Sitzungsber. Abt. II (1999) 208: 79–87

Zur kinetischen Gastheorie IV

Von

E. Hlawka

(Vorgelegt in der Sitzung der math.-nat. Klasse am 25 März 1999
durch das w. M. Edmund Hlawka)

Auf dem Intervall $[0, 1/2]$ seien N Teilchen (im folgenden oft auch Moleküle genannt) gegeben. Die Anfangslage dieser N Teilchen zur Zeit $t = 0$ sei $u_1, \ldots, u_N$ und ihre Geschwindigkeit $v_1, \ldots, v_N$. Die Teilchen seien massenlos angenommen, ihre Bewegung sei eine geradlinige und sie werden an den Endpunkten und an den Punkten 0 und 1/2 elastisch reflektiert. Von den Geschwindigkeiten wird noch angenommen, daß sie im Geschwindigkeitsintervall $[0, c]$, wo c positiv ist, gleichverteilt sind. Dies soll folgendes bedeuten: Betrachten wir ein beliebiges Teilintervall J_1 des Geschwindigkeitsintervalls und sei $N'(K)$ die Anzahl der Geschwindigkeiten $v_1, \ldots, v_N$, die in K liegen. Dann gelte

$$\left| \frac{N'(J_1)}{N} - \frac{L(J_1)}{c} \right| \leq \breve{D}_N,$$

wo $L(K)$ allgemein die Länge eines Intervalles K ist, und für großes N sei diese Geschwindigkeitsdiskrepanz $\breve{D}_N$ „klein".

Es wurde nun in der Arbeit zur kinetischen Gastheorie [1] gezeigt, daß dann diese Teilchen bei ihrer Bewegung bei beliebiger Anfangslage u_j für fast alle Zeiten gleichverteilt sind, wenn die Dauer der Zeit T nicht zu groß ist. Genauer wird folgendes gezeigt:

Bezeichnen wir mit $M_T(f)$ den Mittelwert $1/T \int_0^T f(t)dt$, bezeichnen wir weiter mit $D_N(t)$ kurz die Diskrepanz der N Teilchen zur Zeit t, so ist

$$D_N(t) = \sup_J \left| \frac{|N'(J, t)|}{N} - \frac{2L(J)}{c} \right|,$$

wobei $N'(J,t)$ die Anzahl der Teilchen, die sich zur Zeit t in J befinden, und $L(J)$ die Länge von J ist. Dann gilt

$$M_T(D_N(T)) \leq K\left(\frac{\log T}{T}\left(\frac{1}{c}+T\breve{D}_N\right)\right)^{\frac{1}{2}},$$

wo K eine absolute Konstante ist, z.B. 20. Daraus folgt:

Ist α eine beliebige positive Zahl, so ist $D_N(t) < \alpha$ im Intervall $[0,T]$ ausgenommen einer Zeitmenge in diesem Intervall, mit Maß

$$\mu < K\frac{\sqrt{T}}{\alpha}\left(\frac{\log T}{T}\left(\frac{1}{c}+T\breve{D}_N\right)\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Ist also α nicht zu klein, K groß, t nicht zu groß, $\breve{D}_N$ klein, so sind die Teilchen gleichverteilt für fast alle t abgesehen von der Ausnahmemenge mit einer Diskrepanz kleiner als α.

Ein einfaches Beispiel ist

$$\alpha = T^{\frac{1}{4}}\log T\left(\frac{1}{c}+T\breve{D}_N\right)^{\frac{1}{4}}.$$

Hier ist die Diskrepanz von gleicher Größenordnung wie die Ausnahmemenge. Ein numerisches Beispiel ist in meiner Arbeit [1] angegeben. Wenn c von der Größenordnung 10^5 und T eine Stunde ist, so ist $\breve{D}_N \leq (\log N)/N$ und $N = 10^3$. Dann beträgt die Ausnahmemenge höchstens ein paar Minuten.

Selbstverständlich muß man den Nullpunkt nicht gerade als Anfangswert wählen, sondern kann dieselbe Beobachtung machen im Intervall $[t_0, t+T]$ zu einem beliebigen Zeitpunkt t_0.

Man muß nun beachten, daß natürlich diese Teilchen, die sich zur Zeit t im Intervall J aufhalten, sich zu einer späteren Zeit t' ganz woanders aufhalten und sich andere Teilchen zur Zeit t' im Intervall J befinden werden, aber nur ihre Anzahl bleibt, von der Ausnahmsmenge abgesehen, ungefähr immer die gleiche bis auf einen Fehler α, und sie hängt nur von der Länge des Intervalles ab, sodaß sich also in gleich langen Intervallen fast immer die gleiche Anzahl von Teilchen für alle t ausgenommen der Ausnahmemenge befinden. Das ist nichts anderes als der Satz von Avogadro (aus der Physik) im eindimensionalen Fall, der besagt, daß bei einem idealen Gas bei gleichem Druck und gleicher Temperatur gleiche Volumina gleich viele Moleküle enthalten. Natürlich kann der Satz in voller Gänze nicht gültig sein, weil die Teilchen ja hin- und herschwirren. Den mehrdimensionalen Fall habe ich in meiner Arbeit [1] behandelt.

Man kann also sagen, daß der Satz von Avogadro eigentlich ein Satz der Gleichverteilung ist, lange bevor überhaupt die Idee der Gleichverteilung von Hermann Weyl formuliert wurde.

Um nun den Tanz dieser Teilchen – hier im 1-dimensionalen Fall könnte man das fast mit einer Quadrille vergleichen – weiterzuverfolgen, benützen wir eine Idee, in verschiedenen voneinander unabhängigen Beobachtungen die Bewegung der Moleküle zu verfolgen.

Wir betrachten dazu s linear unabhängige Irrationalzahlen $a_1, \dots, a_s$, linear unabhängig im Sinne der Gleichverteilung – weitere Voraussetzungen werden gleich formuliert werden – und betrachten die Bewegung der Teilchen zu den Zeiten t, $a_1 t, \dots, a_s t$. Wir setzen $n = s + 1$ und betrachten

$$T^{\,n}_{N}(t) = \sup_{J} \left| \frac{N'(t, J)}{N} - 2^n V(J) \right|,$$

wo J das mengentheoretische Produkt $J_1 \cdot J_2 \cdot \ldots \cdot J_n$ ist, die J_i im Intervall $[0, 1/2]$ liegen und $V(J) = L(J_1) \cdot L(J_2) \cdot \ldots \cdot L(J_n)$ das Produkt der Längen dieser Intervalle ist. N' ist die Anzahl der Teilchen, die sich zur Zeit t in J_0 befinden, zur Zeit $a_1 t$ in $J_1, \dots,$ zur Zeit $a_s t$ in J_s. Das Supremum erstreckt sich über alle diese J.

Wir werden zeigen, daß auch dieses $T^{\,n}_{N}(t)$ für fast alle t im Intervall $[0, T]$ abgesehen von einer Ausnahmemenge „klein" ist, sodaß sich dieses dynamische System des idealen Gases der N Teilchen annähernd wie ein System in der Wahrscheinlichkeitstheorie verhält. Allerdings müssen wir an diese n Zahlen noch einige Bedingungen stellen. Zu diesem Zweck führen wir einige Notationen ein.

Wir betrachten Vektoren im R^n:

$$h = (h_0, \dots, h_s) \quad \text{sei Gittervektor, d.h. alle } h_j \text{ ganzzahlig} \tag{1}$$

$$e = (1, \dots, 1) \tag{2}$$

$$\|\hat{h}\| = \max\nolimits_{h_j} |h_j|, \quad j = 1, \dots, s \tag{3}$$

$$\hat{\mathrm{R}}(h) = \prod_{j=1}^{s} \max(1, |h_j|) \tag{4}$$

$$\mathrm{R}(h) = \hat{\mathrm{R}}(h) \max(|h_0|, 1)$$
$$\|h\| = \max(|h_0|, \|\hat{h}\|)$$

$$a = (a_0, \dots, a_s), \quad a_0 = 1, \quad a_j \text{ sind Irrationalzahlen}$$

$$\langle ah \rangle = a_0 h_0 + a_1 h_1 + \dots + a_s h_s$$

a ist vom Typus μ. Es ist μ nicht eindeutig bestimmt. Mit μ ist auch μ', wenn $\mu' > \mu$, zulässig, also auch a vom Typus μ'. Das gleiche gilt vom Charakter α.

$$\hat{\mathrm{R}}(h)^{\mu}|\langle ah\rangle| \geq k(a), \quad \text{wo } k(a) \text{ nur von } a \text{ abhängt und vom Charakter } \alpha \text{ ist.}$$

$$\|\hat{h}\|^{\alpha}|\langle ah\rangle| \geq k'(a). \quad \text{Es ist dann stets } \alpha\, s \geq \mu.$$

Beispiel: Wir nehmen $a_j = 2^{j/(s+1)}$, es ist dann $k'(a) \geq \frac{1}{(2s)^s}$.

Tatsächlich läßt sich aufgrund eines tiefliegenden Satzes von W. Schmidt zeigen, daß $\mu = 1 + \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$) gewählt werden kann.

Die zugehörige Konstante k kann bis jetzt aber nicht konstruktiv angegeben werden, daher nehmen wir in diesem Beispiel $\mu = s$.

Wir haben in der Abhandlung [2], S. 290 gezeigt, daß

$$\sum_{\|h\| \leq M} \frac{1}{\mathrm{R}(h)^{\mu}} \frac{1}{|\langle \alpha h\rangle|} \leq k^{-m}(a)(\log\ M)^{\mu}$$

Wir ordnen nun jedem Molekül mit der Anfangslage u_k und der Geschwindigkeitslage v_k im Intervall $[0,1/2]$ ein Teilchen im n-dimensionalen Wü rfel zu mit der Anfangslage $u_k e$ und dem Geschwindigkeitsvektor $v_k A$. Die Bewegung dieses Teilchens in $[0,1/2]^n$ erfolgt wieder so, daß es an den Wänden elastisch reflektiert wird. Nun wurde in Arbeit [1] gezeigt, daß man die Bewegung solcher Teilchen zurückführen kann auf die geradlinige Bewegung dieser Teilchen im Wü rfel $[0,1]^n : 0 \leq x_j < 1$, $j = 1, \ldots, n$. Wir betrachten die Folge $\bar{w}_k = u_k + v_k t$, $k = 1, \ldots, N$ mit Diskrepanz $\bar{D}_N$.

Jetzt können wir auf $\bar{D}_N$ die Formel von Erdös–Turan–Koksma (ETK) anwenden:

$$\bar{D}_N \leq 3^n \left(\frac{1}{M} + \sum_{\|h\| \leq M} \frac{1}{\mathrm{R}(h)} |W_N(h)| \right), \tag{5}$$

wo $W_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} e(\langle ah\rangle, \bar{w}_k)$ und $e(\alpha) = e^{2\pi i \alpha}$.

Dabei haben wir bei der Formel von ETK mit 3^n schon eine Konstante benützt, die erst in den letzten Jahren bekannt wurde (Man kann sogar q^n, $q > 1$, wählen).

Wir haben nun die Aufgabe $M_T \bar{D}_N(t)$ abzuschätzen. Es genügt $M_T(|W_N|)$ abzuschätzen. Nun ist dieser Ausdruck $\leq \sqrt{M_T(|W_N|)^2}$. Es ist

$$|W_N|^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{k,l=1}^{N} e(\langle ah\rangle, w_k(t) - w_l(t)). \tag{6}$$

Um nun das zugehörige M_T auszurechnen brauchen wir nur zu beachten, daß für $k = l$ die Exponentialfunktion den Wert 1 hat, für $k \neq l$ den Wert

$$e_{k,l} = e(\langle ah\rangle, \bar{u}_k - \bar{u}_l) = \frac{1}{T}\frac{e(t\langle ah\rangle, v_k - v_l) - 1}{\langle ah\rangle, v_k - v_l}, \tag{7}$$

also ist für $k \neq l$

$$|M_T|(e_{k,l}) \leq \frac{1}{T}\left(\langle ah\rangle |v_K - v_L|\right)^{-1}. \tag{8}$$

Es ist also

$$M_T(|W_N|^2) \leq \frac{1}{N} + \frac{1}{T}\sum_{k\neq l} |\langle ah\rangle \cdot (v_k - v_l)|^{-1}. \tag{9}$$

Nun haben wir in [1] gezeigt, daß $(h' = h + h_1 a_1 + \cdots + h_s a_s = \langle ah\rangle)$

$$\sum_{k\neq l} \frac{1}{|W'(v_k - v_l)|} \leq \log\frac{T}{c}(1 + T\breve{D}_N). \tag{10}$$

Es ist also jetzt

$$\begin{aligned} M_T(D_N) &\leq 6^n\left(\frac{1}{M} + \sum_{\|h\|\leq M}\frac{1}{\mathrm{R}(h)\sqrt{\langle ah\rangle}}\sqrt{A(T)}\right), \quad \text{wo} \\ A(T) &= \frac{\log T}{T}\left(\frac{1}{c} + T\bar{D}_N\right). \end{aligned} \tag{11}$$

Nun ist

$$\sum_{\|h\|\leq M}\frac{1}{\mathrm{R}(h)\sqrt{\langle ah\rangle}} \leq \left(\sum_{\|h\|\leq M}\mathrm{R}(h)^{\mu-2}\sum_{\|h\|\leq M}\frac{1}{\mathrm{R}(h)^{\mu}\langle ah\rangle}\right)^{\frac{1}{2}},$$

das ist nach der Abschätzung am Ende der Einleitung $\leq (2^n M^{\mu n}\log^n M)^{1/2}$ multipliziert mit einer Konstanten $\leq k_1^{-n}$. Wählen wir nun das M so, daß $1/M \leq v^{1/(2\nu)}$, $\nu = \mu M + 1$, so erhalten wir

$$M_T(D_N) \leq 6k_2^{-n} < 12k_2^{-n}\left(\frac{\log T}{T}\left(\frac{1}{c} + T\breve{D}_N\right)\right)^{\frac{1}{2\nu}}. \tag{$*$}$$

Das ist das Resultat, das wir erreichen wollten. Nehmen wir das Beispiel am Schluß der Einleitung: Da wir das k' von der Größenordnung n^{-n} wählen, wird die Konstante von einer Größenordnung e^{n^3} sein. Wenn wir diese sehr grobe Abschätzunf zugrunde legen, so kann dies nur verwendet werden, wenn die Maximalgeschwindigkeit $c > n^3$, $|T| < \log c$

und $\breve{D}_N$ klein ist, also sehr viele Teilchen vorliegen. Wir können dann sagen, daß $D_N < \alpha$ gilt für alle t im Intervall $[0, T]$, abgesehen von einer Ausnahmemenge vom Maß $\leq K/\alpha$, wo K eine Abkürzung für die rechte Seite von $(*)$ ist.

Anwendung: Nehmen wir der Einfachheit halber an, daß n eine gerade Zahl und daß von den n Intervallen $J_1, \dots, J_n$ r Intervalle einander gleich und $[0, 1/4]$ sind und die anderen $n - r$ Intervalle gleich $[1/4, 1/2]$ sind. Dies geht nun auf $\binom{n}{r}$ Möglichkeiten. Bezeichnen wir jetzt mit $\bar{N}(r)$ die Anzahl der Moleküle, die während der n Beobachtungen im Zeitraum $[0, T]$ für r Beobachtungen im Intervall $[0, 1/4]$ liegen. So erhalten wir eine Abschätzung

$$\frac{\bar{N}(r)}{N} = \binom{n}{r} \left(\frac{1}{2}\right)^n + F,$$

bis auf einen Fehler $F < \alpha 2^n$ für alle t ausgenommen eine Menge, deren Maß kleiner ist als K/α.

Nun nimmt der Binomialkoeffizient $\binom{n}{r}$ den größten Wert an, wenn $r = n/2$ ist. Nennen wir H^r den Logarithmus von $\binom{n}{r}$ die Entropie des Zustandes r, so ist die Entropie am größten, wenn $r = n/2$. Während dieser n Beobachtungen liegen sowohl in der ersten Hälfte $[0, 1/4]$ als auch in der zweiten Hälfte $[1/4, 1/2]$ gleich viele Teilchen, im ganzen Zeitraum $[0, T]$ ausgenommen die vorher zitierte Ausnahmemenge. Allerdings muß der Fehler α berücksichtigt werden, und es gilt nur, wenn das n nicht zu groß ist im Vergleich zur Geschwindigkeit c. Das kann alles explizit an unserem Beispiel durchdiskutiert werden und damit ist auch ein Zusammenhang mit der Arbeit [3] hergestellt. In dieser Arbeit wird stets von einem Kasten gesprochen, dieser besteht jetzt aus n Beobachtungen.

Den Extremfall $r = n$ hat A. Einstein bei seiner Lichtquantentheorie zugrundegelegt, vgl. [1]. Bei uns ist dies

$$\frac{\bar{N}(n)}{N} = \left(\frac{1}{2}\right)^n + F.$$

Wir können also, wie sofort aus $(*)$ folgt, die Überlegungen in der eben zitierten Arbeit übertragen auf die empirische Entropie $\log \frac{\bar{N}(r)}{N}$ bzw. $\log \bar{N}(r)$ mit allen Einschränkungen, die wir vorher angegeben haben und für alle Zeiten t im Intervall $[0, T]$ wieder mit der entsprechenden Ausnahmemenge.

Wir betrachten statt dem Intervall $[0, 1/4]$ allgemein ein Intervall $J = [0, \xi]$, wo $0 \leq \xi < 1/2$, so ist seine Länge $V(J) = \xi$.

Es ist dann also

$$\frac{\bar{A}\,(J,r)}{N} = \binom{n}{r}(2V(J)^r(1-2V(J))^{n-r} + \text{Fehler}.$$

Einstein hat auch hier den Fall $r=n$ betrachtet.

Wir betrachten jetzt den Fall $r=1$ und schreiben $\bar{A}\,(J,r) = W(J)$, dann haben wir

$$\frac{W(J)}{N} = 2nV(J)(1-2V(J))^{n-1} + \text{Fehler}.$$

Es ist

$$\begin{aligned}\frac{\overline{W(J)}}{N} &= 2n\int_0^{1/2} V(J)(1-2V(J))^{n-1}dJ\\ &= \frac{1}{2n} + \frac{1}{2(n-1)n} + \text{Fehler}.\end{aligned}$$

Es wird dann

$$\left|\frac{\overline{W(J)}}{N} - \frac{1}{2n}\right| \leq \frac{1}{2(n-1)n} + \frac{1}{4}\text{Fehler}.$$

Es sei nun (ξ_k) eine gleichverteilte Folge mit der Diskrepanz $\hat{D}_N$. Wir setzen

$$J_k = V(\xi_k).$$

Es wird also dann

$$\left|\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\frac{W(J_r)}{N} - \frac{1}{2n}\right| \leq \frac{1}{2n^2} + \frac{1}{4}\ \text{Fehler} + \hat{D}_N.$$

Es ist $\overline{W(J)}$ die mittlere freie Weglänge.

Im mehrdimensionalen Fall gehen wir analog vor. Es ist im folgenden $e(\alpha) = e^{2\pi i\alpha}$

$$J = \sum_{|h|\leq M}\frac{1}{R(h)}\frac{1}{T}\int_K^{T+K}\left|\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}e(ahv_k t)\right|^2 dt.$$

Dabei ist

$$h = \begin{bmatrix} h_1\\ \vdots\\ h_s\end{bmatrix}, \quad h_j = (h_{j_1},\ldots,h_{j_r}),$$

$$R(h) = R(h_1)\ldots R(h_s).$$

Es ist

$$J = \sum_{|h|\leq M} \frac{1}{R(h)} \frac{1}{N^2 T} \left| \int_K^{T+K} \sum_{k,l} e(ah(v_k - v_l)t)dt \right|^2$$

$$= \sum_{|h|\leq M} \frac{1}{R(h)} \left(\sum_{k=l} + \sum_{k\neq l} \right)$$

$$= \sum_{|h|\leq M} \frac{1}{R(h)} \left(\frac{1}{N} + \sum_{k\neq l} \left(\frac{e(Tah)(v_k - v_l)t) - 1}{TN^2 ah(v_k - v_l)} \right) e(ah(v_k - v_l)t) \right)$$

$$\leq \sum_{|h|\leq M} \frac{1}{R(h)} \left(\frac{1}{N} + \frac{1}{2\pi T} \frac{1}{N^2} \sum_{k\neq l} \left(\frac{1}{|ah(v_k - v_l)|} \right) \right).$$

Nun gilt, wenn S_r die Schichten

$$\frac{r}{T} \leq |ah(v_k - v_l)| < \frac{r+1}{T}$$

des Körpers $K \times \cdots \times K$ von der Dimension rs sind, daß

$$\frac{V(S_r)}{V(\Omega)} \leq \frac{\tau(\Omega)}{c} b(S_r),$$

also ist

$$\frac{1}{N} \sum_{(r/T)\leq|ah(v_k - v_l)|<(r+1/T)} 1 \leq \frac{\frac{2\tau(\Omega)}{c}}{T|ah|} + \breve{D}_N.$$

Wir erhalten daher

$$J \leq \sum_{|h_1| \leq M,\ldots,|h_r| \leq M} \frac{1}{R(h)} \left(\frac{1}{N} + \frac{2\tau(\Omega)}{c} \left(\frac{1}{|ah|} + \breve{D}_N \right) \right).$$

Nun ist

$$\left| \begin{bmatrix} h_1 \\ \vdots \\ h_s \end{bmatrix} a \right| = |ah_1 + \cdots + ah_s| \leq \sqrt{|ah_1|^2 + |ah_s|^2},$$

also wird

$$J \leq r \sum_{j=1}^{r} (\log M)^{s-1} \sum_{|h_j|\leq M} \frac{1}{R(h_j)} \frac{1}{|ah_j|} \left(\frac{1}{N} + \frac{2\tau(\Omega)}{c} \breve{D}_N \right).$$

Nun ist

$$\sum_{\|h_j\| \leq M} \frac{1}{R(h)|ah_j|} \leq \sum_{|h_j| \leq M} R(h_j)^{\mu-2} \sum_{|h_j| \leq M} \frac{1}{R(h)} M^{\frac{1}{s}}$$
$$\leq (2^s M^{\mu s} \lg^s M)^{\frac{1}{2}},$$

also haben wir

$$M_T(D_N) < 12k^{-s}\left(\frac{\lg T}{T}\left(\frac{1}{c} + T\breve{D}_N\right)^{\frac{1}{2s}}\right).$$

Jetzt können wir die gleichen Folgerungen wie vorher ziehen.

Literatur

[1] Hlawka, E.: Mathematische Modelle der Kinetischen Gastheorie, Rhein-Westfäl. Akad. d. Wiss, Nat.-Ing.-Wirt.wiss., Vorträge N240, Westdt. Verlag, Opladen, 1974 und Gruber, P. M. u. Schmidt, W. M. (Hrsg.), Selecta Edmund Hlawka, Springer, Berlin Heidelberg New York Tokyo, S. 361–375 (1990).

[2] Hlawka, E.: Über einige Reihen, die mit dem Vielfachen von Irrationalzahlen zusammenhängen. Acta Arithmetica **37**, 285–306 (1980).

[3] Hlawka, E.: Gleichverteilung und Entropie, Das Entropiespiel von T. und E. Ehrenfest [oder: Über Hausfrauen und Dämone]. Expositiones Math. **11**, 3–46 (1993).

[4] Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt, A. Einstein, Collected Papers of Albert Einstein, Vol. 3, Document 14; Annalen der Physik **17** (1905).

Anschrift des Verfassers: Prof. Dr. E. Hlawka, Institut für Analysis und Technische Mathematik der TU Wien, Wiedner Hauptstraße 8–10, A-1040 Wien.