

# 3 Verallgemeinerte Boltzmann-Gleichungen und die zellulären Automaten

Wolfgang Eisenberg\*

*Nach einem gleichlautenden Vortrag im Sommerfeld-Seminar am 12. März 1997*

## 3.1 Einleitung

Die Statistische Physik ist eine der drei Säulen der Moderne in der theoretischen Physik – neben der Quantenphysik und der relativistischen Physik. Wichtig für unsere Thematik ist ihre Charakteristik als methodische Grundlagendisziplin, weniger ihre Ausprägung als spezielles Gebiet der Physik mit definiertem Objektbereich, wie z. B. die Hydrodynamik oder die Elektrodynamik (siehe z. B. [1, 6]).

Vor einer Anwendung der Statistischen Physik sind zwei Grundprobleme zu klären, das Problem der Elementarprozesse, d. h. der Prozesse von Einzelteilchen, z. B. der Einteilchen-Dynamik, und das Problem der Statistik vieler Teilchen, d. h. das Zusammenwirken vieler Teilchen mit Korrelationen und kooperativen Effekten. Die disziplinspezifischen Grundgrößen sind die Temperatur und die Entropie. Die Grundprozesse sind die der Irreversibilität und die der Evolution. In der Statistischen Physik unterscheidet man zudem hauptsächlich drei Methoden zur Beschreibung der Systembewegungen:

1. *Stochastik von Prozessen* (Ad-hoc-Annahmen) – z. B. die LANGEVIN-Gleichung zur Beschreibung der BROWNSchen Molekularbewegung;

---

\*Dr. rer. nat. Wolfgang Eisenberg, Arnold-Sommerfeld-Gesellschaft e.V., Thaerstraße 34, D-04129 Leipzig

2. *Kinetische Theorie* (erste Prinzipien, Nicht-Gleichgewicht) – z. B. die BOLTZMANN-Gleichung als Transport-Gleichung;
3. *Response-Theorie* (erste Prinzipien, Gleichgewichtsschwankungen; andere Bezeichnungen: Statistische Antwort-Theorie oder KUBO-Formalismus oder Korrelationsfunktionsmethode oder Methode der GREENSchen Funktionen): LIOUVILLE-Gleichung.

Tatsache ist, daß die Naturprozesse meist MARKOVsch, d. h. ohne Gedächtnis, sind und daher die „gedächtnislose“ BOLTZMANN-Gleichung so vielseitig – wenigstens näherungsweise – anwendbar ist. Ein weiterer Vorteil der BOLTZMANN-Gleichung als Grundgleichung der kinetischen Gastheorie ist die aus ihr leicht ableitbare und näherungsweise gültige sogenannte elementare Gastheorie (historische Vorstufe der Kinetik). Ihre einfachen Konzepte wie die der anschaulichen mittleren freien Weglänge und der mittleren Stoßfrequenz von Gasteilchen überzeugen in ihrem Anwendungsbereich. Weitere typische Anwendungsbeispiele sind die Diffusion oder Wanderung (mit/ohne Sprünge) von Teilchen und der vom elektrischen Widerstand geprägte Teilchentransport im äußeren Kraftfeld (siehe z. B. [2]).

Daher ist schon der Nachweis, daß sich zelluläre Automaten zur Lösung der BOLTZMANN-Gleichung und ihrer Verallgemeinerungen eignen, mitentscheidend für das Anwendungsspektrum solcher Automaten. Denn die Strukturterme der BOLTZMANN-Gleichung, der Diffusions-, der Feld- oder der Stoßterm, bedingen und begrenzen die Zuordnung konkreter Anwendungen (auch mit Ad-hoc-Annahmen) in dieses allgemeine Strukturschema der genannten Grundgleichung der kinetischen Theorie. Damit ist die Berechnung z. B. von Transportkoeffizienten, Relaxationszeiten physikalischer Prozesse und Geschwindigkeitskonstanten der chemischen oder biochemischen Reaktionen nicht nur aus dem akademischen Bereich, sondern natürlich auch aus dem Industrie- und Umweltbereich durchführbar.

## 3.2 Die BOLTZMANN-Gleichung – die Grundgleichung der kinetischen Theorie

Die Statistische Physik ist eine Vielteilchen-Physik. Daher wird zur Beschreibung des physikalischen Systems eine Verteilungsfunktion  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$  eingeführt, die von den Orts-, Geschwindigkeitskoordinaten und der Zeit, also von  $\vec{r}$ ,  $\vec{v}$  und  $t$ , abhängt. Wenn diese Einteilchen-Verteilungsfunktion nicht ausreicht,

wird eine Vielteilchen-Verteilungsfunktion eingeführt. Sie hängt von vielen Variablen ab. Die *Verteilungsfunktion* ist in einem Phasenraum der Orts- und Impuls- oder Geschwindigkeitskoordinaten definiert. Ihre Normierung ist daher oft auf die Teilchenzahl  $N$  oder Teilchenzahldichte  $n(r)$  bezogen:

$$\int f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\vec{r} d^3\vec{v} = N, \quad \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\vec{v} = n(t, \vec{r}).$$

Allerdings ist zuerst die Frage zu beantworten: Was heißt viele Teilchen? Die Antwort ist einfach und fundamental. Die Mittelwertbildung zur Festlegung der Meßgrößen (Observablen) muß sinnvoll sein.

Klar ist, daß die Anzahl der Teilchen, d. h. die Systemgröße, von der Art des Experimentes und der zu erwartenden oder beobachteten Meßgenauigkeit abhängt. So kann ein einzelner Atomkern mit 100 Nukleonen, ein elektronisches Nanometersystem mit 100 Elektronen oder ein Polymermolekül mit 100 Monomeren oft schon als thermodynamisches System verstanden werden.

Die BOLTZMANN-Gleichung ist zusammen mit einer ganzen Reihe von Modifikationen und Erweiterungen die Grundgleichung der kinetischen Theorie (siehe z. B. [3]). Als Ausgangspunkt dient die streng gültige, reversible LIOUVILLE-Gleichung für die Verteilungsfunktion oder Wahrscheinlichkeitsdichte  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$  eines einatomigen klassischen Gases:

$$(\partial/\partial t)f + \vec{v}(\partial/\partial\vec{r})f + \vec{F}/m(\partial/\partial\vec{v})f = 0$$

(LIOUVILLE- oder stoßfreie BOLTZMANN-Gleichung). Dabei bedeutet  $\vec{F}$  die (äußere) Kraft, z. B. die Schwerkraft oder die elektrische Kraft im Fall geladener Teilchen,  $m$  und  $\vec{v}$  die Teilchenmasse bzw. -geschwindigkeit und  $\partial/\partial\vec{r}$  bzw.  $\partial/\partial\vec{v}$  die Gradienten in den Orts- bzw. Geschwindigkeits-Unterräumen. Nach BOLTZMANN kann man die LIOUVILLE-Gleichung durch Hinzufügen des bekannten Stoßintegrals  $J(f)$  für Zweiteilchenstöße auf der rechten Seite zu einer irreversiblen kinetischen Gleichung machen.

Damit wird die Behandlung von irreversiblen Prozessen wie der Stromtransport und die Berechnung der Transportkoeffizienten, z. B. der elektrischen Leitfähigkeit, möglich. Da die LIOUVILLE-Gleichung (ohne  $J$ ) bereits streng gültig ist und die Bahnkurve eines jeden Teilchens (d. h. des zugehörigen Bildpunktes) im Phasenraum korrekt erfaßt, kann eine solche Erweiterung nur so erfolgen, daß die Teilchenbildpunkte durch harte Zweierstöße momentan verschwinden und (nach dem Stoßprozeß) an anderer Stelle im Phasenraum (genauer: im Geschwindigkeitsraum) wieder auftauchen. Diese anschauliche Diskussion kann mathematisch streng (Modell starrer Kugeln) fundiert werden.

Die BOLTZMANN-Gleichung ist eine *Bilanzgleichung*. Sie besitzt die Struktur einer Master-Gleichung. Als BOLTZMANN-Master-Gleichung lautet sie:

$$\frac{df}{dt} = \int [W(\vec{v}|\vec{v}_1)f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) - W(\vec{v}_1|\vec{v})f(\vec{r}, \vec{v}, t)] d^3\vec{v}_1.$$

Eine genauere Untersuchung hat für Zweierstöße den Stoßpartner zu berücksichtigen. Im Fall verdünnter Gase, kurzzeitiger, harter Stöße, ohne „Gedächtnis“ der Teilchen (molekulares Chaos) gilt die MARKOVsche Stoßdynamik. Der Stoßterm  $J(f)$  hat dann folgendes Aussehen:

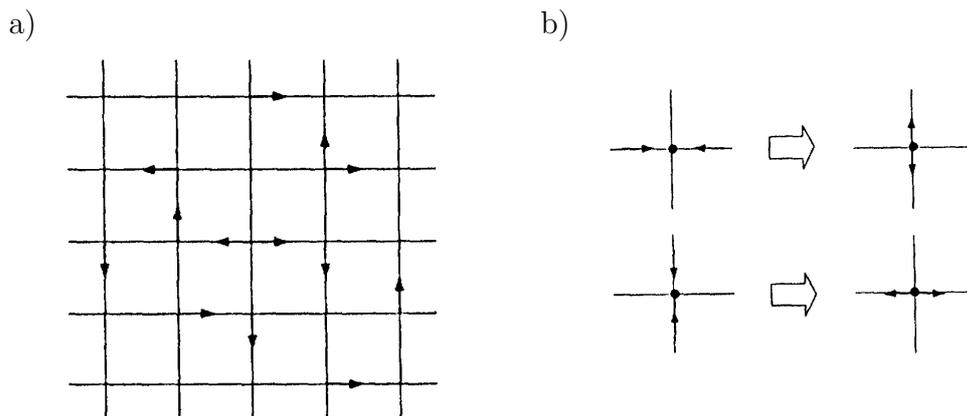
$$\frac{df}{dt} = \iiint d^3\vec{v}' d^3\vec{v}_1 d^3\vec{v}'_1 [W(\vec{v}, \vec{v}_1|\vec{v}', \vec{v}'_1)f'f'_1 - W(\vec{v}', \vec{v}'_1|\vec{v}, \vec{v}_1)ff_1].$$

Die BOLTZMANN-Gleichung ist mathematisch eine nichtlineare Integrodifferentialgleichung. Daher werden zumeist Näherungslösungen, z. B. mit Reihenentwicklungen oder mit Modell-Stoßgliedern, angegeben (siehe z. B. [3]). Oft genügt die Relaxationszeitnäherung (Relaxationzeit  $\tau$ ):  $J(f) = (f - f_0)/\tau$ . Erfolgreich wurde auch die hier zur Diskussion stehende Methode zellulärer Automaten angewandt (siehe z. B. [4]). Sie wurde im Vergleich mit der bekannten Monte-Carlo-Methode (siehe z. B. [5]) ausführlich getestet. Weitere Untersuchungen wären wünschenswert

### 3.3 Lösungsmethode der zellulären Automaten

Der zelluläre Automat (ZA) wurde als Modell zum Studium der Wachstumsphänomene in der Physik und der Evolution in organischen Systemen konzipiert. Die ZA sind diskrete dynamische Systeme mit endlich vielen dynamischen Variablen. Die in diskreten Zeitschritten ablaufende Dynamik ist das Ergebnis dynamischer Regeln, wobei der neue Wert einer Zellvariablen eine Funktion des alten Wertes und der Werte von Nachbarvariablen (lokale Wechselwirkung) ist. Die Regeln können deterministisch oder stochastisch sein.

Um aus den diskreten Bewegungen der Pseudoteilchen kontinuierliche Bahnen zu erzeugen, muß über ein Ensemble der ZA gemittelt werden, daher gibt es eine mikroskopische Ebene der in einem dynamischen System verknüpften ZA und die makroskopische Ebene der Mittelwerte, der physikalischen Observablen.



**Abb. 3.1:** a) HPP-Gitter mit Teilchen einer Geschwindigkeit, die sich in vier Richtungen bewegen können, b) Streuregeln für den Fall, daß zwei Teilchen frontal aufeinanderprallen

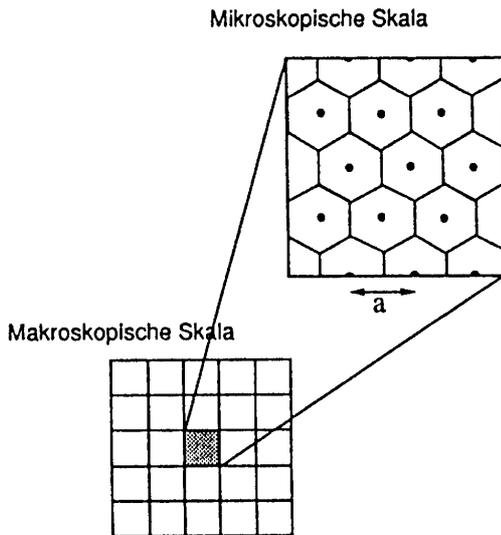
Da die Regeln in den ZA synchron angewendet werden können, ist der numerische Algorithmus der ZA in natürlicher Weise an parallele Rechnerarchitekturen angepaßt.

Obwohl die BOLTZMANN-Gleichung wegen des Streuintegrals im Impulsraum nichtlokal ist, kann diese in einen Satz von Gittergasgleichungen mit lokalen Regeln transformiert werden. Ein zentraler Punkt der Ableitung ist die Ersetzung der kinetischen Terme in der BOLTZMANN-Gleichung durch effektive Streuwahrscheinlichkeiten, welche die makroskopische Bewegungsgleichung im Ensemblemittelwert wiedergeben.

Diese Vorgehensweise ist invers zu der in anderen Bereichen, wie der Hydrodynamik, angewendeten Methodik, wo ein ZA mit den geeigneten Regeln definiert wird (s. Abb. 3.1) und man dann zeigt, daß in gewissen Limites bestimmte physikalische Differentialgleichungen erfüllt werden. Diese *Gittergasgleichungen* können als ZA mit folgenden Eigenschaften interpretiert werden:

1. Der ZA ist auf einem Gitter im Ortsraum definiert.
2. Jeder Zelle im Ortsraum ist eine endliche Zahl von Zuständen des Impulsraumes (BLOCH-Zustände) zugeordnet.
3. Die dynamischen Regeln des ZA sind probabilistisch.

Aus der Besetzung dieser Zustände lassen sich die Verteilungsfunktion und die physikalischen Observablen des Systems berechnen. Wichtig sind die



**Abb. 3.2:** Längenskalen in einem ZA am Beispiel eines zweidimensionalen hexagonalen Gitters

Übergänge der Ladungsträger zwischen den BLOCH-Zuständen in einer Zelle und ihre Translation zu benachbarten Zellen.

Für den Halbleiter hat die BOLTZMANN-Gleichung die oben beschriebene Gestalt. An die Stelle der Teilchengeschwindigkeit  $\vec{v}$  tritt als Variable der Impuls  $\vec{k}$ . Zur korrekten Behandlung der kohärenten Elektronenzustände (z. B. Tunnelprozesse) und der Vielteilchenwechselwirkungen ist eine Erweiterung der BOLTZMANN-Gleichung notwendig, siehe nächsten Abschnitt.

Die bisherigen Lösungsverfahren sind hauptsächlich die Relaxationszeitnäherung, das Drift-Diffusionsmodell oder das bekannte Monte-Carlo-Verfahren (siehe z. B. [5]). Die mathematische Herleitung der Gittergasgleichungen geschieht schrittweise. Im ersten Schritt ersetzt man die Ableitungen der Verteilungsfunktion  $f(\vec{x}, \vec{k}, t)$  durch finite Differenzen erster Ordnung in Zeit, Ort und Impuls. Man erhält dann:

$$f(\vec{x}, \vec{k}, t + \Delta t) = f(\vec{x}, \vec{k}, t) + \left| \frac{d\vec{x}}{dt} \right| \frac{\Delta_x f}{dt} \Delta t + \frac{d\vec{k}}{dt} \frac{\Delta_k f}{dt} \Delta t + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{St}},$$

wobei  $\Delta_x f = f(\vec{x} - \Delta\vec{x}, \vec{k}, t) - f(\vec{x}, \vec{k}, t)$ ,  $\Delta_k f = f(\vec{x}, \vec{k} - \Delta\vec{k}, t) - f(\vec{x}, \vec{k}, t)$  und  $(\partial f / \partial t)_{\text{St}}$  der Stoßterm ist. Im nächsten Schritt führt man ein Gitter im Orts- und Impulsraum der mit  $\vec{R}$  und  $\vec{K}$  gekennzeichneten Zellen ein, wobei die in der Zelle variierenden  $\vec{r} = \vec{x} - \vec{R}$  und  $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$ , entsprechend der angenommenen

Zellgeometrie – effektiv zweidimensional im Ortsraum, homogen in der dritten Dimension; der Impulsraum wird dreidimensional behandelt. Der folgende Schritt ist der Übergang von der Verteilungsfunktion  $f$  zu einer Teilchenzahl bzw. Besetzungszahl pro Zelle  $N(\vec{R}, \vec{K}, t)$ . Diese erhält man durch eine Integration über eine Phasenraumzelle  $(\vec{R}, \vec{K})$ , also durch die Ausführung der Mittelwertbildung über eine Phasenraumzelle (weitere zweckmäßige Näherungen eingeschlossen). Die vergrößerte BOLTZMANN-Gleichung (Übergang von der Mikro- zur Makroskala, siehe Abb. 3.2) hat folgende Bilanz:

$$N(\vec{R}, \vec{K}; t + \Delta t) = N(\vec{R}, \vec{K}; t) + \Delta N(\vec{R}, \vec{K}; t)_T + \Delta N(\vec{R}, \vec{K}; t)_F + \Delta N(\vec{R}, \vec{K}; t)_S.$$

Die vier Terme der rechten Seite der Bilanzgleichung entsprechen denen der o. g. Differenzgleichung. Die Indizes T und F stehen für die durch Translation und Feldeinfluß bestimmte Änderung der Verteilung. Der letzte Schritt in der Ableitung der Gittergasgleichungen ist die Diskretisierung der reellen Besetzungszahlen  $N$  (und der zugehörigen eingeführten Streuraten). Dazu definiert man ganzzahlige Phasenraumbesetzungen  $n$  und BOOLEsche Streuraten  $p = (0, 1)$ , so daß gemittelt über ein Ensemble von zellulären Automaten, d. h. über eine große Zahl von Zellen, die kontinuierlichen Größen reproduziert werden. Es ergeben sich schließlich die Gleichungen für das diskrete Gittergas:

$$\begin{aligned} n(\vec{R}, \vec{K}, t + \Delta t) &= n(\vec{R}, \vec{K}, t) \\ &+ \sum_{\vec{R}' = \vec{R}_{NN}} \left[ P_T(\vec{R}', \vec{R}, \vec{K}) n(\vec{R}', \vec{K}, t) P_T(\vec{R}, \vec{R}', \vec{K}) n(\vec{R}, \vec{K}, t) \right] \\ &+ \sum_{\vec{K}' \neq \vec{K}} \left[ \left( P_F(\vec{R}, \vec{K}', \vec{K}) + P_{qm}(\vec{R}, \vec{K}', \vec{K}) \right) n(\vec{R}, \vec{K}, t) \right. \\ &\left. + \left| P_F(\vec{R}, \vec{K}', \vec{K}) + P_{qm}(\vec{R}, \vec{K}', \vec{K}) \right| n(\vec{R}, \vec{K}, t) \right] \end{aligned}$$

$P_T$  und  $P_F$  sind die Übergangswahrscheinlichkeiten. Dieselben Überlegungen wie für den Ortsraum lassen sich für den Impulsraum durchführen. Der Satz von Gleichungen für die Besetzung der Phasenraumzellen bildet die Grundlage für die numerische Implementierung des Gittergases.

Ein wesentlicher Unterschied zwischen diesem Ergebnis und den üblichen finiten Differenzenverfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen ist die effektive Entkopplung von Orts- und Impulsraum, die durch die Ersetzung der kinetischen Terme in der BOLTZMANN-Gleichung in Streuwahrscheinlichkeiten erreicht wurde. Diese Gleichung hat dadurch die einfache Struktur einer Raten-gleichung, die lokal im Ortsraum ist und damit parallel auf allen Gitterzellen im Ortsraum gelöst werden kann. Nach dem die deterministischen Hüpfregeln

für die kinetischen Terme, die effektiven Feldregeln und die Regeln für die Streuprozesse (semiklassisch oder quantenmechanisch) abgeleitet worden sind, lautet der gesamte Algorithmus der Gittergasmethode in der Teilchendarstellung wie folgt:

### Initialisierung der Gittergasrechnung

1. Aufsetzen der Impuls- und Ortsraumgitter mit geeigneten Parametern  $(\Delta t, \Delta \vec{r}, \Delta \vec{k})$  und Generieren der Nächste-Nachbar-Tafeln.
2. Wahl der Anzahl von Teilchen, Zeitschritt und Geometrie im Ortsraum.
3. Wahl einer Makroskala zur Mittelung von Transportgrößen.
4. Zuordnung der Zellen zu einer Superzelle  $(\vec{K}, \vec{C})$ .
5. Aufstellen von Streutafeln  $P_{\text{coll}}^{\text{tot}}(\vec{C}), P_{\text{coll}}(\vec{C}, \vec{C}')$  der quantenmechanischen Streuprozesse des jeweiligen Materials.
6. Zuweisung der Teilchen gemäß einer thermischen Verteilung  $f(\vec{K})$  und Dichte  $\rho(\vec{R})$  auf die Zellen im Phasenraum  $(\vec{R}, \vec{K})$  und die Initialisierung der Zähler  $z(\vec{R}, \vec{K})$ .

### Durchführung der Rechnung

1. Zuordnung von  $\vec{K}$  nach  $\vec{C}$  für jedes Teilchen.
2. Streuung gemäß  $P_{\text{coll}}^{\text{tot}}(\vec{C})$ . Bei tatsächlicher Streuung zufällige Wahl von  $\vec{K}'$  aus  $\vec{C}'$  durch  $P_{\text{coll}}(\vec{C}, \vec{C}')$ .
3. Erhöhen des Zählers  $c(t_i + \Delta t) = c_k(t_i) = e\Delta t / |\eta(\vec{E}(\vec{R}, t_i))|$  im Impulsraum. Für  $c_k > 1$  Wahl des Endzustandes durch Nächste-Nachbar-Tafeln im  $\vec{k}$ -Raum gemäß der Feldrichtung und Setzen von  $c_k(t_i + \Delta t)$  auf  $c_k(t_i + \Delta t) - 1$ .
4. Erhöhen des Zählers  $c_\tau(t_i + \Delta t) = c_\tau(t_i) + \Delta t |\vec{v}(\vec{K})|$  im Ortsraum. Für  $c_\tau > 1$  Wahl eines Endzustandes  $\vec{R}$  gemäß Nächste-Nachbar-Tafeln im Ortsraum und Abbilden von  $c_\tau(t_i + \Delta t)$  auf  $1 - c_\tau(t_i + \Delta t)$ . Bei Reflexion  $c_\tau(t_i + \Delta t) = 0$  und Abbilden von  $c_\tau(t_i + \Delta t)$  auf  $1 - c_\tau(t_i + \Delta t)$ .
5. Wiederholen der Schritte 1–4.

Der Vergleich der Rechenzeiten nach der Methode der ZA mit denen der Monte-Carlo-Methode ergibt bis zu 40mal kürzere Rechenzeiten bei einem homogenen Transport mit 10000 Teilchen auf einer Cray YMP 8/8-128 Serial 1004/445.

### 3.4 Verallgemeinerungen: Quanten-BOLTZMANN-Gleichungen (Quantum kinetic theory)

Die „Quantum kinetic theory“ kann mit *kinetischen Gleichungen* (Bewegungsgleichungen, Evolutionsgleichungen) für Dichtematrizen, WIGNER-Funktionen nebst anderen Phasenraum-Quasiverteilungsfunktionen oder für thermodynamische GREEN-Funktionen aufgebaut werden.

Ausgangspunkt ist die quantenstatistische LIOUVILLE-Gleichung, die durch geeignete Erweiterungen, wie z. B. Stoßintegrale, zu den irreversiblen verallgemeinerten Quanten-BOLTZMANN-Gleichungen reformuliert werden kann. Eine Quanten-BOLTZMANN-Gleichung genügt für viele Zwecke, z. B. in weiten Gebieten der Halbleiter- oder Festkörperphysik, aber auch in der Kern- und Elementarteilchentheorie, wobei eventuell das Argument der Verteilungsfunktion  $f$  durch den Wellenzahlvektor zu ersetzen ist.

In der Quanten-BOLTZMANN-Gleichung sind drei Änderungen wesentlich:

1. Die lokal gültige Verteilung ist nicht die BOLTZMANN-, sondern die FERMI- oder die BOSE-Verteilung.
2. Die Einteilchen-Dynamik ändert sich nicht.
3. Ein neuer statistischer Effekt ist durch die Austausch-Wechselwirkung  $U$  der o. g. Teilchen bedingt.

Die geänderte Dynamik eines Quanten-Teilchens kann in erster Näherung durch die berühmte  $\hbar^2/24$ -Korrektur berücksichtigt werden. Die Quanten-BOLTZMANN-Gleichung hat dabei folgende Gestalt:

$$\partial f / \partial t + \vec{p} / m (\partial f / \partial \vec{r}) + \partial U / \partial \vec{r} (\partial f / \partial \vec{p}) + (\hbar^2 / 24) U [(\partial / \partial \vec{r})(\partial / \partial \vec{p})]^3 f = J(f).$$

Das Wirksamwerden der neuen Quantenstatistiken bedingt, daß im BOLTZMANNschen Stoßintegral die Zahl (oder Wahrscheinlichkeit) der Übergänge zwischen den Zuständen des betrachteten Teilchens nicht nur von der Besetzungswahrscheinlichkeit eines Anfangszustandes (vor dem Stoß) abhängt, sondern auch vom angestrebten Endzustand. Gemäß dem PAULI-Prinzip tritt dann im Stoßintegral neben dem Faktor  $f(\vec{k})$  der Faktor  $[1 - f(\vec{k}')]$  für den Übergang  $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$  auf. Die von ARNOLD SOMMERFELD in seiner Metalltheorie heuristisch ermittelte Quanten-BOLTZMANN-Gleichung sieht dann wie folgt aus:

$$\partial f / \partial t + \vec{p} / m (\partial f / \partial \vec{r}) + \vec{F} (\partial f / \partial \vec{p}) = \int d^3 \vec{p}' d^3 \vec{p}_1' J(f),$$

$$J(f) = W(\vec{k}, \vec{k}' | \vec{k}', \vec{k}_1) J_1(f),$$

$$J_1(f) = f(\vec{k}') [1 - f(\vec{k})] f(\vec{k}_1) [1 - f(\vec{k}_1)] - f(\vec{k}) [1 - f(\vec{k}')] f(\vec{k}_1) [1 - f(\vec{k}_1)].$$

Dies ist die UEHLING-UHLENBECK-Gleichung oder NORDHEIM-Gleichung. Für Bosonen ist der Faktor  $(1 - f)$  durch  $(1 + f)$  zu ersetzen. Die heuristisch gefundene Gleichung kann auch streng im Formalismus der zweiten Quantelung hergeleitet werden. Die Ähnlichkeit der Strukturen der BOLTZMANN- und der Quanten-BOLTZMANN-Gleichung erlaubt den Schluß, daß auch diese mit der Methode der zellulären Automaten zu lösen ist.

### 3.5 Dynamische Systeme und Statistische Mechanik zellulärer Automaten

Die Theorie dynamischer Systeme, die Chaostheorie und die Ergodentheorie sind heute ein zusammenhängender Komplex moderner Problemkreise, die von grundlegender Bedeutung für die Physik, die Naturwissenschaften und zahlreiche angewandte und technische Disziplinen sind. Die Anfänge liegen über 100 Jahre zurück und sind mit den Namen H. POINCARÉ (dynamische Systeme, Chaostheorie) und L. BOLTZMANN (Ergodentheorie) verbunden. Die Konzepte dynamischer Systeme sind sogar für die Statistische Physik insgesamt von Interesse, u. a. die Theorie stochastischer dynamischer Systeme und die Statistische Mechanik zellulärer Automaten und Automatenetzwerke. Stochastische lineare und nichtlineare dynamische Systeme spielen in der Physik, Chemie und Biologie sowie insbesondere in der Elektronik und der Meß-, Regelungs- und Steuerungstechnik eine besondere Rolle.

Diese Systeme werden durch stochastische Differentialgleichungen und stochastische Integrodifferentialgleichungen beschrieben. Die Konzeptionen der Statistischen Mechanik kommen zum Tragen, wenn stochastische zelluläre Automaten auftreten, deren Anfangsbedingungen stochastischer Natur sind oder die eine innere stochastische Dynamik zeigen oder internes Rauschen aufweisen.

Andererseits entwickeln bereits deterministische zelluläre Automaten oft (je nach Arbeitsregeln) sehr komplexe (räumliche) Strukturen, die mit den Methoden der statistischen Mechanik beschrieben werden können. Dabei ist im Gegensatz zu deterministischen Regeln eine stochastische Arbeitsregel mittels Wahrscheinlichkeiten fixiert, entweder mit einem vorangehenden Zeitschritt (MARKOV-Automat) oder mit mehreren vorausgehenden Zeitschritten (Nicht-MARKOV-Automat). Infolge der Wechselwirkungen zwischen den Zellen entstehen durch kooperative Effekte im Laufe der Zeit meist komplexe räumliche

Strukturen oder Muster (engl. *pattern*), die im Extremfall mit Selbstorganisation und Selbstreproduktion beschrieben werden können (siehe [1]).

## 3.6 Ausblick

Die vorhergehenden Erörterungen strukturieren den weiten Anwendungsbereich der zellulären Automaten. Die obengenannten Erfahrungen mit der Lösung kinetischer Gleichungen wie der BOLTZMANN-Gleichung und deren Verallgemeinerungen, z. B. der Quanten-BOLTZMANN-Gleichungen, sind damit nutzbringend verwendbar und unterstützen die breite Anwendbarkeit der Methode zellulärer Automaten. Wie im Einzelfall die Verknüpfung deterministischer und stochastischer zellulärer Automaten auszusehen hat, entscheidet wesentlich sowohl der Typ von Systembeschreibung als auch die Anwendungsziele der betrachteten Systeme. Viele dieser Systeme lassen sich aber als eine Gleichung vom BOLTZMANN-Typ beschreiben und die skizzierten schon gemachten Erfahrungen beim Lösen ähnlicher Gleichungen fruchtbringend nutzen.

## Literaturverzeichnis

- [1] G. Vojta; M. Vojta: *Teubner-Taschenbuch der statistischen Physik*. Stuttgart, Leipzig: B. G. Teubner, 2000
- [2] A. Rein: *Zelluläre Automaten in der Transporttheorie. Konzepte und Anwendungen*. Techn. Univ. München, Diss. 1995
- [3] M. Alonso; E. J. Finn: *Quantenphysik und Statistische Physik*. 3. Aufl. München, Wien: Oldenbourg, 1998
- [4] K. Binder; D. W. Heermann: *Monte Carlo simulation in statistical physics, an introduction*. 3. ed. Berlin: Springer, 1997
- [5] R. Haberlandt: *Molekulardynamik – Grundlagen und Anwendungen*. Braunschweig: Vieweg, 1995
- [6] J. Fritz; A. Jaffe; D. Szász: *Statistical physics and dynamical Systems: rigorous results*. Boston: Birkhäuser, 1985
- [7] G. Röpke: *Statistische Mechanik für das Nichtgleichgewicht*. Weinheim: Physik-Verlag, 1987