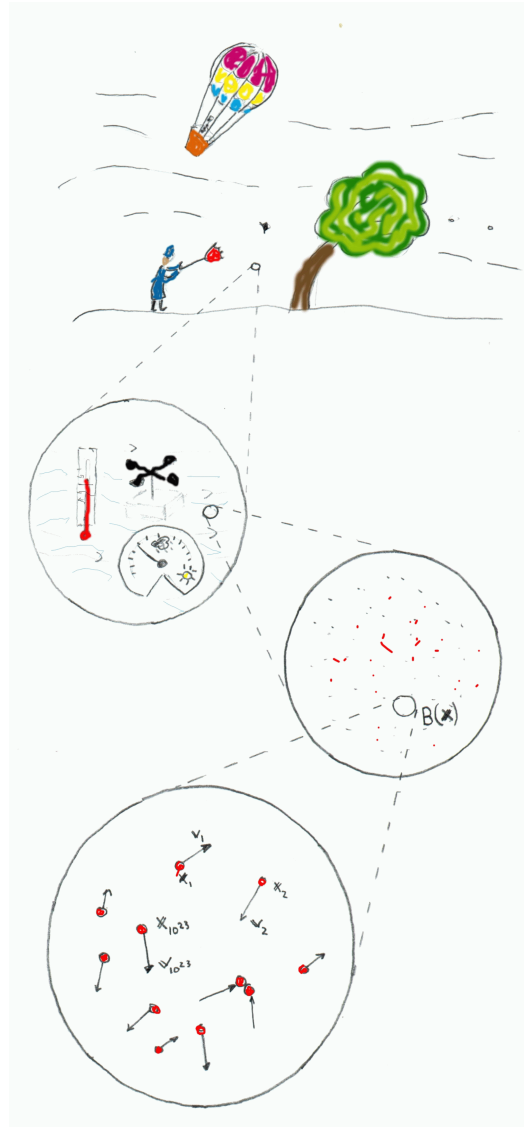
En gas består av myriader av molekyler ...

En gas består av molekyler, och det som skiljer en gas från en vätska eller från en fast kropp, är att molekylerna för det mesta rör sig oberoende av varandra. Ute i rymden, där det är nästan vakuum, kolliderar molekylerna mycket sällan, men i en tätare gas händer det ganska ofta. Hur gasen beter sig beror förstås på hur ofta molekylerna kolliderar. Gas-kinetik handlar mycket om just detta.

Om vi vill beskriva en gas fullständigt måste vi veta både hastighet och position hos varje partikel. Ja, egentligen räcker inte ens det, för riktiga molekyler kan rotera och vibrera också, men här tänker vi oss att molekylerna är klotformade och då spelar rotation och liknande ingen roll (det är ingen dålig approximation för en ädelgas). Om en behållare innehåller N st molekyler så behövs alltså $6N$ variabler för att beskriva systemet: \mathbf{x}_j , och \mathbf{v}_j , där $1 \leq j \leq N$. Om allt detta vore känt skulle man i princip kunna räkna ut precis hur gasen utvecklas i tiden, och hur den påverkar behållarens väggar och liknande. Problemet är bara att N är alldeles för stort för att detta skall vara möjligt.

... men det märker man inte alltid.

Och dessutom är det inte nödvändigt. I den vanliga luften känner man aldrig av enskilda molekyler, utan man känner ett medelvärde av alla molekyler som kolliderar med huden. Och dessutom kolliderar molekylerna med varandra mycket ofta, och vilket i sin tur gör att det bara är egentligen tre olika storheter vi märker:



$$\rho(\mathbf{x}, t) = m \#\{\mathbf{x}_j \in B(\mathbf{x})\}$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\#\{\mathbf{x}_j \in B(\mathbf{x})\}} \sum_{\mathbf{x}_j \in B(\mathbf{x})} \mathbf{v}_j$$

$$T(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3k \#\{\mathbf{x}_j \in B(\mathbf{x})\}} \sum_{\mathbf{x}_j \in B(\mathbf{x})} |\mathbf{v}_j - \mathbf{u}|^2$$

Summorna betyder att man bildar medelvärde över alla molekyler som finns i ett litet klot $B(\mathbf{x})$ som har som sitt centrum i \mathbf{x}^1 . Den första summan, $\rho(\mathbf{x}, t)$ ger "antal partiklar per volymenhet \times massan per partikel", d.v.s gasens densitet. De båda andra summorna ger på samma sätt gasens medelhastighet och temperatur.

¹Med $\#\{\mathbf{x}_j \in B(\mathbf{x})\}$ menas antal partiklar i klotet $B(\mathbf{x})$; k är Boltzmanns konstant

Vilka medelvärden är viktiga ...

För att detta skall vara meningsfullt att bilda medelvärden på detta sätt måste klotet vara litet i förhållande till det föremål som påverkas av gasen (ens hand, en termometer, eller till exempel ett flygplan, beroende på vilken situation man är intresserad av), men det måste vara så stort att man har många partiklar att bilda medelvärden av, och så stort att dessa troligen hinner kollidera innan de lämnar klotet.

Men om föremålet är litet (till exempel ett pollen-korn, eller en av dessa mikromotorer man försöker att konstruera nu), eller om gasen är mycket tunn, går inte dessa villkor att kombinera riktigt, och då beskrivs inte heller gasen väl av sin densitet, temperatur och hastighet. Men under vissa förhållanden kan man få en god beskrivning med en funktion $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, en "täthetsfunktion" som inte bara håller reda på hur många partiklar som finns i ett litet klot (som $\rho(\mathbf{x}, t)$), utan också på hur dessa partiklar är fördelade på olika hastighetsintervall.

... och hur räknar man ut dem?

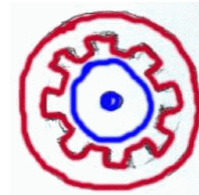
En ekvation som beskriver hur $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ förändras i tiden är den så kallade Boltzmannekvationen:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = Q(f, f)(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$$

Till vänster om likhetstecknet finns de termer som behövs för att beskriva vad som skulle hända om molekylerna aldrig kolliderade, och termen till höger är den så kallade kollisionsooperatoren, som beskriver alla möjliga kollisioner.

För att beskriva vad som händer måste man förstås också ange randvillkor (d.v.s vad som händer när molekyler kolliderar med väggarna), och begynnelsevillkor (hur fördelningen är vid tiden $t = 0$).

När man väl har räknat ut vad $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ är går det att beräkna densitet, tryck och hastighet som integraler:



10^{-4} m

Mikromotor

0 m.ö.h.

Fri medelväglängd

10^{-7} m



10 m

Rymdfärja

100 km.ö.h.

Fri medelväglängd

10^{-1} m

Fri medelväglängd = sträckan en molekyl flyttar sig innan den kolliderar

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbf{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \int_{\mathbf{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \mathbf{v} d\mathbf{v}$$

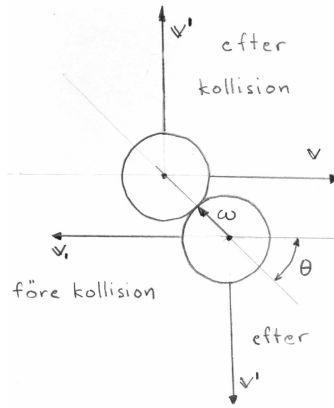
$$T(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3k\rho(\mathbf{x}, t)} \int_{\mathbf{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{v}$$

Kollisionerna i en gas kan beräknas ...

Vad är då Q ? Jo, funktionen $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ beskriver ju sannolikheten att det finns *en* partikel i punkten \mathbf{x} och med hastigheten \mathbf{v} . Om två partiklar skall kollidera måste det finnas *två* partiklar på samma ställe. När man härleder Boltzmannekvationen gör man ett kontroversiellt antagande, nämligen att partiklarna är *oberoende* av varandra. Detta antagande kallas ibland för *molekylärt kaos*, och leder till att sannolikheten att det finns en partikel med hastighet \mathbf{v} och en annan med hastigheten \mathbf{v}_1 i punkten \mathbf{x} ges av $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t)$. Då måste kollisionsooperatoren Q vara ett medelvärde av $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t)$, d.v.s. en integral över alla hastigheter \mathbf{v}_1 . Men det räcker inte: om molekylerna träffar varandra i en frontal-kollision studsar de bara tillbaka, och om de knappt snuddar varandra gör kollisionen knappt någon inverkan på resultatet. Och så finns alla varianter däremellan.

... som ett medelvärde

Kollisionsoperatorn måste bilda ett medelvärde över alla dessa möjligheter också. Till slut kommer man fram till att kollisionsoperatorn har följande utseende (fast då har man egentligen fuskat lite, genom att anta att det aldrig, eller nästan aldrig förekommer att tre eller flera partiklar kolliderar samtidigt):



$$Q(f, f)(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \int_{\mathbf{R}^3} \int_{S^2} (f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t) - f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t)) |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1| \cos(\theta) d\omega d\mathbf{v}_1$$

Än vet vi inte allt vi vill veta,

(om någon trodde det)

Det finns en rad frågor en matematiker skulle vilja kunna svara på i samband med Boltzmann-ekvationen. En del av dessa frågor vet vi mer eller mindre redan svaret på, medan andra skulle bringa evig ära och berömmelse åt den som lyckades hitta svaret (åtminstone stor berömmelse bland alla oss som pysslar med Boltzmann-ekvationen och liknande).

det finns rent matematiska frågor,

- Kan man lösa ekvationen för alla realistiska begynnelsedata och randvärden? Med realistiska begynnelsedata menar man en funktion $f_0(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ som är icke-negativ (den skall ju beskriva en sannolikhet), och sådan att

$$\int_{\Omega \times \mathbf{R}^3} f_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) (1 + |\mathbf{v}|^2) d\mathbf{x} d\mathbf{v} < \infty.$$

Den fysikaliska innebörden av detta är att massan och energin är begränsad. Lösningen skall uppfylla samma villkor för alla tider t , och därför vill man helst räkna i klassen L^1 , d.v.s. klassen av funktioner vars integral är ändlig. Men det visar sig att det är mycket svårt, eftersom högerledet i ekvationen är kvadratisk, och det går inte så bra att multiplicera L^1 -funktioner. Det dröjde mer än 100 år innan man fann en tillfredställande lösning till ekvationen, men då visade det

sig att en förvånande enkel *medelvärdesegen-skap* hos lösningar till transportekvationer var nyckeln till problemet. Transportekvationer är ekvationer som har samma typ av vänsterled som Boltzmann-ekvationen. Beroende på hur lösningarna konstrueras brukar de ofta kallas för *renormaliserade lösningar*, men det finns flera ekvivalenta former.

- Kan det finnas flera lösningar? Detta är en av de stora obesvarade frågorna, och ingen har något svar, utom i vissa specialfall, då det går att visa att det bara finns en lösning som bevarar energin, men det finns andra där energin växer i tiden.

Finns det lösningar

till ekvationen?

Kan det finnas fler

än en lösning?

... och fysikaliska ...

- Bevaras energin och massan hos lösningarna? Detta är det fysikaliskt rimliga antagandet, men för de så kallade renormaliserade lösningarna är det inte känt.
- En riktig gas närmar sig ett jämviktstillstånd om den lämnas i fred. Uttryckt i våra matematiska termer blir det

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \rightarrow \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-|\mathbf{v}-\mathbf{u}|^2/2T}$$

då tiden ökar. Detta kan man faktiskt visa! Att gasen närmar sig jämvikt har att göra med att entropin minskar (jo, faktiskt, vi brukar ha motsatt tecken på entropin jämfört med vad som är vanligt inom fysiken), d.v.s att

$$\int_{\Omega \times \mathbf{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \ln(f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)) d\mathbf{x}$$

avtar. Men vi vet inte hur fort detta går, och det finns mycket annat också att fundera på kring entropin.

Hur kommer det sig
att en gas närmar sig
jämvikt, när alla
kollisioner är reversibla?

- Om gasen blir tätare borde den första beskrivningen stämma allt bättre, d.v.s. det borde till slut räcka att använda densitet, medelhastighet och tryck (temperatur) för att beskriva gasen. Dessa storheter kan man räkna ut genom att lösa antingen Navier Stokes ekvationer eller Eulers ekvationer, beroende på om gasen måste betraktas som viskös eller inte. Då uppstår frågan: kan man visa att det finns ett släktskap mellan Boltzmannekvationen och Navier Stokes ekvation? Jodå, åtminstone kan man göra det under förutsättning att det finns lösningar som är tillräckligt "snälla", men å andra sidan har ingen lyckats visa att det i allmänhet finns så snälla lösningar. Detta är också ett stort och svårt problem att ge sig i kast med.

och nästan filosofiska problem,

- Detta att entropin minskar var en av Boltzmanns stora upptäckter, men det är också en sak som har satt myror i huvudet på fysiker och matematiker ända sedan dess (1872). Problemet är att så länge man har ändligt många partiklar (precis som i beskrivningen i början) är hela dynamiken reversibel, d.v.s. egentligen kan man lika gärna studera hur partiklarna rör sig bakåt i tiden som framåt i tiden. Men för Boltzmannekvationenens lösningar minskar ju entropin, och lösningarna går emot jämvikt då tiden ökar, så här verkar det finnas en motsägelse. I början hävdade många till och med att detta var ett bevis för att Boltzmannekvationen var fel. Det finns olika sätt att förklara detta på, men inget som alla är riktigt överens om. Ur matematisk synvinkel ligger problemet delvis i att man i härledningen av Boltzmannekvationen börjar med ett system av ändligt många partiklar, och sedan låter antalet partiklar gå mot oändligheten. Man får en följd av lösningar och det gäller att visa att denna följd konvergerar, och att gränsvärdet uppfyller ett antal villkor.

och så praktiska problem också.

- För att kunna använda Boltzmannekvationen praktiskt måste den lösas numeriskt med hjälp av datorer, och även detta är besvärligt. De metoder som oftast används är så kallade *Monte Carlo-metoder*, som går ut på att man låter ett relativt litet antal partiklar representera gasen. Men för att detta skall ge en bra approximation till den riktiga lösningen måste detta antal ändå vara ganska stort, och det medför att beräkningarna blir mycket tidskrävande. Så mycket forskning är ämnad att ge mer effektiva metoder, och även till verifiera att de nuvarande metoderna verkligen approximerar Boltzmannekvationen.

Hur varm blir en
rymdfärja när den
kommer in i
atmosfären?

Uppräkningen skulle kunna fortsättas länge: randvärdesproblem, inverkan av fält på laddade partiklar, modellering av gaser med inre frihetsgrader och mycket annat skapar matematiska problem som ännu inte har lösts. Egentligen är det inte rätt att dela in problemen i kategorier som här ovan: det finns mycket matematik i allihop. Vissa av problemen är säkert oerhört svåra att lösa, medan det i andra fall kanske ligger ett ganska enkelt resultat bara och väntar på att bli framskrapad, som var fallet med *medelvärdesegenskapen för transportekvationer*, som behövdes för att visa att det finns lösningar.

Det här gör vi i Göteborg

Vi är ett tiotal personer vid matematiska institutionen i Göteborg som på ett eller annat sätt ägnar oss åt kinetisk teori. Vi är ganska teoretiskt inriktade, och har huvudsakligen studerat problem som har att göra med existens och entydighet av lösningar till olika kinetiska ekvationer. Men på senare tid har vi också börjat intressera oss för de olika numeriska metoder som finns. Vi deltar också i ett stort europeiskt, så kallat TMR-nätverk, som ägnar sig åt kinetisk teori tillämpad på till exempel halvledare och rymdtillämpningar.

Bernt Wennberg

Titta gärna också på vår hemsida:
<http://www.md.chalmers.se/Math/Research/Kinetics/>
eller kontakta Professor Leif Arkeryd
tel: 031-772 3541
arkeryd@math.chalmers.se