Ein einfaches statistisches Modell für Transportvorgänge mit beschränkter Ausbreitungsgeschwindigkeit. II.

J. U. KELLER

Institut für Theoretische Physik der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen

(Z. Naturforsch. 25 a, 1207—1212 [1970]; eingegangen am 2. Juni 1970)

In a paper [1] published recently a one-dimensional random walk-model for transport-processes with bounded velocity of propagation like heat conduction, diffusion and Brownian-motion has been given. Now this model is generalized to processes in 3 dimensions. We consider the transport process as a random-walk process in a primitive cubic lattice without boundaries and without external forces. The jump-probabilities of the random-walk-particle generally depend on the history of the particle. The resulting transport-equation contains terms which are due to the structure of the lattice not invariant under rotation. Furtheron this equation always describes transport-processes with bounded velocity of propagation.

Einleitung

Verfasser hat in einer vorhergehenden Arbeit [1] ein einfaches statistisches Modell für Transportprozesse mit beschränkter Ausbreitungsgeschwindigkeit wie Wärmeleitung, Diffusion und Brownsche Bewegung angegeben. Das Modell bestand aus einem eindimensionalen Irrflug-Prozeß, dessen Dynamik aber im Gegensatz zu den bisher in der Literatur verwendeten Prozessen [2, 3] nicht durch eine Markoff-Kette 1. Sufe, sondern durch eine Markoff-Kette 2. Stufe beschrieben wurde.

Dieser Umstand erlaubt es, die Trägheit der Irrflug-Teilchen (IT) zu berücksichtigen. Ferner ist ein physikalisch plausibler Grenzübergang vom diskreten Modell zum Kontinuum angegeben worden, bei welchem die bei dem bisher in der Literatur verwendeten „Einstein-Smoluchowski-Limit" auftretenden Schwierigkeiten [1] vermieden werden. Die aus dem in [1] angegebenen Grenzprozeß vom diskreten System zum Kontinuum resultierende Transportgleichung hat die Struktur der Telegraphengleichung, beschreibt also im Gegensatz zu den bisher verwendeten Gleichungen von Fourier, Fick und Fokker-Planck [1] stets Transportprozesse mit *beschränkter* Ausbreitungsgeschwindigkeit. In der vorliegenden Arbeit wird das in [1] angegebene Modell auf den Fall eines 3-dimensionalen Prozesses verallgemeinert. Der Transport-Prozeß wird als Irrflug-Prozeß [1–3] eines oder vieler sich voneinander unabhängig in einem unbeschränkten kubisch primitiven Gitter bewegenden Teilchen angesehen. Wir nehmen an, daß auf die IT keine äußeren Kräfte wirken.

Das einzelne IT kann mit dem Brownschen Teilchen, einem diffundierenden Teilchen oder der mittleren bei einem Stoß zwischen 2 Teilchen übertragenen kinetischen Energie identifiziert werden, je nachdem man den Irrflug-Prozeß als Modell für Brownsche Bewegung, Diffusion oder Wärmeleitung ansieht.

Die Dynamik des Prozesses wird durch eine Markoff-Kette 2. Stufe beschrieben [4, 5]. Die Sprungwahrscheinlichkeiten des IT hängen also im allgemeinen noch von seiner *Vorgeschichte* ab.

Beispiele für physikalische Prozesse, welche sich durch ein Irrflug-Modell beschreiben lassen und bei denen die Vorgeschichte des IT berücksichtigt werden muß, sind: Die Diffusion von Frenkel-Paaren oder von Clustern von Zwischengitter-Atomen und Fehlstellen im Festkörper. Die Brownsche Bewegung eines Moleküls mit innerer Struktur in Flüssigkeiten, z. B. Polyvinylpyrolidon in Wasser [6]. Wärmeleitung in Stoffen, deren Moleküle viele innere Freiheitsgrade besitzen, z. B. Hochpolymere.

Irrflug-Prozesse der 2. Markoff-Stufe

Wir führen zunächst gewisse Bezeichnungen ein und geben einige allgemeine Beziehungen an:

$$a > 0 \ldots \text{Gitterkonstante,}$$

Sonderdruckanforderungen an Dr. J. U. KELLER, Institut für Theoret. Physik der Technischen Hochschule Aachen, *D-5100 Aachen*, Templergraben 55.

[1] J. U. KELLER, Z. Naturforsch. **25 a**, *000* [1970]; voranstehende Arbeit.
[2] S. CHANDRASEKHAR, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 [1943].
[3] M. KAC, in: Selected Papers on Noise and Stochastic Processes, N. WAX (Ed.), Dover, New York 1954, S. 295.
[4] J. L. DOOB, Stochastic Processes, J. Wiley & Sons, New York 1953, S, 171, 185 ff.
[5] J. KELLER, Z. Physik **204**, 47 [1967]; **210**, 142 [1968].
[6] J. KELLER, Ann. Phys., 7. Folge, **24**, 47 [1969].

$a\,\boldsymbol{n} = a(n_1, n_2, n_3)$, $(n_i = 0,\ \pm 1,\ \pm 2, \ldots,\ i = 1, 2, 3)$
... Ortsvektor eines allgemeinen Gitterpunktes,

e_α, $(\alpha = 1, 2, 3)$ ... Einheitsvektoren des Gitters,

$N\tau \quad (N = 0, 1, 2, \ldots,\ \tau > 0)$

... Zeitpunkte der einzelnen Sprünge des IT.

$p\begin{pmatrix} \boldsymbol{m} & \boldsymbol{n} \\ M & N \end{pmatrix}$

... m_α, $n_\alpha = 0,\ \pm 1,\ \pm 2 \ldots,\ \alpha = 1, 2, 3;\ M, N = 0, 1, 2, \ldots$ Simultane Wahrscheinlichkeit (SW) dafür, daß sich das IT sowohl zur Zeit $M\tau$ im Gitterpunkt $a\,\boldsymbol{m}$ als auch zur Zeit $N\tau$ im Gitterpunkt $a\,\boldsymbol{n}$ befindet.

$p\begin{pmatrix} (a/\tau)\ k\,e_\alpha \\ N+\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

... $\alpha = 1, 2, 3;\ \ k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ Wahrscheinlichkeit dafür, daß das IT zur Zeit $(N+\frac{1}{2})\,\tau$ die Geschwindigkeit $\big((a/\tau)\ k\big)\ e_\alpha$ besitzt.

$p\left(\begin{matrix} \boldsymbol{m} & \boldsymbol{n} \\ M & N \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} \boldsymbol{O} \\ 0 \end{matrix}\right)$

... Bedingte Wahrscheinlichkeit (BW) dafür, daß sich das IT zur Zeit $O\tau$ im Gitterpunkt $a\,\boldsymbol{o}$ befindet, wenn es sich zur Zeit $M\tau$ im Gitterpunkt $a\,\boldsymbol{m}$ und zur Zeit $N\tau$ im Gitterpunkt $a\,\boldsymbol{n}$ befunden hat.

$p\left(\begin{matrix} (a/\tau)\ k\,e_\alpha \\ N-\frac{1}{2} \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} (a/\tau)\ l\,e_\beta \\ N+\frac{1}{2} \end{matrix}\right)$

... BW dafür, daß das IT zur Zeit $(N+\frac{1}{2})\,\tau$ die Geschwindigkeit $(a/\tau)\ l\,e_\beta$ besitzt, wenn es zur Zeit $(N-\frac{1}{2})\,\tau$ die Geschwindigkeit $(a/\tau)\ k\,e_\alpha$ $(\alpha, \beta = 1, 2, 3)$ gehabt hat.

Normierungen:

$$\sum_{\boldsymbol{m},\boldsymbol{n}} p\begin{pmatrix} \boldsymbol{m} & \boldsymbol{n} \\ M & N \end{pmatrix} = 1 \quad \ldots \text{ alle } M, N, \tag{1 a}$$

$$\sum_{\boldsymbol{o}} p\left(\begin{matrix} \boldsymbol{m} & \boldsymbol{n} \\ M & N \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} \boldsymbol{o} \\ O \end{matrix}\right) = 1 \quad \ldots \text{ alle } M, N, O.\ \boldsymbol{m}, \boldsymbol{n}. \tag{1 b}$$

Diskretes Analogon zum Wahrscheinlichkeitsstrom am Ort $a\,\boldsymbol{n}$ zur Zeit $N\tau$:

$$j_\alpha\begin{pmatrix} \boldsymbol{n} \\ N \end{pmatrix} = \frac{a}{2\tau}\left[\pi_{a\alpha}\begin{pmatrix} \boldsymbol{n} \\ N \end{pmatrix} + \pi_{r\alpha}\begin{pmatrix} \boldsymbol{n} \\ N \end{pmatrix}\right], \tag{2}$$

$$\pi_{a\alpha} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} m\, p\begin{pmatrix} \boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}+m\,e_\alpha \\ N & N+1 \end{pmatrix}, \tag{3 a}$$

$$\pi_{r\alpha} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} m\, p\begin{pmatrix} \boldsymbol{n}+m\,e_\alpha & \boldsymbol{n} \\ N-1 & N \end{pmatrix}. \tag{3 b}$$

Ein über einem diskreten vektorwertigen Ortsparameter und skalarem Zeitparameter definierter stochastischer Prozeß heißt Markoff-Kette s. Stufe, wenn für alle höheren bedingten Wahrscheinlichkeiten $(r \geqq s)$ gilt:

$$p\left(\begin{matrix} \boldsymbol{n}_r & \ldots & \boldsymbol{n}_1 \\ N-r & & N-1 \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} \boldsymbol{n}_0 \\ N \end{matrix}\right) = p\left(\begin{matrix} \boldsymbol{n}_s & \ldots & \boldsymbol{n}_1 \\ N-s & & N-1 \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} \boldsymbol{n} \\ N \end{matrix}\right) \tag{4}$$

alle $\boldsymbol{n}_i$; $i = 0, \ldots, r$; $s = 0, 1, 2, \ldots,$
$N, r = 0, 1, 2, \ldots, r \leqq N.$

Der Satz von der totalen Wahrscheinlichkeit [7] lautet für Markoff-Ketten 2. Stufe

$$p\begin{pmatrix} \boldsymbol{n} & \boldsymbol{m} \\ N & N+1 \end{pmatrix} = \sum_{\boldsymbol{e}} p\begin{pmatrix} \boldsymbol{e} & \boldsymbol{n} \\ N-1 & N \end{pmatrix} p\left(\begin{matrix} \boldsymbol{e} & \boldsymbol{n} \\ N-1 & N \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} \boldsymbol{m} \\ N+1 \end{matrix}\right). \tag{5}$$

Kennt man die BW der Markoff-Kette (z. B. aus einem quantenmechanischen Modell oder durch Beobachtung), so lassen sich bei gegebener Anfangsverteilung $p\begin{pmatrix} \boldsymbol{n} & \boldsymbol{m} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ aus (5) die SW zu beliebigen späteren Zeitpunkten berechnen. Wir betrachten nun einen Irrflug-Prozeß der 2. Markoff-Stufe in einem unbeschränkten kubisch primitiven Gitter. Der Prozeß sei homogen in Ort und Zeit. Wir nehmen an, daß auf das IT keine äußeren Kräfte wirken, daß es ferner nur Einzelsprünge, keine Multisprünge ausführen kann und daß es schließlich keine Möglichkeit besitzt, an einem Ort zu verweilen. Für die BW kann dann im Hinblick auf (1 b) folgender Ansatz gemacht werden:

$$p\left(\begin{matrix} \boldsymbol{n}-\boldsymbol{i}-\boldsymbol{j} & \boldsymbol{n}-\boldsymbol{i} \\ N-2 & N-1 \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} \boldsymbol{n} \\ N \end{matrix}\right) = \begin{cases} \frac{1}{2}+s-2w & \ldots\ \boldsymbol{i} = \boldsymbol{j} = \pm e_\alpha \\ \frac{1}{2}-s-2w & \ldots\ \boldsymbol{i} = -\boldsymbol{j} = \pm e_\alpha \\ w & \ldots\ \boldsymbol{i} = \pm e_\alpha,\ \boldsymbol{j} = \pm e_\beta, \\ 0 \ldots \text{sonst}, & \alpha \neq \beta;\ \alpha, \beta = 1, 2, 3. \end{cases} \tag{6}$$

Die Dynamik der Kette wird durch 2 Parameter s, w vollständig bestimmt. Diese Parameter können noch von a, τ, aber nicht mehr von $\boldsymbol{n}$ oder N abhängen. Es gelten die Ungleichungen

$$0 \leqq w \leqq \tfrac{1}{4} \tag{7 a}$$

$$2w + |s| \leqq \tfrac{1}{2} \tag{7 b}$$

Ist $s = 0$, so geht die Kette 2. Stufe in eine Markoff-Kette 1. Stufe über. Ist $w = 0$, so kann sich das IT nur längs einer einzigen Gittergeraden bewegen.

Die Erwartungswerte der Lagekoordinate, des Quadrates der Lagekoordinate, der Geschwindigkeit, der Beschleunigung, des Drehwinkels der Projektion

[7] W. Feller, An Introduction to Probability Theory and its Application, 3-rd Ed., J. Wiley & Sons, New York 1952, S. 20. — A. Papoulis, Probability, Random Variables, and Stochastic Processes, McGraw-Hill, New York 1965, S. 37.

der Bahn des IT in Richtung der γ-Achse und die Streuung des IT sind definiert durch:

$$E_\alpha(N) = a \sum_{\boldsymbol{n}} n_\alpha\, p\binom{\boldsymbol{n}}{N}, \tag{8 a}$$

$$D_\alpha(N) = a^2 \sum_{\boldsymbol{n}} n_\alpha^2\, p\binom{\boldsymbol{n}}{N}, \tag{8 b}$$

$$E_{v\alpha}(N) = \frac{a}{\tau} \sum_{\boldsymbol{n},m} m\, p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}+m\, e_\alpha\\ N & N+1\end{pmatrix} \tag{8 c}$$

$$E_{b\alpha}(N) = \frac{a}{\tau^2} \sum_{\boldsymbol{n},m,o} (o-m)\, p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}+m\, e_\alpha & \boldsymbol{n}+(m+o)\, e_\alpha\\ N & N+1 & N+2\end{pmatrix} \tag{8 d}$$

$$E_{\varphi\gamma}(N) = \sum_{\boldsymbol{n}} \sum_{\alpha \neq \beta} \varphi(\alpha,\beta)\, p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}+e_\alpha & \boldsymbol{n}+e_\alpha+e_\beta\\ N & N+1 & N+2\end{pmatrix} \tag{8 e}$$

$$S_\alpha(N) = D_\alpha(N) - E_\alpha^2(N), \tag{8 f}$$

$$\sigma_\alpha(N) = \frac{1}{\tau}\left(S_\alpha(N+1) - S_\alpha(N)\right), \tag{8 g}$$

$\varphi(\alpha,\beta)$ ... Winkel zwischen den α, β-Achsen.

Die asymptotischen Werte ($N \to \infty$) fast aller dieser Größen sind von der Anfangsverteilung im Gitter unabhängig und lassen sich als Funktionen von a, τ, s, w leicht berechnen:

$$\lim_{N\to\infty} E_x(N) = \begin{cases} 0 & \ldots\ x = \alpha \\ 0 & \ldots\ x = v_\alpha \\ \dfrac{a^2}{3\,\tau} & \ldots\ \lvert v_\alpha \rvert \\ 0 & \ldots\ x = b_\alpha \\ \dfrac{a}{3\,\tau^2}\,[1-2(s+2\,w)] & \ldots\ x = \lvert b_\alpha \rvert \\ 0 & \ldots\ x = \gamma \\ \dfrac{2\,\pi\, w}{3\,\tau} & \ldots\ x = \lvert \gamma \rvert, \end{cases} \tag{9}$$

$$\lim_{N\to\infty} \sigma_\alpha(N) = \frac{1+2\,s}{1-2\,s}\,\frac{a^2}{3\,\tau}. \tag{10}$$

Zur Auswertung von (5) mit (6) führen wir folgende Größen als neue Unbekannte ein:

a)
$$p\binom{\boldsymbol{n}}{N} = \sum_{\gamma=-3}^{3} p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n}+e_\gamma & \boldsymbol{n}\\ N-1 & N\end{pmatrix}, \tag{11 a}$$

$$\pi_{r\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N} = p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n}-e_\alpha & \boldsymbol{n}\\ N-1 & N\end{pmatrix} - p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n}+e_\alpha & \boldsymbol{n}\\ N-1 & N\end{pmatrix}, \tag{11 b}$$

$$\begin{aligned} p_{r\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N} &= p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n}+e_\alpha & \boldsymbol{n}\\ N-1 & N\end{pmatrix} + p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n}-e_\alpha & \boldsymbol{n}\\ N-1 & N\end{pmatrix} \\ &\quad - p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n}+e_{\alpha+1} & \boldsymbol{n}\\ N-1 & N\end{pmatrix} - p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n}-e_{\alpha+1} & \boldsymbol{n}\\ N-1 & N\end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{11 c}$$

$\alpha = 1, 2, 3 \pmod 3$,

$\sum_\alpha p_{r\alpha} = 0, \quad e_{-\gamma} = -e_\gamma.$

Umgekehrt gilt

$$p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n}\pm e_\alpha & \boldsymbol{n}\\ N-1 & N\end{pmatrix} = \frac{1}{6}\left[p\binom{\boldsymbol{n}}{N} + p_{r\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N} - p_{r\alpha+2}\binom{\boldsymbol{n}}{N}\right] \mp \tfrac{1}{2}\,\pi_{r\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N}. \tag{11 a}$$

b)
$$p\binom{\boldsymbol{n}}{N} = \sum_{\gamma=-3}^{3} p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}+e_\gamma\\ N & N+1\end{pmatrix} \tag{12 a}$$

$$\pi_{a\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N} = p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}+e_\alpha\\ N & N+1\end{pmatrix} - p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}-e_\alpha\\ N & N+1\end{pmatrix} \tag{12 b}$$

$$\begin{aligned} p_{a\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N} &= p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}+e_\alpha\\ N & N+1\end{pmatrix} + p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}-e_\alpha\\ N & N+1\end{pmatrix} \\ &\quad - p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}+e_{\alpha+1}\\ N & N+1\end{pmatrix} - p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}-e_{\alpha+1}\\ N & N+1\end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{12 c}$$

$\sum_{\alpha=1}^{3} p_{a\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, 2, 3 \pmod 3.$

Umgekehrt gilt

$$p\begin{pmatrix}\boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}\pm e_\alpha\\ N & N+1\end{pmatrix} = \frac{1}{6}\left[p\binom{\boldsymbol{n}}{N} + p_{a\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N} - p_{a\alpha+2}\binom{\boldsymbol{n}}{N}\right] \pm \tfrac{1}{2}\,\pi_{a\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N}. \tag{12 a}$$

Zur Ableitung einer Transportgleichung für $p\binom{\boldsymbol{n}}{N}$ allein würde es natürlich genügen, nur eine der beiden Variablengruppen (11) oder (12) zu verwenden. Wir wollen aber auch eine Gleichung für den Wahrscheinlichkeitsstrom j_α aufstellen. Dazu ist gemäß (2), (3) die Auswertung von (5) mit beiden Variablengruppen (11) und (12) erforderlich. Als Vorbereitung für den Grenzübergang zum Kontinuum führen wir folgende Bezeichnungen ein:

$$a = \Delta x, \qquad \tau = \Delta t,$$

$$a\, n_\alpha = x_\alpha, \quad N\,\tau = t,$$

$$\pi_{i\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N} \to \pi_{i\alpha}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x} & \Delta x\\ t & \Delta t\end{pmatrix}, \quad i = a, r; \quad \alpha = 1, 2, 3;$$

$$p_{i\alpha}\binom{\boldsymbol{n}}{N} \to p_{i\alpha}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x} & \Delta x\\ t & \Delta t\end{pmatrix}, \qquad p\binom{\boldsymbol{n}}{N} \to p\binom{\boldsymbol{x}}{t} \tag{13}$$

$$z(a,\tau) \to z(\Delta x, \Delta t), \quad z = s, w,$$

$$O\left((\Delta x)^n\right) = O_x^n, \quad O\left((\Delta t)^n\right) = O_t^n.$$

Die Parameter s, w mögen nach Δx, Δt entwickelbar sein:

$$\begin{aligned} s\left(\Delta x, \Delta t(\Delta x)\right) &= \sigma_0 + \sigma_1\,\Delta x + O_x^2, \\ w\left(\Delta x, \Delta t(\Delta x)\right) &= w_0 + w_1\,\Delta x + O_x^2. \end{aligned} \tag{14}$$

Nach (7) gilt

$$0 \leqq w_0 \leqq \tfrac{1}{4}, \tag{15 a}$$

$$2\,w_0 + \lvert \sigma_0 \rvert \leqq \tfrac{1}{2}. \tag{15 b}$$

Aus (5) folgen mit (6), (11), (12), (13) folgende Gleichungen:

$$\partial_t\, p\binom{\boldsymbol{x}}{t} \Delta t + O_t^2 = -2\,s \sum_{\gamma=1}^{3} \partial_\gamma\, \pi_{r\gamma}\,\Delta x + \tfrac{1}{6}\left[\Delta p + (1-6\,w) \sum_\gamma \partial_\gamma^2 (p_{r\gamma} - p_{r\gamma+2})\right](\Delta x)^2 + O_x^3 \tag{16 a}$$

$$\pi_{r a}\binom{\boldsymbol{x}}{t}+\partial_{t} \pi_{r a} \Delta t+O_{t}^{2}=2 s \pi_{r a}-\tfrac{1}{3}\left[\partial_{a} p+(1-6 w) \partial_{a}\left(p_{r a}-p_{r a+2}\right)\right] \Delta x+s \partial_{a}{ }^{2} \pi_{r a}(\Delta x)^{2}+O_{x}^{3}, \tag{16b}$$

$$\begin{aligned}\partial_{t} p_{r a}\binom{\boldsymbol{x}}{t} \Delta t+O_{t}^{2}= & -6 w p_{r a}-2 s\left(\partial_{a} \pi_{r a}-\partial_{a+1} \pi_{r a+1}\right) \Delta x+\tfrac{1}{6}\left[\left(\partial_{\alpha}^{2}-\partial_{\alpha+1}^{2}\right) p+(1-6 w)\left(\partial_{a}{ }^{2}\left(p_{r a}-p_{r a+2}\right)\right.\right. \\ & \left.\left.+\partial_{\alpha+1}^{2}\left(p_{r a}-p_{r a+1}\right)\right)\right](\Delta x)^{2}+O_{x}^{3},\end{aligned} \tag{16c}$$

bzw.

$$\partial_{t} p\binom{\boldsymbol{x}}{t} \Delta t+O_{t}^{2}=-\sum_{\gamma=1}^{3} \partial_{\gamma} \pi_{a \gamma} \Delta x+\tfrac{1}{6}\left[\Delta p+\sum_{\gamma=1}^{3} \partial_{\gamma}{ }^{2}\left(p_{a \gamma}-p_{a \gamma+2}\right)\right](\Delta x)^{2}+O_{x}^{3}, \tag{17a}$$

$$\pi_{a a}\binom{\boldsymbol{x}}{t}+\partial_{t} \pi_{a a} \Delta t+O_{t}^{2}=2 s \pi_{a a}-s\left[\partial_{a} p+\partial_{a}\left(p_{a a}-p_{a a+2}\right)\right] \Delta x+\frac{1}{2} s \partial_{a}{ }^{2} \pi_{a a}(\Delta x)^{2}+O_{x}^{3}, \tag{17b}$$

$$\begin{aligned}\partial_{t} p_{a a} \Delta t+O_{t}^{2}= & -6 w p_{a a}+\left(-\tfrac{2}{3}+4 w\right)\left(\partial_{a} \pi_{a a}-\partial_{a+1} \pi_{a a+1}\right) \Delta x \\ & +\left(\tfrac{1}{6}-w\right)\left[\left(\partial_{2}^{\alpha}-\partial_{\alpha+1}^{2}\right) p+\partial_{\alpha}^{2}\left(p_{a a}-p_{a a+2}\right)+\partial_{\alpha+1}^{2}\left(p_{a a}-p_{a a+1}\right)\right](\Delta x)^{2}+O_{x}^{3} .\end{aligned} \tag{17c}$$

In (16), (17) hängen die Parameter π_{ia}, p_{ia} $(i=a, r)$ sowie s, w noch von Δx, Δt ab.

Der Grenzübergang zum Kontinuum $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ wird nun unter folgenden Voraussetzungen durchgeführt:

1. Wir setzen $$\Delta x=c\, \Delta t, \tag{18}$$

wo $c>0$ eine Konstante ist. Diese Bedingung garantiert, daß die Geschwindigkeit, mit welcher das IT im kontinuierlichen Grenzfall seine Zitterbewegung ausführt, endlich ist. Gerade diese physikalisch plausible Bedingung wird im „Einstein-Smoluchowski-Limit" verletzt[1].

2. Die Grenzwerte

$$\pi_{ia}\binom{\boldsymbol{x}}{t}=\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \pi_{ia}\left(\begin{array}{l}\boldsymbol{x} \\ t\end{array}, \begin{array}{l}\Delta x \\ \Delta t\end{array}\right), \quad i=a, r, \tag{19a}$$

$$p_{ia}\binom{\boldsymbol{x}}{t}=\lim_{\Delta t \rightarrow 0} p_{ia}\left(\begin{array}{l}\boldsymbol{x} \\ t\end{array}, \begin{array}{l}\Delta x \\ \Delta t\end{array}\right), \quad a=1,2,3, \tag{19b}$$

sollen gleichmäßig für alle $\boldsymbol{x}$ und t existieren und in diesen Variablen in Taylor-Reihen entwickelbar sein. Diese Forderungen sind zusammen mit (18) notwendig und hinreichend dafür, daß im kontinuierlichen Grenzfall an jedem Ort $\boldsymbol{x}$ und zu jeder Zeit $t \geqq 0$ ein eindeutiger gewöhnlicher und ein eindeutiger „absoluter" Wahrscheinlichkeitsstrom (bzw. Diffusions- oder Wärmestrom) existiert. Unter dem „absoluten" Diffusionsstrom am Ort $\boldsymbol{x}$ und zur Zeit t in Richtung der α-Achse verstehen wir dabei z. B. die Summen der *Beträge* der Geschwindigkeitskomponenten in Richtung der α-Achse aller Teilchen welche pro Sekunde durch die Einheitsfläche normal zur α-Achse am Ort $\boldsymbol{x}$ zur Zeit t hindurchtreten. In analoger Weise lassen sich ein „absoluter" Wahrscheinlichkeits- bzw. Wärmestrom definieren.

Die Größen $p_{ia}\binom{\boldsymbol{x}}{t}$ geben die Differenz zwischen den absoluten Wahrscheinlichkeitsströmen in Richtung der α- und der $(\alpha+1)$-Achse an. Ist $p_{ia}=0$ $(\alpha=1, 2, 3)$, so ist der absolute Wahrscheinlichkeitsstrom isotrop.

3. Wir setzen in (14)

$$\sigma_{0}=\tfrac{1}{2} \tag{20}$$

Aus (7) folgt mit der Bezeichnung $\hat{\sigma}_{1}=-\sigma_{1}$

$$w_{0}=0 \tag{21}$$

$$0 \leqq 2 w_{1} \leqq \hat{\sigma}_{1} . \tag{22}$$

Wir setzen zunächst voraus, daß $w_{1} \neq 0$ ist. Die Bedeutung der Forderung (20) kann mit Hilfe der differentiellen bedingten Wahrscheinlichkeiten dafür, daß das IT im Zeitintervall $(t, t+\Delta t)$ seine Geschwindigkeit beibehält bzw. umkehrt oder um $\pm \pi/2$ dreht, geklärt werden. Aus (6), (14), (18), (20), (21) folgt

$$p\left(\begin{array}{l}\pm c\, e_{a} \\ t\end{array} \middle| \begin{array}{l}\pm c\, e_{\beta} \\ t+\Delta t\end{array}\right)=\left\{\begin{array}{ll}1-\left(\hat{\sigma}_{1}+2 w_{1}\right) c\, \Delta t+O_{t}^{2} \ldots & \alpha=\beta \\ & \pm\ \pm \\ \left(\hat{\sigma}_{1}-2 w_{1}\right) c\, \Delta t+O_{t}^{2} \ldots & \alpha=\beta \\ & \pm\ \mp \\ w_{1} c\, \Delta t+O_{t}^{2} \ldots & \alpha \neq \beta \\ & \alpha, \beta=1,2,3 .\end{array}\right. \tag{23}$$

Das IT behält also fast immer (d. h. mit Wahrscheinlichkeit 1) seine Geschwindigkeit bei und wechselt die Richtung seiner Bewegung fast nie (d. h. mit Wahrscheinlichkeit 0). Wenn (20) nicht gilt, ändert das IT im kontinuierlichen Grenzfall die Richtung seiner Geschwindigkeit in jedem beliebig kleinen Zeitintervall mit Wahrscheinlichkeit 1 beliebig oft. Makroskopisch gesehen bleibt das IT dann wegen (18) an ein und derselben Stelle. Der Irrflug-Prozeß ist in diesem Fall eingefroren. Die Bedingungen (18) und (20) garantieren gerade, daß das IT mit endlicher Geschwindigkeit im Kontinuum diffundiert.

Die Bahnkurve des IT ist eine überall stetige und fast überall differenzierbare „Kurve“, welche in einem endlichen Stück eine endliche Anzahl von Ecken und Spitzen besitzt. Aus (23) ergibt sich die mittlere Anzahl n_e bzw. n_s von Ecken bzw. Spitzen pro Längeneinheit der Bahn zu

$$n_e = 4\, w_1\,, \qquad n_s = \hat{\sigma}_1 - 2\, w_1\,.$$

Führt man den Grenzprozeß $\Delta x \to 0$, $\Delta t \to 0$ unter Beachtung von (14) mit (18), (20) in (9) und (10) durch, so erhält man:

$$\lim_{\Delta t \to 0} \lim_{N \to \infty} E_x(N) = \begin{cases} c/3 & \ldots x = |v_a|\,, \\ \frac{2}{3}(\hat{\sigma}_1 - 2\, w_1)\, c^2 & \ldots x = |b_a|\,, \\ \frac{2\pi}{3}\, c\, w_1 & \ldots x = |\gamma|\,, \end{cases} \tag{25}$$

$$\lim_{N \to \infty} \lim_{\Delta t \to 0} \sigma_a(N) = \frac{c}{3\, \hat{\sigma}_1}\,. \tag{26}$$

Es läßt sich zeigen, daß der durch (18), (20) präzisierte Grenzprozeß $\Delta x \to 0$, $\Delta t \to 0$ der einzige ist, bei welchem alle Ausdrücke in (9) und (10) konvergieren. Dies folgt unter Verwendung von (14) aus der Struktur der in (9), (10) auftretenden Terme.

Aus (16) bzw. (17) folgen mit (18), (19), (20) im Limes $\Delta t \to 0$, $\Delta x \to 0$ die Gleichungen

$$\partial_t\, p \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} = -c \sum_1^3 \partial_\gamma\, \pi_{i\gamma}\,, \tag{27 a}$$

$$\partial_t\, \pi_{ia} \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} = -\frac{c}{3}\, \partial_a (p + p_{ia} - p_{ia+2}) - 2\, \hat{\sigma}_1\, c\, \pi_{ia}\,, \tag{27 b}$$

$$\partial_t\, p_{ia} \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} = -c\, (\partial_a\, \pi_{ia} - \partial_{a+1}\, \pi_{ia+1}) - 6\, c\, w_1\, p_{ia}\,, \quad i = a\, r;\ a = 1, 2, 3 \ (\mathrm{mod}\ 3)\,. \tag{27 c}$$

Abkürzungen

$$\tau = 1/2\, c\, \hat{\sigma}_1\,, \qquad \tau' = 1/6\, c\, w_1\,, \quad D_0 = c/2\, \hat{\sigma}_1\,, \tag{28}$$

$$p_a = \tfrac{1}{2}\, (p_{aa} + p_{ra})\,, \qquad j_a = \frac{c}{2}\, (\pi_{aa} + \pi_{ra})\,. \tag{29}$$

Aus (22) folgt

$$0 \leqq \tau \leqq \frac{3}{2}\, \tau'\,. \tag{30}$$

Addiert man die jeweiligen sich für $i = a$ bzw. $i = r$ ergebenden Gln. (27), so folgt mit (28), (29):

$$\partial_t\, p + \sum \partial_a\, j_a = 0\,, \tag{31}$$

$$\tau\, \partial_t\, j_a + j_a = -\frac{D_0}{3}\, \partial_a (p + p_a - p_{a+2})\,, \quad a = 1, 2, 3 \ (\mathrm{mod}\ 3)\,, \tag{32}$$

$$\tau'\, \partial_t\, p_a + p_a = -\tau' (\partial_a\, j_a - \partial_{a+1}\, j_{a+1})\,. \tag{33}$$

Die Beziehung (31) ist der Erhaltungssatz für die Wahrscheinlichkeit bzw. Teilchenzahl oder Wärmemenge. Die Gl. (32) kann als verallgemeinertes 1. Ficksches Gesetz bzw. Fourier-Gesetz angesehen werden. Außer dem durch die 2. Markoff-Stufe bedingten Trägheitsterm auf der linken Seite treten noch die Gradienten der Anisotropieparameter p_a auf. Diese Glieder verschwinden gemäß (33), wenn die Gitterstruktur für den betrachteten Transport-Prozeß keine Rolle spielt. Das heißt wenn die Anzahl der Ecken pro Längeneinheit der Bahn des IT über alle Schranken wächst. Die Gl. (33) verknüpft die Anisotropie-Parameter p_a mit den Gradienten des gewöhnlichen Wahrscheinlichkeisstromes. Aus (31), (32) bzw. (32), (33) folgen die Gleichungen

$$\tau\, \partial_t^2\, p + \partial_t\, p = \frac{D_0}{3}\, [\Delta p + \sum_a^3 \partial_a^2 (p_a - p_{a+2})]\,, \tag{34}$$

$$(\tau\, \partial_t + 1)\, (\tau'\, \partial_t + 1)\, p_a = \frac{D_0}{3}\, \tau' [(\partial_a^2 - \partial_{a+1}^2)\, p + \partial_a^2 (p_a - p_{a+2}) - \partial_{a+1}^2\, (p_{a+1} - p_a)]\,, \quad a = 1, 2, 3 \ (\mathrm{mod}\ 3)\,. \tag{35}$$

Diese Gleichungen beschreiben einen Transportprozeß mit beschränkter Ausbreitungsgeschwindigkeit c. Dies folgt am einfachsten aus der Dispersions-Relation des Systems. Die Parameter p_a können mit Hilfe einer Fourier-Laplace-Transformation von (34), (35) leicht eliminiert werden. Es gilt

$$\begin{aligned} \tau\, \partial_t^2\, p \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} + \partial_t\, p = {} & D_0\, \Delta p - \frac{2}{3}\, \frac{D_0}{\tau'}\, \Delta \int_0^t \mathrm{d}s\, e^{-s/\tau'}\, p \begin{pmatrix} x \\ t-s \end{pmatrix} \\ & + \tfrac{2}{3}\, D_0^2\, \tau' (\partial_1^4 + \partial_2^4 + \partial_3^4 - \partial_1^2\, \partial_2^2 - \partial_2^2\, \partial_3^2 \\ & - \partial_3^2\, \partial_1^2) \int_0^t \mathrm{d}s\, \frac{e^{-s/\tau} - e^{-s/\tau'}}{\tau - \tau'}\, p \begin{pmatrix} x \\ t-s \end{pmatrix} + \frac{D_0^2}{3}\, \tau'^2 (\partial_1^2\, \partial_2^2 \\ & + \partial_2^2\, \partial_3^2 + \partial_3^2\, \partial_1^2) \cdot \left\{ \int_0^t \mathrm{d}s\, \frac{e^{-s/\tau} - e^{-s/\tau'}}{(\tau - \tau')^2}\, p \begin{pmatrix} x \\ t-s \end{pmatrix} \right. \\ & \left. - \frac{1}{\tau'^2 (\tau - \tau')} \int_0^t \mathrm{d}s\, s\, e^{-s/\tau'}\, p \begin{pmatrix} x \\ t-s \end{pmatrix} \right\} + \frac{D_0^3}{9}\, \tau'^2\, \partial_1^2\, \partial_2^2\, \partial_3^2 \\ & \cdot \left\{ \int_0^t \mathrm{d}s\, s\, \frac{e^{-s/\tau} + e^{-s/\tau'}}{(\tau - \tau')^2}\, p \begin{pmatrix} x \\ t-s \end{pmatrix} - \frac{2\, \tau\, \tau'}{(\tau - \tau')^3} \right. \\ & \left. \cdot \int_0^t \mathrm{d}s\, (e^{-s/\tau} - e^{-s/\tau'})\, p \begin{pmatrix} x \\ t-s \end{pmatrix} \right\}. \end{aligned} \tag{36}$$

Diese Gleichung gilt für alle Zeiten $t \gg \max(\tau, \tau')$. Für kleinere Zeiten treten in (36) noch Terme auf, welche die Anfangsverteilung $p \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$ bzw. $p^{\cdot} \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$ enthalten. Diese Terme relaxatieren jedoch mit den Relaxationszeiten τ bzw. τ'. Die Gl. (36) ist eine lineare partielle Integro-Differentialgleichung und besitzt bei Gittern der 1. Markoff-Stufe kein Analogon. Sie enthält ebenso wie (34), (35) bzw. (32), (33) Glieder, welche nicht mehr drehinvariant, wohl aber invariant gegenüber Deckungstransformationen des Gitters sind. Für Mittelwert, Streuung und Korrelationsfunktion des IT gilt nach (36):

$$\lim_{t\to\infty} E_a(t) = E_a(0) + \tau E_{va}(0),$$
$$E_{va}(t) = E_{va}(0)\, e^{-t/\tau},$$
$$\lim_{t\to\infty} S_a(t) \cong D_0 t,$$
$$\lim_{t\to\infty} S_{va}(t) = c^2/3,$$
$$\lim_{t\to\infty} R_{vaa}(t, t+t_0) = e^{-t_0/\tau}.$$

Die Nachwirkungsterme in (36) werden erst für das asymptotische Verhalten der Momente 3. und höherer Ordnung relevant.

Ändert sich die Wahrscheinlichkeitsverteilungsdichte p wenig über Zeiten bzw. Längen der Größenordnung τ, τ' bzw. $\sqrt{2 D_0 \tau}$, $\sqrt{2 D_0 \tau'}$, so nennen wir den Transportprozeß „gewöhnlich". Für solche Prozesse restringiert sich (36) auf die Gleichung

$$\tau\, \partial_t^2 p + \partial_t p = \frac{D_0}{3} \Delta (1 + \tau' \partial_t) p + O(\tau'^2). \quad (37)$$

Dieselbe Gleichung erhält man aus (36), wenn die Anzahl der Knicke pro Längeneinheit der Bahn des IT sehr groß wird, d. h. wenn $\tau' \to 0$ geht. Die Gl. (37) ist invariant gegenüber Drehungen des Koordinatensystems. Sie beschreibt einen Transportprozeß mit beschränkter Ausbreitungsgeschwindigkeit c. Das mit der Zeitableitung behaftete Glied auf der rechten Seite dieser Gleichung verursacht eine zusätzliche Dämpfung des Transportprozesses, wie aus der Dispersions-Relation von (37) abgelesen werden kann. Dieses Glied tritt im Fall des 1-dimensionalen Prozesses nicht auf. Es kann wegen (30) gegenüber dem Glied mit der 2. Zeitableitung *nicht* vernachlässigt werden. Eine Gleichung von der Struktur (37) kann für den Prozeß der Wärmeleitung auch phänomenologisch im Rahmen der entropiefreien Thermodynamik der Vorgänge begründet werden [8].

Im Falle $n_e \to \infty$, d. h. $\tau \to 0$, $\tau' \to 0$, folgt aus (37) die Gleichung

$$\partial_t p = \frac{D_0}{3} \Delta p.$$

Diese Gleichung kann als Fokker-Planck-Gleichung, als gewöhnliche Diffusionsgleichung (2. Fick-Gesetz) bzw. als Fouriersche Wärmeleitungs-Gleichung interpretiert werden, je nachdem man den Irrflug-Prozeß als Modell für Brownsche Bewegung, Diffusion oder Wärmeleitung ansieht. Eine ausführlichere Diskussion der Gl. (36) soll an anderer Stelle gegeben werden.

Der Verfasser dankt Herrn Prof. D. A. STAHL und seinem Institutskollegen Herrn Dr. D. v. BORRIES für Diskussion.

[8] J. MEIXNER, Z. Physik **219**, 79 [1968]. — J. U. KELLER, in Vorbereitung.