Beschreibung des kosmischen Staubwachstums mittels einer mehrdimensionalen Staubverteilungsfunktion

von

Christian Hoffmann

vorgelegt als Diplomarbeit am Institut für Astronomie und Astrophysik des Fachbereichs 4 (Physik) der Technischen Universität Berlin

3. Februar 1998

Betreuer

Prof. Dr. E. Sedlmayr

1 EINLEITUNG 3

2 THEORETISCHER TEIL 5

2.1 Eindimensionales Momentenverfahren 5
2.2 Die mehrdimensionale Verteilungsfunktion 10
2.3 Die Mastergleichung 14
2.4 Das mehrdimensionale Momentenverfahren 18
2.5 Die Lösung der Gewichtungsbedingung 24
2.6 Spezialfall für ein Momentensystem 27
2.7 Das Geschwindigkeitsfeld im k-Raum 29
2.8 Die Kontinuitätsgleichung 31
2.9 Das Momentenverfahren über die Kontinuitätsgleichung 37
2.10 Numerische Behandlung der Kontinuitätsgleichung nach der Charakteristikenmethode 40
2.11 Irrwege 44

3 ANWENDUNGEN 46

3.1 Wachstum und Drift homogen zusammengesetzter Staubteilchen 46
3.2 Wachstum unterschiedlich geformter Staubkörner 52
3.3 Heterogenes nicht stöchiometrisches Staubwachstum 56

4 SCHLUSSBETRACHTUNG 59

5 ANHANG 62

5.1 Anhang A: Berechnung der Momentengleichung für einen Ordnungsparameter 62
5.2 Anhang B: Quasilineare partielle Differentialgleichung 1.Ordnung 65
5.3 Anhang C: Lösung der Kontinuitätsgleichung für SiO-Staub 70

6 LITERATURVERZEICHNIS 72

7 DANKSAGUNG 73

1 EINLEITUNG

Die meisten Theorien über die Entstehung unseres Planetensystems nehmen an, daß das Sonnensystem aus einer Scheibe kondensierenden Gases und Staubes entstanden ist [1]. Geht man nun der Frage nach, wie der in der Materiescheibe enthaltene Staub entstanden ist, wird man sofort mit der Frage der kosmischen Staubbildung konfrontiert. Ein weiteres Indiz zur kosmischen Staubbildung erhält man durch die Spektralanalyse Roter Riesen. Dort macht sich Staub durch den sogenannten Infrarot-Exzess bemerkbar [2]. Der Staub wandelt dabei kurzwellige stellare Strahlung in langwellige IR-Strahlung um. Aufgrund der vielfältigen Erscheinungsformen des Staubes im Kosmos hat sich die kosmische Staubbildung zu einer Teildisziplin der Astrophysik entwickelt, welche die folgenden Fragestellungen behandelt: Wie entsteht Staub? Welches sind seine physikalischen Eigenschaften? Und welche physikalischen Auswirkungen hat er auf einen Stern, sein Spektrum und dessen Umgebung oder andere astrophysikalische Objekte?

Die wichtigste Eigenschaft des Staubes ist die Größe, Anzahl und Zusammensetzung seiner Staubkörner. Die mathematisch einfachste Beschreibung der ersten beiden Eigenschaften besteht in der Verwendung einer Verteilungsfunktion $f(N, t)$. Sie gibt an, wieviele Staubteilchen N Monomere (Atome oder Moleküle) zur Zeit t enthalten. Die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion wird durch eine Mastergleichung beschrieben. Sie stellt ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem dar, das mit einer Ratenbilanz die physikalischen und chemischen Reaktionen in Rechnung stellt. Durch die Komplexität der Reaktionsraten ist es praktisch unmöglich die Mastergleichung für alle N zu lösen. Daher sind verschiedene Näherungsmethoden entwickelt worden, um die Verteilungsfunktion bestimmen zu können. Eine dieser Methoden ist das Momentenverfahren von GAIL & SEDLMAYR, das die Mastergleichung in ein überschaubares System von Momentengleichungen überführt [3]. Momente sind Mittelwerte von Potenzen von N über die Verteilungsfunktion. Aus den Momenten läßt sich dann die Staubverteilungsfunktion berechnen.

Jetzt will man aber weitere physikalische Eigenschaften (z.B. Form und chemische Zusammensetzung) in die Verteilungsfunktion integrieren, d.h. man benötigt eine mehrdimensionale Verteilungsfunktion, z.B. $f(N, \varepsilon, t)$, wobei ε für die Exzentrizität der als ellipsoid gedachten Staubkörner steht. Auch hierfür läßt sich eine Mastergleichung angeben, die aber noch schwieriger für den relevanten Parameterbereich zu lösen ist.

Ziel dieser Arbeit ist es daher, ein Momentenverfahren für eine mehrdimensionale Verteilungsfunktion zu entwickeln. Es stellt sich dabei heraus, daß in diesem Falle ein Momentenverfahren nur dann durchführbar ist, wenn an die Reaktionsraten bestimmte Bedingungen gestellt werden. Da diese Bedingungen eine enorme Einschränkung an die Anwendungsvielfalt darstellen, wird in dieser Arbeit noch eine weitere kontinuumsmechanische Methode vorgestellt, die eng mit der von KRÜGER, WOITKE & SEDLMAYR 1995 verwandt ist [4]. Dieses Verfahren läßt sich dann auf beliebigere Raten anwenden.

Die Arbeit ist unterteilt in einen theoretischen Teil und einen Teil in dem die Anwendungen der Methoden vorgestellt werden. Der theoretische Teil faßt zunächst kurz das eindimensionale Momentenverfahren zusammen, weil es das Fundament des mehrdimensionalen Verfahrens bildet (Kapitel 2.1). Darauf folgt eine Diskussion der mehrdimensionalen Verteilungsfunktion und eine allgemeine Darstellung der Mastergleichung (Kapitel 2.2 und 2.3). Die Definition der Momente führt dann auf die Momentengleichungen mit den Bedingungen der Gewichtung (Kapitel 2.4), dessen Lösung auf die oben angesprochene Einschränkung führt (Kapitel 2.5). Es wird noch darauf hingewiesen, daß diese Bedingung umgangen werden kann, wenn es bezüglich der Parameter nur unabhängige Übergänge gibt (Kapitel 2.6). Es folgt dann die Definition des Geschwindigkeitsfeldes und die Herleitung der Kontinuitätsgleichung sowie eines analytischen Lösungsverfahrens (Kapitel 2.7 und 2.8). Mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung wird dann in Kapitel 2.9 nochmals der Versuch unternommen ein Momentengleichungssystem aufzustellen. Dann wird ein Blick auf die numerische Behandlung der Kontinuitätsgleichung geworfen (Kapitel 2.10) und schließlich werden einige Ansätze vorgestellt, die nicht zum gewünschten Ziel geführt haben (Kapitel 2.11).

Der anwendungsbezogene Teil behandelt einige ausgewählte astrophysikalische Staubwachstumsprobleme wie driftender Staub (Kapitel 3.1), Formbildung (Kapitel 3.2) und heterogene Zusammensetzung (Kapitel 3.3). Der Schwerpunkt in dieser Diplomarbeit liegt mehr auf einer analytischen Behandlung als auf einer numerischen Lösung. Die Kapitel im Anwendungsteil enden daher meist mit der gelösten Kontinuitätsgleichung.

In der gesamten Arbeit wird die Verteilungsfunktion in EULERschen Koordinaten dargestellt.

2 THEORETISCHER TEIL

2.1 Eindimensionales Momentenverfahren

Um das Prinzip des mehrdimensionalen Momentenverfahrens zu verstehen, wollen wir uns zunächst das eindimensionale Momentenverfahren anschauen, wie es z.B. in meiner Studienarbeit ausgearbeitet ist [5]. Man geht dabei von der Mastergleichung

$$\frac{\partial f(k,t)}{\partial t} = \sum_{i}^{I} \left(R(k-k_i \to k,t) - R(k \to k+k_i,t) \right) \tag{2.1.1}$$

aus[1]. $f(k, t)$ bezeichnet eine eindimensionale Verteilungsfunktion mit beliebigem Parameter k. $R(k-k_i \to k,t)$ steht für die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, daß eine Reaktion von $k-k_i \to k$ stattfindet, also die Teilchenzahl im Zustand k erhöht wird. $R(k \to k+k_i,t)$ steht für die Übergangswahrscheinlichkeit der Reaktion $k \to k+k_i$. Der Index i numeriert alle möglichen Reaktionen durch, wobei k_i die Schrittweite der Reaktion darstellt. I ist die Zahl der betrachteten Reaktionen. Die nachstehende Skizze illustriert die Übergänge.

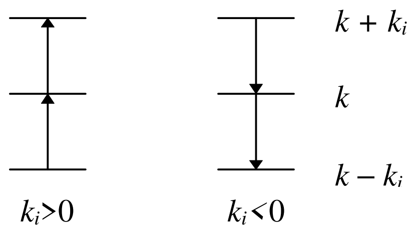

Abbildung 2.1.1: Schematische Darstellung der in der Mastergleichung auftretenden Übergänge für ein i. Die Pfeile kennzeichnen jeweils die Summe aller möglichen Reaktionen, die diesen Übergang vollziehen (z.B. verschiedene chemischen Reaktionen, die das Staubkorn jeweils um ein k erhöhen).

Die Raten besitzen eine natürliche funktionale Struktur: Sie sind proportional zur Verteilungsfunktion des Ausgangszustandes, also

$$\begin{aligned} R(k-k_i \to k,t) &= \omega(k-k_i \to k,t) f(k-k_i,t) \\ R(k \to k+k_i,t) &= \omega(k \to k+k_i,t) f(k,t). \end{aligned} \tag{2.1.2}$$

$\omega(k-k_i \to k,t)$ steht für die Einteilchenübergangsrate, also für die Wahrscheinlichkeit (pro Zeiteinheit) daß ein Teilchen bzw. Staubkorn die Reaktion $k-k_i \to k$ durchmacht. Dabei sind

[1] Die Mastergleichung (2.1.1) ist bewußt mit der lokalen zeitlichen Änderung der Verteilungsfunktion formuliert (EULER-Koordinaten).

in dieser Größe alle möglichen Übergangsraten aufsummiert, die den Übergang k_i bewirken (z.B. verschiedene chemische Reaktionen). An diese Einteilchenübergangsrate muß noch eine Bedingung gestellt werden, damit ein Momentengleichungssystem der Form von GAIL & SEDLMAYR aufgestellt werden kann: Sie muß in k und k_i separierbar sein (siehe auch [5]):

$$\begin{aligned} \omega(k - k_i \rightarrow k) &= \omega(k_i)h(k - k_i) \\ \omega(k \rightarrow k + k_i) &= \omega(k_i)h(k) \end{aligned} \tag{2.1.3}$$

Es folgt nun die Definition der Momente K_m mit Hilfe der Gewichtung $g_m(k)$ gemäß

$$K_m(t) = \sum_{k=k_0}^{\infty} g_m(k) f(k,t). \tag{2.1.4}$$

Die Gewichtung ist nicht zeitabhängig, da sich das Moment nur dann zeitlich ändern soll, wenn sich auch die Verteilungsfunktion zeitlich ändert, weil die Momente den Zustand des Staubs repräsentieren sollen. k_0 ist die Grenze, bei der das Staubwachstum makroskopisch beschrieben werden kann, was der Fall ist, wenn der Parameter k groß im Vergleich zu den Übergängen k_i ist. Wenn man nun die Zeitableitung vom K_m bildet, erhält man

$$\frac{dK_m(t)}{dt} = \sum_{k=k_\ell}^{\infty} g_m(k) \frac{df(k,t)}{dt} \tag{2.1.5}$$

und nach längerer Rechnung (vgl. Anhang A) durch das Einsetzen der Mastergleichung (2.1.1)

$$\frac{dK_m(t)}{dt} = m\frac{1}{\tau} K_{m-1}(t) + g_m(k_0) J_{k_0}. \tag{2.1.6}$$

Gleichung (2.1.6) ist die Momentengleichung. Sie gilt nur, wenn die Bedingung

$$\frac{dg_m(k)}{dk} h(k) = m g_{m-1}(k) \tag{2.1.7}$$

an die Gewichtung erfüllt ist. Dabei wurde, wie gesagt, vorausgesetzt, daß der Parameter k groß im Vergleich zu den Übergängen k_i ist. Damit kann man die Verteilungsfunktion als quasikontinuierlich ansehen, was auf den Differentialausdruck in (2.1.7) führt. Das Thema wird noch ausführlicher in Kapitel 2.4 diskutiert, wenn die mehrdimensionalen Momentengleichungen aufgestellt werden.

Die Funktion $h(k)$ definiert also die Gewichtung $g(k)$. Wie die Momente der Verteilungsfunktion aussehen, weiß man erst nach der Lösung des Differentialgleichungssystems (2.1.7) für $g_m(k)$. Das Integral hierfür lautet

$$g_m(k) = \left(\int \frac{dk}{h(k)} \right)^m .$$

(2.1.8)

J_{k_0} in (2.1.6) bezeichnet die mit $g_m(k)$ gewichteten Netto-Übergangsraten, die in den k-Raum über k_0 hineinreichen, wie es in Abbildung 2.1.2 skizziert ist. Der k-Raum ist durch k_0 in den Bereich der makroskopischen Teilchen und der kleinen Cluster unterteilt.

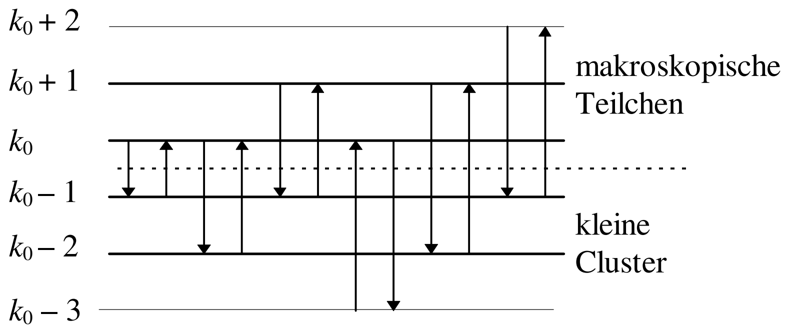

Abbildung 2.1.2: Darstellung aller Übergänge, die zur Netto-Übergangsrate in k_0 beitragen. Es sind nur die Übergänge bis $\Delta k = 3$ eingezeichnet.

Die Netto-Übergangsrate berechnet sich zu

$$J_{k_0} = \sum_{k=0}^{k_i - 1} \left(\sum_{i=1}^{L} g_m(k_0 + k) R(k_0 + k - k_i \rightarrow k_0 + k) - \sum_{i=L+1}^{I} g_m(k_0 + k + k_i) R(k_0 + k \rightarrow k_0 + k - k_i) \right). \qquad (2.1.9)$$

Dabei sind die ersten k_i ($i = 1...L$) positiv, die restlichen ($i = L + 1...I$) negativ. Eine wichtige Größe in den Momentengleichungen ist $\frac{1}{\tau}$. Sie gibt die charakteristische Zeitskala des Wachstumsprozesses an und ergibt sich aus

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{i=1}^{I} k_i \omega(k_i). \qquad (2.1.10)$$

Man bedenke, daß $\frac{1}{\tau}$ durch negative k_i auch negativ sein kann, was ein Abnehmen der Momente also bei Teilchenzahlen Verdampfung bedeuten würde. Die $\omega(k_i)$ sind hingegen immer positiv, da sie aus der Übergangswahrscheinlichkeit hervorgehen. Die Momente lassen sich aus den Momentengleichungen einfacher berechnen, als die Verteilungsfunktion aus der Mastergleichung, da die Momentengleichungen ein vergleichsweise einfaches Gleichungssystem bilden. Hinzu kommt, daß die ersten vier Momente K_0 bis K_3 bei einer Teilchenzahlverteilungsfunktion physikalisch als Staubdichte, mittlerer Staubradius, mittlere Stauboberfläche sowie die in den Staubkörnern enthaltenen Monomere interpretierbar sind. Damit lassen sich die wichtigsten physikalischen Größen direkt aus der Momenten berechnen. Es besteht aber ein enger Zusammenhang zwischen der physikalischen Bedeutung der Momente und dem Aufbau des Momentengleichungssystem: Angenommen man definiert das Moment

$$K(t) = \sum_{k=k_0}^{\infty} g(k) f(k,t) \tag{2.1.11}$$

(ohne Index) und leitet es nach der Zeit ab, dann entsteht die Momentengleichung

$$\frac{dK(t)}{dt} = \frac{1}{\tau} K(t) + g(k_\ell) J(k_\ell) \tag{2.1.12}$$

unter der Bedingung, daß

$$\frac{dg(k)}{dk} h(k) = g(k) \tag{2.1.13}$$

gilt. $\frac{1}{\tau}$ hat die gleiche Form wie oben (2.1.10). K selbst hat allerdings eine völlig andere Bedeutung als die Momente K_m. Dabei ist es meist unmöglich eine physikalische Bedeutung zu finden. Im obigen Beispiel entspräche K einer Linearkombination von Staubdichte, mittlerer Staubradius, mittlere Stauboberfläche und Monomerenzahl sowie all der ebenfalls nicht interpretierbaren höheren Momente. Man kann sich noch viele andere Momentengleichungssysteme ausdenken, in denen die Momente immer eine andere physikalische Bedeutung erhalten. Die charakteristische Zeitskala ist jedoch immer die gleiche. Ich möchte hier zeigen, daß die beiden oben vorgestellten Gleichungssysteme ineinander überführbar sind. Zunächst lösen wir die Differentialgleichung für $g(k)$ und erhalten

$$g(k) = e^{\int \frac{dk}{h(k)}} . \tag{2.1.14}$$

Führt man jetzt eine Reihenentwicklung von $g(k)$ aus ergibt sich

$$g(k) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\int \frac{dk}{h(k)} \right)^m . \tag{2.1.15}$$

Die runde Klammer (mit dem Exponenten) erkennen wir als die in (2.1.8) erhaltenen Gewichtungen $g_m(k)$ wieder, so daß wir

$$g(k) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} g_m(k) \tag{2.1.16}$$

schreiben können. Multiplizieren wir diese Gleichung mit der Verteilungsfunktion $f(k, t)$ erhalten wir

$$K(t) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} K_m(t) . \tag{2.1.17}$$

Um nun zu zeigen, daß auch die Momentengleichungssysteme einander äquivalent sind, müssen wir $K(t)$ nach der Zeit ableiten. Man erhält:

$$\begin{aligned} \frac{dK(t)}{dt} &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{dK_m(t)}{dt} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{m}{\tau} K_{m-1}(t) + g_m(k_0) J(k_0) \right) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m}{m!} \frac{1}{\tau} K_{m-1}(t) + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} g_m(k_0) J(k_0) \\ &= \frac{1}{\tau} K(t) + g(k_0) J(k_0) \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Momentengleichungen für K_m ausgenutzt und sind auf die Gleichung für K gestoßen. In der weiteren Arbeit werde ich nur mit dem einfacherem Moment K rechnen. Sollte es irgendwann einmal von Nöten sein, die anderen Momente zu benutzen, kann man sie sich ja durch die Reihenentwicklung jederzeit beschaffen.

Bei der gesamten vorangegangenen Betrachtung wurde k immer mit einer Teilchenzahl oder Teilchengröße assoziiert. Dadurch tauchen Begriffe wie Cluster und makroskopische Teilchen auf. Momentengleichungen können aber auch mit anderen Verteilungsfunktionen gebildet werden. Als illustratives aber nicht reales Beispiel möge ein Gas dienen, dessen Moleküle eine gewisse Farbe c haben. Dann gibt $f(c, t)$ die Zahl der Gasmoleküle an, die die Farbe c zur Zeit t besitzen. Die Raten in der dazugehörigen Mastergleichung geben nun an, wieviele Gasmoleküle pro Zeiteinheit die Farbe wechseln! In der obigen Herleitung müssen dann Begriffe wie kleine Cluster und makroskopische Teilchen durch niedrige und hohe Farben usw. ersetzt werden.

2.2 Die mehrdimensionale Verteilungsfunktion

Die im letzten Kapitel besprochene Verteilungsfunktion hing außer von der Zeit nur von einem Parameter ab - sie war eindimensional. Es sollen nun zwei Beispiele betrachtet werden, die die Notwendigkeit der Erweiterung der Verteilungsfunktion auf mehrere Dimensionen verdeutlichen.

Als erstes denken wir uns Staub, der aus Silizium- und Sauerstoffatomen bestehen soll. Bei den herkömmlichen Methoden kann man nur berechnen, wie groß das Staubkorn für ein festes stochiometrisches Verhältnis von Sauerstoff zu Silizium ist. Zwei Parameter, die die Anzahl der Atome im Cluster beschreiben, seien $k^1 = N_{Si}$ und $k^2 = N_O$. $f(k^1, k^2, t)$ gibt nun die Zahl der Teilchen an, die k^1 Silizium- und k^2 Sauerstoffatome zur Zeit t enthalten.

Das zweite Beispiel betrifft Staub, der z.B. aus unterschiedlich geformten Quadern unterschiedlicher Größe besteht, was natürlich nur eine sehr idealisierte Vorstellung ist. Bezeichnen a, b und c die Kantenlängen der Quader, dann ist $f(a,b,c)da\,db\,dc$ die Zahl der Quader, die (wiederum zur Zeit t) im Intervall $da\,db\,dc$ die Kantenlängen a, b und c besitzen. Diese Verteilungsfunktion hat nun schon drei Dimensionen.

Diese beiden Beispiele zeigen, daß es grundsätzlich zwei Typen von Parametern gibt - diskrete und kontinuierliche. Bei kontinuierlichen Parametern stellt die Verteilungsfunktion eine Dichte über die Mannigfaltigkeit dar, die von den kontinuierlichen Parametern gebildet wird. Die Zahl der Zustände in einem Bereich wird durch Integration der Verteilungsfunktion über diesen ermittelt. Sind die Parameter diskret, dann gilt z.B. $dN = N + 1 - N = 1$ und die Verteilungsfunktion gibt direkt die Besetzungszahl an. Eine allgemeine Verteilungsfunktion kann sowohl diskrete als auch kontinuierliche Parameter besitzen (z.B. die Zahl der Staubkörner der Größe N am Ort $\boldsymbol{r}$ $f(N, \boldsymbol{r}, t)$). Der Einfachheit halber führen wir die folgenden Überlegungen mit einer diskreten Verteilungsfunktion durch[2].

Angenommen das System besitze endlich[3] viele Ordnungsparameter p, dann sei

[2] Die Grafiken sind alle für den diskreten Fall gezeichnet. Wichtige Ergebnisse werden für den kontinuierlichen Fall nicht vorgerechnet, sondern nur angegeben. Sie lassen sich äquivalent herleiten, indem man Summen über die Parameter in Integrale verwandelt.

[3] Es ist möglich sich ein System mit unendlich vielen Ordnungsparametern zu konstruieren. Als Beispiel kann man sich eine Verteilungsfunktion denken, die die Zahl der Teilchen angeben soll, die eine bestimmte Form

$$\boldsymbol{k} = \begin{pmatrix} k^1 \\ k^2 \\ \vdots \\ k^p \end{pmatrix}$$

ein Element aus dem Raum der Ordnungsparameter kurz $\boldsymbol{k}$-Raum[4]. Für $p = 2$ läßt sich ein solches Element in einer Grafik veranschaulichen.

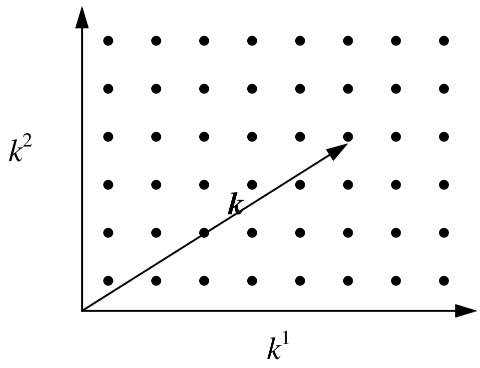

Abbildung 2.2.1: Zustand im k-Raum. Die Koordinatenachsen stehen für zwei Ordnungsparameter in der Verteilungsfunktion, z.B. Zahl der Sauerstoff- und Zahl der Siliziumatome.

$\boldsymbol{k}$ steht also für einen bestimmten Zustand, in dem sich das Staubkorn befindet. In der Vektorschreibweise erhält die Verteilungsfunktion die Form $f(\boldsymbol{k}, t)$, die angibt, wieviele Teilchen sich zur Zeit t im Zustand $\boldsymbol{k}$ befinden.

Aus einer Verteilungsfunktion mit hohem Informationsgehalt läßt sich durch Summation über ein oder mehrere Parameter eine Verteilungsfunktion mit niedrigerem Informationsgehalt berechnen. Betrachten wir dazu das erste Beispiel mit der Verteilungsfunktion $f(N_{Si}, N_O, t)$. Aus dieser Verteilung wollen wir die Verteilungsfunktion $f(N, t)$ herleiten. Dafür benötigen wir eine Beziehung zwischen N und den beiden Parametern N_{Si} und N_O. Sie ist einfach gegeben durch $N = N_{Si} + N_O$. Löst man diese Beziehung nach N_O auf und setzt sie in die Verteilungsfunktion ein, so erhält man $f(N_{Si}, N - N_{Si}, t)$. Wird jetzt über alle N_{Si} summiert ergibt sich die Verteilungsfunktion $f(N, t)$. Ein ähnliches Verfahren wollen wir nun für eine beliebige Verteilungsfunktion $f(\boldsymbol{k}, t)$ durchführen. Die Größe, die aus den k^i hervorgeht, sei $\tilde{k}^1$ und ist durch die Nebenbedingung α gegeben:

---

haben. Sei $\boldsymbol{A}(u,v)$ eine Darstellung einer geschlossenen Oberfläche der beiden Parameter u und v (von der es ja unendlich viele gibt), dann ist $f(\boldsymbol{A}(u,v),t)$ diese gesuchte Verteilungsfunktion.

$$\tilde{k}^1 = \alpha(k^1, k^2, \ldots, k^p) = \alpha(\boldsymbol{k}) . \tag{2.2.1}$$

Die anderen Parameter transformieren sich in diesem Beispiel gemäß

$$\begin{aligned} \tilde{k}^2 &= k^2, \\ &\vdots \\ \tilde{k}^p &= k^p. \end{aligned} \tag{2.2.2}$$

Wenn wir (2.2.1) und (2.2.2) nach k^1 auflösen, erhalten wir

$$\begin{aligned} k^1 &= \overline{\alpha}(\tilde{k}^1, \tilde{k}^2, \ldots, \tilde{k}^p), \\ k^2 &= \tilde{k}^2, \\ &\vdots \\ k^p &= \tilde{k}^p. \end{aligned} \tag{2.2.3}$$

Dabei steht $\overline{\alpha}$ für die Umkehrfunktion. Die ursprüngliche Verteilungsfunktion $f(k^1, k^2, \ldots, k^p, t)$ kann dann geschrieben werden als

$$f\left(\overline{\alpha}(\tilde{k}^1, \tilde{k}^2, \ldots, \tilde{k}^p), \tilde{k}^2, \ldots, \tilde{k}^p, t\right), \tag{2.2.4}$$

und die Verteilungsfunktion für $f(\tilde{k}^1, t)$ lautet

$$f(\tilde{k}^1, t) = \sum_{\tilde{k}^2, \ldots, \tilde{k}^p} f\left(\overline{\alpha}(\tilde{k}^1, \tilde{k}^2, \ldots, \tilde{k}^p), \tilde{k}^2, \ldots, \tilde{k}^p, t\right). \tag{2.2.5}$$

Man kann die Transformation natürlich beliebig kompliziert machen. Die Vorgehensweise bleibt die gleiche für eine Transformation $k^i = \overline{\alpha}_i(\tilde{k}^1, \ldots, \tilde{k}^p)$. Es ist zum Beispiel möglich eine Verteilungsfunktion mit q Parametern aus einer Verteilungsfunktion mit $p > q$ Parametern zu konstruieren. Man summiert dann einfach über $p - q$ Parameter.

Diese Transformation gilt nur für diskrete Verteilungsfunktionen. Bei kontinuierlichen Parametern muß man bedenken, daß die Zahl der in dem Intervall $d^p\boldsymbol{k}$ um den Zustand $\boldsymbol{k}$ vorhandenen Teilchen durch $f(\boldsymbol{k}, t)d^p\boldsymbol{k}$ gegeben ist. Man muß daher das Volumenelement für die Verteilungsfunktion $f(\tilde{k}^1, t)$ aus der Nebenbedingung berechnen:

$$d^p\boldsymbol{k} = \det\left(\frac{\partial\overline{\alpha}_i(\tilde{k}^1, \ldots, \tilde{k}^p)}{\partial\tilde{k}^j}\right) d^p\tilde{\boldsymbol{k}} . \tag{2.2.6}$$

---

[4]Um zu verdeutlichen, daß es sich um eine mehrdimensionale Verteilungsfunktion handelt, werden für alle

Die Integration führt dann auf

$$f(\tilde{k}^1,t)d\tilde{k}^1 = \int_{\tilde{k}^2,\ldots,\tilde{k}^p} f\left(\overline{\alpha}_i(\tilde{k}^1,\tilde{k}^2,\ldots,\tilde{k}^p)\right)\det\left(\frac{\partial\overline{\alpha}_i}{\partial\tilde{k}^j}\right)d\tilde{k}^1 d\tilde{k}^2 \cdots d\tilde{k}^p \; . \qquad (2.2.7)$$

Mit diesem Verfahren lassen sich beliebige, mit den aus k^1 bis k^p definierbaren Größen $\tilde{k}^1$, Verteilungsfunktionen $f(\tilde{k}^1)$ berechnen. Es ist natürlich auch möglich eine allgemeine Transformation durchzuführen und dann nur über die Parameter $\tilde{k}^3,\ldots,\tilde{k}^p$ zu summieren bzw. zu integrieren. Man erhält dann eine Verteilungsfunktion $f(\tilde{k}^1,\tilde{k}^2,t)$.

Vektoren fette Buchstaben benutzt.

2.3 Die Mastergleichung

Betrachten wir von nun an eine Verteilungsfunktion $f(\boldsymbol{k}, t)$. Wir wollen die zeitliche Änderung der Verteilungsfunktion beschreiben und bedienen uns dazu der Mastergleichung. Die Mastergleichung stellt eine Bilanz von Gewinn- und Verlustraten dar. Eine Rate gibt die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit an, daß eine bestimmte Reaktion stattfindet. Jetzt muß man alle Raten, die $f(\boldsymbol{k}, t)$ erhöhen, addieren und diejenigen, die $f(\boldsymbol{k}, t)$ erniedrigen, subtrahieren. Die Schreibweise der Ratenbilanz kann die spätere Ableitung des Momentenverfahrens vereinfachen. Man könnte zum Beispiel die Mastergleichung durch

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} = R_{zu} - R_{ab} \tag{2.3.1}$$

darstellen. Dabei steht R_{zu} für alle Raten, die die Teilchenzahl im Zustand $\boldsymbol{k}$ erhöhen gemäß Abbildung 2.3.1:

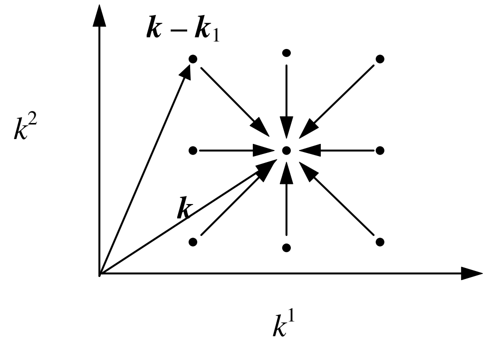

Abbildung 2.3.1: Repräsentativ herausgegriffene Raten, die die Teilchenzahl im Zustand $\boldsymbol{k}$ erhöhen.

Der Ausdruck dafür lautet

$$R_{zu} = \sum_i R(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}). \tag{2.3.2}$$

Für R_{ab} illustriert Abbildung 2.3.2

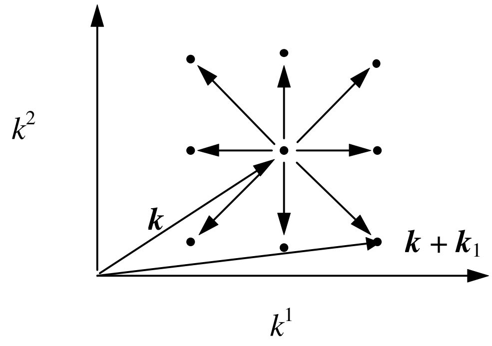

Abbildung 2.3.2: Repräsentativ herausgegriffene Raten, die die Teilchenzahl im Zustand $\boldsymbol{k}$ erniedrigen.

die Übergänge, die durch

$$R_{ab} = \sum_j R(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_j) \tag{2.3.3}$$

ihren Ausdruck findet. Die Mastergleichung ist damit komplett. Um aber in einfacher Weise ein Momentenverfahren aufstellen zu können, ist es besser, die Übergänge in einer Richtung, also für einen Vektor $\boldsymbol{k}_i$, zu gruppieren:

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} = \left(R(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}, t) - R(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i, t)\right),$$

was durch Abbildung 2.3.3 illustriert ist:

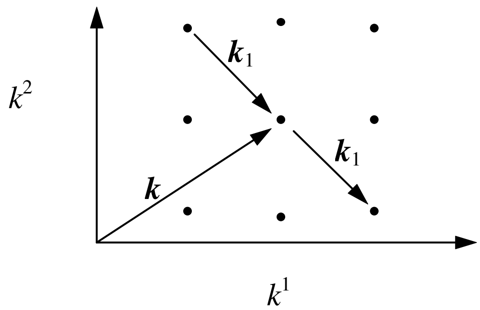

Abbildung 2.3.3: Hier sind die Übergänge für ein i, also für eine Richtung, eingezeichnet.

Durch Summation über alle $\boldsymbol{k}_i$ ist die Mastergleichung dann wiederum vollständig.

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} = \sum_i \left(R(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}, t) - R(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i, t)\right). \tag{2.3.4}$$

Diese Gleichung stellt die Ausgangsgleichung der weiteren Arbeit dar. Vergleicht man diese Mastergleichung mit der eindimensionalen Mastergleichung aus Kapitel 2.1, erkennt man, daß dort im Prinzip nur über eine Gerade summiert wird. Die Verallgemeinerung ist durch die vektorielle Schreibweise gegeben. Man bedenke dabei, daß die eindimensionale Mastergleichung hier einem Satz von $\boldsymbol{k}_i$ entspricht, die die gleiche Richtung aber unterschiedliche Längen besitzen, also z.B.

$$\boldsymbol{k}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{k}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \boldsymbol{k}_3 = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \end{pmatrix}, \boldsymbol{k}_4 = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Zur Verdeutlichung der mehrdimensionalen Mastergleichung wollen wir noch einmal das Beispiel mit dem SiO-Staub heranziehen. Die Anlagerung eines SiO_2-Moleküls würde einen Vektor $\boldsymbol{k}_i$=(1, 2) bedeuten. Das Verdampfen eines SiO_2-Moleküls würde $\boldsymbol{k}_i$=(–1, –2) heißen. Eine chemische Reaktion, die ein Si-Atom gegen ein O-Atom tauscht, hätte $\boldsymbol{k}_i$=(–1, 1) zur Folge. Es sind natürlich auch Übergänge wie $\boldsymbol{k}_i$=(20, 17) möglich, aber aufgrund ihres geringen Auftretens vernachläsigbar. Im allgemeinen hat man es daher mit einer endlichen Summe über die Reaktionsraten zu tun.

Man muß nun, wie in der eindimensionalen Beschreibung auch, Bedingungen an die funktionale Struktur der Reaktionsraten stellen. Dabei gehen wir von der eindimensionalen Situation aus und setzen zunächst (vgl. (2.1.2)):

$$\begin{aligned} R(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k},t) &= \omega(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k},t) f(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i,t), \\ R(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_i,t) &= \omega(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_i,t) f(\boldsymbol{k},t). \end{aligned} \tag{2.3.5}$$

$\omega(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k})$ bzw. $\omega(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i)$ bezeichnen wieder die Einteilchenübergangsraten, also die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für ein Staubkorn. Die Tatsache, daß die Rate ein Produkt aus einfacher Rate und Verteilungsfunktion ist, ist universell gültig, wie es in der Studienarbeit für den eindimensionalen Fall gezeigt worden ist [5]. Die Verallgemeinerung auf den mehrdimensionalen Fall ist trivial. Auch jetzt folgt wieder die Separation der einfachen Übergangsraten ω in $\boldsymbol{k}$ und $\boldsymbol{k}_i$ für $|\boldsymbol{k}| >> |\boldsymbol{k}_i|$, damit Momentengleichungen aufgestellt werden können, die den Momentengleichungen aus Kapitel 2.1 äquivalent sind:

$$\begin{aligned} \omega(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k},t) &= \omega(\boldsymbol{k}_i,t) h(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i), \\ \omega(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_i,t) &= \omega(\boldsymbol{k}_i,t) h(\boldsymbol{k}). \end{aligned} \tag{2.3.6}$$

Es wird also gefordert, daß die Einteilchenübergangsraten als Produkt von zwei Größen dargestellt werden kann. Der eine Faktor ist die Funktion $h(\boldsymbol{k})$. Sie beschreibt die lokale Abhängigkeit der Raten von den Ordnungsparametern und wird als zeitunabhängig vorausgesetzt. Die zweite Größe $\omega(\boldsymbol{k}_i)$ beschreibt die unterschiedlichen Übergangszeiten in jeder Richtung. Eine solche Separation ist für viele astrophysikalische Prozesse durchführbar (z.B. heterogenes Staubwachstum).

Die Raten werden somit genähert zu

$$\begin{aligned}
&R(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i \rightarrow \boldsymbol{k},t) = \omega(\boldsymbol{k}_i,t)h(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i)f(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_i,t),\\
&R(\boldsymbol{k} \rightarrow \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_i,t) = \omega(\boldsymbol{k}_i,t)h(\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{k},t).
\end{aligned} \tag{2.3.7}$$

Damit ist die Vorbereitung zur Aufstellung von Momentengleichungen abgeschlossen.

2.4 Das mehrdimensionale Momentenverfahren

Ein Momentenverfahren für eine mehrdimensionale Verteilungsfunktion aufzustellen, ist zwar möglich aber bedingt durch massive Einschränkungen die Einteilchenübergangsraten betreffend zur Beschreibung des kosmischen Staubwachstums weitgehend unbrauchbar. Die Einschränkung besagt, daß die Einteilchenübergangsraten nur von einer Linearkombination der in der Verteilungsfunktion auftretenden Parametern abhängen darf. Für einige Probleme mag das vielleicht noch zutreffen (Bsp. SiO-Staub), für allgemeine Probleme (unterschiedliche Quader, driftender Staub, Schockwellen...) ist dies leider nicht erfüllt. Der Grund dafür liegt in der Natur des Momentenverfahrens. Die Erklärung dazu liefern die nächsten beiden Kapitel.

Zur Konstruktion einer Momentengleichung aus der Mastergleichung (2.3.4) wird eine Gerade mit dem Richtungsvektor $\boldsymbol{k}_i$ in einem Bereich B des $\boldsymbol{k}$–Raumes definiert. Wie wir in Kapitel 2.3 gesehen haben, steht die mehrdimensionale Mastergleichung in einer Richtung für eine eindimensionale Mastergleichung, und für diese kann man Momentengleichungen aufstellen. Daher soll im Folgenden die Momentengleichung exemplarisch für eine Richtung $\boldsymbol{k}_i$ hergeleitet werden. Dieses Verfahren wird dann für jede Parallele zu dieser Geraden und schließlich für jeden Vektor $\boldsymbol{k}_i$ durchgeführt.

B sei ein beliebiger Bereich im $\boldsymbol{k}$-Raum. Der Bereich muß nicht zusammenhängend oder beschränkt sondern nur weit weg vom Nullpunkt sein, damit die Näherung $|\boldsymbol{k}| >> |\boldsymbol{k}_i|$ erfüllt ist.

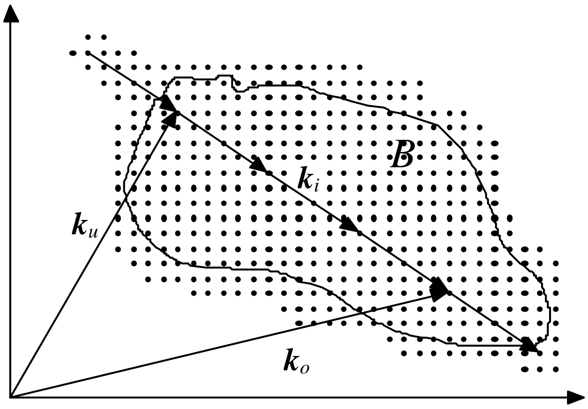

Abbildung 2.4.1: Repräsentativ herausgegriffene Gerade, für die ein eindimensionales Momentenverfahren angestrengt wird. Die Zustände $\boldsymbol{k}_u$ und $\boldsymbol{k}_o$ stellen die untere und obere Summationsgrenze dar.

In diesem Bereich wird eine Gerade mit dem nicht auf eins normierten Richtungsvektor $\boldsymbol{k}_i$ herausgegriffen. Die Bezeichnung verrät, daß es sich hierbei um den in der Mastergleichung auftretenden Übergang handelt. Es existieren nun ein oder mehrere Punkte auf der Geraden, die innerhalb von B aber mit $\boldsymbol{k}_i$ subtrahiert außerhalb von B liegen. Diese Punkte oder Zustände nennen wir $\boldsymbol{k}_u$. Addiert man dann $\hat{n}$ mal den Vektor $\boldsymbol{k}_i$ hinzu, gelangt man zu dem Zustand, der innerhalb von B aber ein weiteres mal mit $\boldsymbol{k}_i$ addiert außerhalb von B liegt. Diese Zustände heißen $\boldsymbol{k}_o$. Die beiden Zustände bilden die Endpunkte auf der Geraden und liegen innerhalb von B (siehe Abbildung 2.4.1).

$$\boldsymbol{k}_o = \boldsymbol{k}_u + \hat{n}\boldsymbol{k}_i\,. \tag{2.4.1}$$

Über diese Zustände wird das Moment einer Geraden definiert:

$$K(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t) = \sum_{n=0}^{\hat{n}} g(\boldsymbol{k}_u + n\boldsymbol{k}_i)\, f(\boldsymbol{k}_u + n\boldsymbol{k}_i,t)\,. \tag{2.4.2}$$

Die Gewichtungsfunktion g sei auch im mehrdimensionalen zeitunabhängig, da sich zeitlichen Änderungen eines Moments immer auf die Verteilungsfunktion beziehen sollen. Die jetzt folgende Prozedur ist analog zu der Herleitung der eindimensionalen Momentengleichung (Anhang A), nur daß man nicht zwischen positivem und negativem $\boldsymbol{k}_i$ unterscheiden muß, weil die Orientierung durch die vektorielle Schreibweise in den Schrittweiten $\boldsymbol{k}_i$ enthalten ist. Man muß jedoch die obere Summationsgrenze berücksichtigen, weil B nicht notwendigerweise unbeschränkt sein muß. Das Moment K wird nach der Zeit abgeleitet:

$$\frac{dK(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t)}{dt} = \sum_{n=0}^{\hat{n}} g(\boldsymbol{k}_u + n\boldsymbol{k}_i)\frac{\partial f(\boldsymbol{k}_u + n\boldsymbol{k}_i,t)}{\partial t}\,. \tag{2.4.3}$$

Hier setzt man jetzt die Mastergleichung ein, wobei wir zunächst nur die Übergänge in $\boldsymbol{k}_i$-Richtung betrachten wollen:

$$\frac{dK(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t)}{dt} = \sum_{n=0}^{\hat{n}} g(\boldsymbol{k}_u + n\boldsymbol{k}_i)\big[R(\boldsymbol{k}_u + (n-1)\boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}_u + n\boldsymbol{k}_i,t) - R(\boldsymbol{k}_u + n\boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}_u + (n+1)\boldsymbol{k}_i,t)\big] \tag{2.4.4}$$

In dieser Summe lassen sich alle Raten zusammenfassen, bis auf die positive Rate für $n = 0$, $R(\boldsymbol{k}_u - \boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}_u, t)$, und die negative Rate für $n = \hat{n}$, $R(\boldsymbol{k}_o - \boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}_o, t)$, somit entsteht

$$\begin{aligned}\frac{dK(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t)}{dt} &= \sum_{n=0}^{\hat{n}-1}\big[g(\boldsymbol{k}_u + (n+1)\boldsymbol{k}_i) - g(\boldsymbol{k}_u + n\boldsymbol{k}_i)\big]R(\boldsymbol{k}_u + n\boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}_u + (n+1)\boldsymbol{k}_i,t)\\ &\quad + g(\boldsymbol{k}_u)R(\boldsymbol{k}_u - \boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}_u,t) - g(\boldsymbol{k}_o)R(\boldsymbol{k}_o \to \boldsymbol{k}_o + \boldsymbol{k}_i,t).\end{aligned} \tag{2.4.5}$$

Die letzten beiden Summanden stellen die zufließende Rate am unteren und die abfließende Rate am oberen Ende der Geraden dar. Wir bezeichnen sie kurz mit $J_+(\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_i)$ und $J_-(\boldsymbol{k}_o,\boldsymbol{k}_i)$. Für die eckigen Klammern können wir eine Taylor-Näherung machen, unter der Voraussetzung, daß $\boldsymbol{k}_i$ eine kleine Änderung gegenüber $\boldsymbol{k}$ darstellt:

$$g(\boldsymbol{k}_u+(n+1)\boldsymbol{k}_i)-g(\boldsymbol{k}_u+n\boldsymbol{k}_i)\approx\frac{d}{dn}g(\boldsymbol{k}_u+n\boldsymbol{k}_i)=\boldsymbol{k}_i\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\,g(\boldsymbol{k}_u+n\boldsymbol{k}_i). \tag{2.4.6}$$

Das ergibt

$$\begin{aligned}\frac{dK(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t)}{dt}&=\sum_{n=0}^{\hat{n}-1}\boldsymbol{k}_i\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\,g(\boldsymbol{k}_u+n\boldsymbol{k}_i)R(\boldsymbol{k}_u+n\boldsymbol{k}_i\rightarrow\boldsymbol{k}_u+(n+1)\boldsymbol{k}_i,t)\\&\quad+J_+(\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_i)-J_-(\boldsymbol{k}_o,\boldsymbol{k}_i).\end{aligned} \tag{2.4.7}$$

Um die Schreibweise etwas übersichtlicher zu gestalten, schreiben wir für $\boldsymbol{k}_u+n\boldsymbol{k}_i$ nur noch $\boldsymbol{k}$. Die Summe über n und die Argumente von K weisen darauf hin, daß über eine Gerade summiert wird, die bei $\boldsymbol{k}_u$ beginnt und in $\hat{n}$ $\boldsymbol{k}_i$-Schritten bei $\boldsymbol{k}_o$ endet. Damit erhalten wir:

$$\frac{dK(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t)}{dt}=\sum_{n=0}^{\hat{n}-1}\boldsymbol{k}_i\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\,g(\boldsymbol{k})R(\boldsymbol{k}\rightarrow\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_i,t)+J_+(\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_i)-J_-(\boldsymbol{k}_o,\boldsymbol{k}_i). \tag{2.4.8}$$

Erinnern wir uns jetzt an die Separierbarkeit der Raten, so können wir

$$\begin{aligned}\frac{dK(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t)}{dt}&=\sum_{n=0}^{\hat{n}-1}\boldsymbol{k}_i\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\,g(\boldsymbol{k})\omega(\boldsymbol{k}_i)h(\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{k},t)+J_+(\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_i)-J_-(\boldsymbol{k}_o,\boldsymbol{k}_i)\\&=\boldsymbol{k}_i\omega(\boldsymbol{k}_i)\sum_{n=0}^{\hat{n}-1}\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\,g(\boldsymbol{k})h(\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{k},t)+J_+(\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_i)-J_-(\boldsymbol{k}_o,\boldsymbol{k}_i)\end{aligned} \tag{2.4.9}$$

schreiben. Es folgt nun die gleiche Überlegung, wie in der eindimensionalen Theorie (vgl. Kapitel 2.1):

Wenn die Gewichtung $g(\boldsymbol{k})$ die Eigenwertgleichung

$$h(\boldsymbol{k})\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\,g(\boldsymbol{k})=\boldsymbol{a}g(\boldsymbol{k}) \tag{2.4.10}$$

erfüllt, dann entsteht für die zeitliche Änderung des Momentes K

$$\frac{dK(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t)}{dt}=\boldsymbol{a}\boldsymbol{k}_i\omega(\boldsymbol{k}_i)\sum_{n=0}^{\hat{n}-1}g(\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{k},t)+J_+(\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_i)-J_-(\boldsymbol{k}_o,\boldsymbol{k}_i). \tag{2.4.11}$$

Es ergibt sich bis auf den letzten Summationsindex, den wir vernachlässigen können, da der Bereich B , den wir herausgegriffen haben, sehr groß ist, wieder das Moment K, also die Momentengleichung für eine Gerade im $\boldsymbol{k}$-Raum:

$$\frac{dK(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t)}{dt} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{k}_i\omega(\boldsymbol{k}_i)K(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t) + J_+(\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_i) - J_-(\boldsymbol{k}_o,\boldsymbol{k}_i). \qquad (2.4.12)$$

Die Zeitskala ist hier durch das Skalarprodukt vom Eigenwert $\boldsymbol{a}$ und $\boldsymbol{k}_i$ $\omega(\boldsymbol{k}_i)$ gegeben. Letzteres hat die Dimension einer Geschwindigkeit im $\boldsymbol{k}$-Raum. Dieser wichtige Aspekt wird aber noch einmal in Kapitel 2.7 aufgegriffen. Die Momentengleichung einer Gerade soll nun auf eine Momentengleichung mehrerer Parallelen mit gleichem Richtungsvektor $\boldsymbol{k}_i$ erweitert werden. Da in der obigen Herleitung alle Operationen, die wir durchgeführt haben, linear sind, können wir einfach über die $\boldsymbol{k}_u$- und $\boldsymbol{k}_o$-Zustände summieren. Dabei wählen wir die Summationsgrenzen so, daß der Bereich B ganz überdeckt ist. Man beachte, daß über eine Gerade versetzt addiert werden muß, wenn durch Addition von $\boldsymbol{k}_i$ ein oder mehrere Zustände auf der Geraden übersprungen werden. Es ergibt sich dann:

$$K(\boldsymbol{k}_i,B,t) = \sum_{\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o} K(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_u,\boldsymbol{k}_o,t),$$

$$J_\pm(\boldsymbol{k}_i,\partial B) = \sum_{\boldsymbol{k}_{\substack{u\\o}}} J_\pm(\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_{\substack{u\\o}}),$$

$$\frac{dK(\boldsymbol{k}_i,B,t)}{dt} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{k}_i\omega(\boldsymbol{k}_i)K(\boldsymbol{k}_i,B,t) + J_+(\boldsymbol{k}_i,\partial B) - J_-(\boldsymbol{k}_i,\partial B). \qquad (2.4.13)$$

Ein wichtiger Aspekt ist, daß für verschiedene $\boldsymbol{k}_i$ alle Momente gleich sind, da wir dafür gesorgt haben, daß alle Zustände im Bereich B aufaddiert werden.

$$K(B,t) = K(\boldsymbol{k}_1,B,t) = K(\boldsymbol{k}_2,B,t) = \ldots \qquad (2.4.14)$$

Auf welche Art und Weise das getan wird (ob in Richtung $\boldsymbol{k}_i$=(1, 1) oder $\boldsymbol{k}_i$=(–3, 5) o.ä.), bleibt uns überlassen. Damit können wir nun alle Übergänge in der Mastergleichung berücksichtigen. Zusammengefaßt ergibt sich:

$$\begin{aligned}
K(B,t) &= \sum_B g(\boldsymbol{k}) f(\boldsymbol{k},t) \\
\frac{dK(B,t)}{dt} &= \sum_B g(\boldsymbol{k}) \frac{f(\boldsymbol{k},t)}{dt} \\
&= \sum_i \sum_B g(\boldsymbol{k}) \left[R(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}) - R(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) \right] \\
&= \sum_i \frac{dK(\boldsymbol{k}_i, B, t)}{dt}
\end{aligned}$$

Für jedes $\boldsymbol{k}_i$ summieren wir über B mit Hilfe der Parallelensummation. Man beachte dabei (2.4.13) und (2.4.14):

$$\begin{aligned}
\frac{dK(B,t)}{dt} &= \sum_i \left(\boldsymbol{a}\boldsymbol{k}_i \omega(\boldsymbol{k}_i) K(\boldsymbol{k}_i, B, t) + (J_+(\boldsymbol{k}_i, \partial B) - J_-(\boldsymbol{k}_i, \partial B)) \right) \\
&= \sum_i \boldsymbol{a}\boldsymbol{k}_i \omega(\boldsymbol{k}_i) K(B,t) + J_{net}(\partial B).
\end{aligned} \qquad (2.4.15)$$

Dabei wurden die letzten beiden Raten zur Netto-Übergangsrate über den Rand ∂B von B zusammengefaßt. Außerdem entsteht hier ein neuer wichtiger Vektor. Wir bezeichnen ihn mit:

$$\boxed{\boldsymbol{u} = \sum_i \boldsymbol{k}_i \omega(\boldsymbol{k}_i)} \qquad (2.4.16)$$

Er besitzt wie schon erwähnt im $\boldsymbol{k}$-Raum die Dimension einer Geschwindigkeit. Abbildung 2.4.2 soll eine Vorstellung von $\boldsymbol{u}$ geben. Durch die unterschiedlichen Übergangsraten hebt sich der Vektor nicht weg:

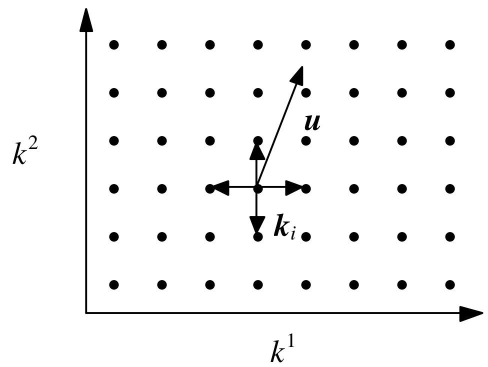

Abbildung 2.4.2: resultierender Geschwindigkeitsvektor für einen Zustand $\boldsymbol{k}$ im $\boldsymbol{k}$-Raum.

Dadurch entsteht die mehrdimensionale Momentengleichung

$$\boxed{\frac{dK(B,t)}{dt} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{u}K(B,t) + J_{net}(\partial B).} \qquad (2.4.17)$$

Diese Gleichung ist nur erfüllt, wenn die Gewichtung der Eigenwertgleichung

$$\boxed{h(\boldsymbol{k})\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\; g(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{a} g(\boldsymbol{k})} \tag{2.4.18}$$

gehorcht, die durch die lokale Abhängigkeit der Raten von den Ordnungsparametern $h(\boldsymbol{k})$ bestimmt ist. Die Zeitskala, die ein Maß für die Geschwindigkeit des Wachstums darstellt, ist durch das Skalarprodukt im $\boldsymbol{k}$-Raum $\boldsymbol{au}$ also die Projektion des Geschwindigkeitsvektors auf den Eigenwert $\boldsymbol{a}$ gegeben.

Es ist natürlich kein Problem, die Momentengleichung für K in Momentengleichungen für K_m mit

$$K_m(B,t) = \sum_B g_m(\boldsymbol{k}) f(\boldsymbol{k},t) \tag{2.4.19}$$

zu überführen. Sie lautet

$$\frac{dK_m(B,t)}{dt} = \boldsymbol{au}\, m K_{m-1}(B,t) + J_{net}\,, \tag{2.4.20}$$

mit der Bedingung

$$h(\boldsymbol{k})\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\; g_m(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{a} m g_{m-1}(\boldsymbol{k})\,. \tag{2.4.21}$$

Auch hier besteht wieder der in Kapitel 2.1 erkannte Zusammenhang zwischen K und K_m:

$$K(B,t) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} K_m(B,t) \tag{2.4.22}$$

2.5 Die Lösung der Gewichtungsbedingung

Bei der Eigenwertgleichung

$$h(\boldsymbol{k})\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\; g(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{a} g(\boldsymbol{k}) \tag{2.5.1}$$

handelt es sich um ein überbestimmtes Gleichungssystem aus p Gleichungen für nur eine Funktion $g(\boldsymbol{k})$, wie die Auflistung der Komponenten zeigt:

$$\begin{aligned} h(\boldsymbol{k})\frac{\partial g(\boldsymbol{k})}{\partial k^1} &= a^1 g(\boldsymbol{k}), \\ h(\boldsymbol{k})\frac{\partial g(\boldsymbol{k})}{\partial k^2} &= a^2 g(\boldsymbol{k}), \\ &\vdots \\ h(\boldsymbol{k})\frac{\partial g(\boldsymbol{k})}{\partial k^p} &= a^p g(\boldsymbol{k}). \end{aligned} \tag{2.5.2}$$

Durch die Substitution $g(\boldsymbol{k}) = \exp(\gamma(\boldsymbol{k}))$ erhält man das etwas einfachere Gleichungssystem

$$\begin{aligned} h(\boldsymbol{k})\frac{\partial \gamma(\boldsymbol{k})}{\partial k^1} &= a^1, \\ h(\boldsymbol{k})\frac{\partial \gamma(\boldsymbol{k})}{\partial k^2} &= a^2, \\ &\vdots \\ h(\boldsymbol{k})\frac{\partial \gamma(\boldsymbol{k})}{\partial k^p} &= a^p. \end{aligned} \tag{2.5.3}$$

Für den ersten Überblick betrachten wir die Funktionen γ und h von x und y ($p = 2$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \gamma}{\partial x} &= \frac{a_x}{h(x,y)}, \\ \frac{\partial \gamma}{\partial y} &= \frac{a_y}{h(x,y)}. \end{aligned} \tag{2.5.4}$$

Differenzieren wir die erste Gleichung nach y und die zweite Gleichung nach x, so muß nach dem Satz von Schwarz

$$\frac{\partial^2 \gamma}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 \gamma}{\partial y \partial x} \Rightarrow a_x \frac{\partial \frac{1}{h}}{\partial y} = a_y \frac{\partial \frac{1}{h}}{\partial x}$$

bzw.

$$a_x \frac{\partial h}{\partial y} = a_y \frac{\partial h}{\partial x} \tag{2.5.5}$$

gelten. Dies ist eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Lösbarkeit dieses Differentialgleichungssystems [6, S. 13].Damit erhält man für h auch eine Bedingungsgleichung, nämlich

$$\frac{\frac{\partial h}{\partial x}}{a_x} - \frac{\frac{\partial h}{\partial y}}{a_y} = 0. \tag{2.5.6}$$

Diese Gleichung ist für jede beliebige Funktion Φ erfüllt, die das Argument $a_x x + a_y y$ besitzt:

$$h = \Phi(a_x x + a_y y). \tag{2.5.7}$$

Für den mehrdimensionalen Fall ergibt sich

$$\frac{\left(\frac{\partial h}{\partial k^1}\right)}{a^1} = \frac{\left(\frac{\partial h}{\partial k^2}\right)}{a^2} = \ldots = \frac{\left(\frac{\partial h}{\partial k^p}\right)}{a^p}, \tag{2.5.8}$$

so daß

$$h = \Phi(\sum_{i=1}^{p} a_i k^i) = \Phi(\boldsymbol{ak}) \tag{2.5.9}$$

erfüllt sein muß. Die Funktion h darf also nur von einer Linearkombination der Parameter k^i abhängen. Diese Bedingung, die eine Forderung an die Einteilchenübergangsraten darstellt, besagt, daß die Raten im Prinzip nur von **einer** Größe im $\boldsymbol{k}$-Raum abhängen dürfen. Führt man nämlich eine Koordinatentransformation aus, in der $\boldsymbol{ak}$ eine neue Koordinate darstellt und alle anderen orthogonal dazu konstruiert werden (z.B. SCHMIDTsches Orthogonalisierungsverfahren [7, S. 147]), so besagt die Forderung an h, daß die Raten nur von der ersten Koordinate abhängen dürfen, womit das Momentenverfahren wieder auf eine Dimension zurückgesetzt wäre. Andererseits wird es nicht viele Probleme geben, in denen die Raten von $\boldsymbol{ak}$ abhängen. Die Anwendung dieses Momentenverfahrens auf eine mehrdimensionale Verteilungsfunktion ist somit nur für ganz spezielle Probleme möglich, jedoch nicht für einen komplizierten Staubwachstumsprozeß. Der Vollständigkeit halber sei noch gezeigt, daß die Koeffizienten der Linearkombination den Eigenwert der Differentialgleichung (2.5.1) darstellt. Die Differentialgleichung für $g(\boldsymbol{k})$ läßt sich leicht lösen, wenn $h(\boldsymbol{k})$ die Linearitätsbedingung erfüllt:

$$h(\boldsymbol{bk})\,\mathrm{grad}_k\, g(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{a} g(\boldsymbol{k}). \tag{2.5.10}$$

Mit dem Ansatz

$$g(\boldsymbol{k}) = w(\boldsymbol{bk}) \tag{2.5.11}$$

entsteht

$$h(\boldsymbol{bk}) w'(\boldsymbol{bk})\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a} w(\boldsymbol{bk})\,. \tag{2.5.12}$$

Setzt man nun $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}$ muß für

$$w(\boldsymbol{bk}) = \int \frac{d(\boldsymbol{bk})}{h(\boldsymbol{bk})} \tag{2.5.13}$$

gelten, um die Gewichtungsbedingung zu erfüllen.

Ein Beispiel, welches die Linearitätsbedingung erfüllt, ist, wie schon erwähnt, Wachstum von Staub unterschiedlicher Zusammensetzung, unter der Annahme, daß die Raten nur von der Größe des Staubkorns abhängen. Dieses Problem wird später in den Anwendungen (Kapitel 3.3) behandelt. Viele andere astrophysikalische Staubwachstumsprobleme erfüllen diese Bedingung meist nicht.

2.6 Spezialfall für ein Momentensystem

Für folgenden Spezialfall ist es möglich ein Momentenverfahren für eine Verteilungsfunktion mit mehreren Dimensionen zu bilden. Es dürfen nur voneinander unabhängige Übergänge existieren. Die Übergangsvektoren $\boldsymbol{k}_i$ müssen alle von der Form

$$\boldsymbol{k}_i = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \text{ oder } \boldsymbol{k}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ b \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \text{ oder } \ldots \text{ oder } \boldsymbol{k}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ x \end{pmatrix} \tag{2.6.1}$$

sein, d.h. es gibt keine gemischten Übergänge zwischen den einzelnen Ordnungsparametern. Wenn wir eine solche Mastergleichung haben, können wir ein System von Momentengleichungen aufstellen. Beschränken wir uns auf ein System von zwei Ordnungsparametern, dann hat die Mastergleichung folgende Form:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(k^1,k^2,t)}{\partial t} &= \sum_i \left[R_1(k^1 - k_i^1 \to k^1, k^2) - R_1(k^1 \to k^1 + k_i^1, k^2) \right] \\ &+ \sum_j \left[R_2(k^1, k^2 - k_j^2 \to k^2) - R_2(k^1, k^2 \to k^2 + k_j^2) \right] \end{aligned} \tag{2.6.2}$$

An die Einteilchenübergangsrate wird jetzt wieder die Bedingung der Separierbarkeit gestellt:

$$\begin{aligned} R_1(k^1 \to k^1 + k_i^1, k^2) &= \omega_1(k_i^1) h_1(k^1) f(k^1, k^2, t), \\ R_2(k^1, k^2 \to k^2 + k_i^2) &= \omega_2(k_i^2) h_2(k^2) f(k^1, k^2, t). \end{aligned} \tag{2.6.3}$$

Jetzt definieren wir uns das Moment K durch

$$K(t) = \sum_{k^1 = k_u^1}^{k_o^1} \sum_{k^2 = k_u^2}^{k_o^2} g_1(k^1) g_2(k^2) f(k^1, k^2, t). \tag{2.6.4}$$

Diese Größe wird nach der Zeit abgeleitet. Dadurch erhält man die Zeitableitung der Verteilungsfunktion, die wiederum durch die Mastergleichung ersetzt wird:

$$\frac{dK(t)}{dt} = \sum_{k^1} \sum_{k^2} g_1(k^1) g_2(k^2) \left(\sum_i (R_1(\boldsymbol{k}) - R_1(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i)) + \sum_j (R_2(\boldsymbol{k}) - R_2(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_j)) \right) \tag{2.6.5}$$

Da die i-Summation nur k^1 ändert und die j-Summation nur k^2, kann nach Auflösen der Klammer der jeweils andere Parameter als konstant angesehen werden. Über diesen wird summiert. Man erhält folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned}\frac{dK(t)}{dt} &= \sum_i \sum_{k^2} g_2(k^2) \sum_{k^1} \Big(g_1(k^1 + k_i^1) - g_1(k^1) \Big) R_1(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) \\ &+ \sum_j \sum_{k^1} g_1(k^1) \sum_{k^2} \Big(g_2(k^2 + k_j^2) - g_2(k^2) \Big) R_2(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_j) \\ &+ J_{0.}\end{aligned} \tag{2.6.6}$$

Dabei sind in J_0 wieder alle mit g_1 und g_2 gewichteten Raten zusammengefaßt, die in den betrachteten Bereich ein- bzw. austreten. Setzt man nun die Bedingungen für die Raten ein und führt die Taylor-Näherung durch, kommt man auf die Momentengleichung:

$$\frac{dK(t)}{dt} = \left(\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \right) K(t) + J_0. \tag{2.6.7}$$

Die Zeitskalen sind gegeben durch

$$\frac{1}{\tau_1} = \sum_i k_i^1 \omega(k_i^1) \text{ und } \frac{1}{\tau_2} = \sum_j k_j^2 \omega(k_j^2) \tag{2.6.8}$$

und die Gewichtungen gehorchen den Bedingungen

$$\begin{aligned}\frac{dg_1(k^1)}{dk^1} h_1(k^1) &= g_1(k^1), \\ \frac{dg_2(k^2)}{dk^2} h_2(k^2) &= g_2(k^2).\end{aligned} \tag{2.6.9}$$

Die Anwendungsmöglichkeiten dieses Verfahrens sind eher spärlich. In der Regel hat man es mit gemischten Übergängen zu tun. Sobald diese auftreten, muß man eine Taylor-Entwicklung für das Produkt $g_1 g_2$ durchführen, was wieder auf einen Gradienten führt, der wieder die Linearitätseigenschaft von den Raten fordert. Das in diesem Kapitel vorgestellte Verfahren entspricht einer Durchführung von zwei aufeinanderfolgenden Momentenverfahren und ist somit nichts prinzipiell Neues. In Kapitel 2.9 wird noch ein weitere Zugang zu den Momentengleichungen vorgestellt.

2.7 Das Geschwindigkeitsfeld im k-Raum

Weil das hier vorgestellte Momentenverfahren für eine mehrdimensionale Verteilungsfunktion so starken Einschränkungen unterworfen ist, sollen im Folgenden weitere Möglichkeiten zur Beschreibung der Staubbildung mittels einer mehrdimensionalen Staubverteilungsfunktion untersucht werden. Dabei scheint die quasikontinuierliche Näherung des Momentenverfahrens die richtige Vorgehensweise zu sein. Nehmen wir dazu an, wir hätten ein fiktives Staubwachstumsproblem mit $h(\boldsymbol{k}) \equiv 1$ gelöst. Welche Bedeutung hat dann $\boldsymbol{u} = \sum_i \omega(\boldsymbol{k}_i)\boldsymbol{k}_i$ und was bedeutet $\boldsymbol{au}$ in der Momentengleichung? Untersucht man die physikalischen Dimensionen, so ist $[\omega]$=1/s. $\boldsymbol{k}_i$ hat die Dimension des $\boldsymbol{k}$-Raumes, womit $\omega(\boldsymbol{k}_i)\boldsymbol{k}_i$ die Dimension $\boldsymbol{k}$-Raum durch Sekunde also Geschwindigkeit im $\boldsymbol{k}$-Raum hat.

Durch $h(\boldsymbol{k}) \equiv 1$ ist der Eigenvektor $\boldsymbol{a}$ wegen $\operatorname{grad}_k g(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{a}g(\boldsymbol{k})$ beliebig. Die Lösung für diese Differentialgleichung ist $g(\boldsymbol{k}) = \exp(\boldsymbol{ak})$. Daraus folgt für die indizierte Gewichtung

$$g_m(\boldsymbol{k}) = (\boldsymbol{ak})^m . \qquad (2.7.1)$$

Um die Momente für verschiedene Vektoren unterscheiden zu können, schreiben wir $K_m^{\boldsymbol{a}}$ für das m-te Moment, das durch den Vektor $\boldsymbol{a}$ gegeben ist. Für $m = 0$ unterscheiden sich die Momente bezüglich der Vektoren nicht:

$$K_0^{\boldsymbol{a}} = \sum_B (\boldsymbol{ak})^0 f(\boldsymbol{k}) = \sum_B f(\boldsymbol{k}) = K_0 . \qquad (2.7.2)$$

K_0 steht für die im Bereich B enthaltenen Staubkörner. Betrachten wir nun die Momentengleichung für $m = 1$ und zwei Vektoren

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und } \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Sie lauten:

$$\begin{aligned} \frac{dK_1^{\boldsymbol{a}}}{dt} &= \boldsymbol{au}K_0 \\ \frac{dK_1^{\boldsymbol{b}}}{dt} &= \boldsymbol{bu}K_0 \end{aligned} \quad \text{mit } \boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}. \qquad (2.7.3)$$

Legen wir jetzt das Beispiel mit dem SiO-Staub zugrunde, dann steht $K_1^{\boldsymbol{a}}$ für die Zahl der im Staub enthaltenen Si-Atome:

$$K_1^a = \sum_B (\boldsymbol{ak}) f(\boldsymbol{k}) = \sum_B \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_{Si} \\ N_o \end{pmatrix} \right] f(N_{Si}, N_O) = \sum_B N_{Si} f(N_{Si}, N_O) = Z_{Si}. \qquad (2.7.4)$$

Demgegenüber steht K_1^b für die im Staub enthaltenen O-Atome. Eliminieren wir nun in den beiden Momentengleichungen (2.7.3) die Staubdichte K_0 dann erhalten wir mit (2.7.4)

$$\frac{\dot{Z}_{Si}}{\dot{Z}_O} = \frac{u_1}{u_2}. \qquad (2.7.5)$$

Der Quotient der $\boldsymbol{u}$-Komponenten gibt demnach das Verhältnis der Wachstumsgeschwindigkeiten an. Nach einer gewissen Zeit Δt ist also Z_{si} um $u_1\Delta t$ und Z_O um $u_2\Delta t$ angewachsen. Ist im allgemeinen Falle $h(\boldsymbol{k})$ nicht identisch 1, dann ist $\boldsymbol{a}$ auch nicht mehr frei wählbar. Das Skalarprodukt von $\boldsymbol{au}$ ist dann die charakteristische Zeitskala, mit der der Wachstumsprozeß stattfindet. Der Geschwindigkeitsvektor wird auf den Eigenwert projiziert.

Diese Motivationen zeigen uns, daß die charakteristische Prozeßgröße aus einem Geschwindigkeitsvektor im Bereich B des $\boldsymbol{k}$-Raumes hervorgeht. Wenn wir jetzt die Separationsbedingung

$$\omega(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) = \omega(\boldsymbol{k}_i) h(\boldsymbol{k}) \qquad (2.7.6)$$

fallenlassen und uns den Vektor

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k}) = \sum_i \boldsymbol{k}_i \omega(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) \qquad (2.7.7)$$

definieren, dann erhalten wir mit $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k})$ ein Geschwindigkeitsfeld im $\boldsymbol{k}$-Raum. Führen wir dann wie in der Kontinuumsmechanik eine lokale Bilanzgleichung durch, indem wir für jedes Volumenelement des $\boldsymbol{k}$-Raumes die zu- und abfließenden Ströme betrachten, müßten wir eine Kontinuitätsgleichung für die Verteilungsfunktion $f(\boldsymbol{k}, t)$ erhalten.

2.8 Die Kontinuitätsgleichung

Für die Überführung der Mastergleichung in eine Kontinuitätsgleichung, muß noch eine Vorbereitung getroffen werden. Sie betrifft die Unterteilung der physikalischen und chemischen Prozesse in kontinuierliche und nichtkontinuierliche Prozesse, wie es z.B. KRÜGER et al. getan haben ([4] S.594). In Verallgemeinerung auf beliebige Ordnungsparameter sind kontinuierliche Prozesse jene Prozesse, die dafür sorgen, daß ein Staubkorn durch diesen Prozeß sowohl **in** als auch **aus** einen Zustand gebracht werden kann, wobei der Schrittvektor $\boldsymbol{k}_i$ gleich bleibt (dazu gehören z.B. homogenes und heterogenes Wachstum, thermische Verdampfung und Drift). Alle anderen Prozesse sind nichtkontinuierlich also z. B. Spallation, Koagulation und Teilchenentstehung. Betrachten wir als Beispiel die Spallation. Ein Teilchen der Größe N wird in zwei Teilchen der Größe N_1 und N_2 gespalten. Um aber ein Teilchen der Größe N durch Spallation zu bilden, muß ein größeres Teilchen N_x in N und N_y zerfallen. x und y können aber beliebig sein. Es gibt also keinen analogen Prozeß dazu. Beim homogenen Wachstum hingegen ist die Sache eindeutig. Dem hinzufügen eines Monomers zu einem Teilchen der Größe N ist dem hinzufügen eines Monomers zu einem Teilchen der Größe N - N_{mon} äquivalent. Dieser Prozeß ist somit kontinuierlich.

Für die Ableitung einer Kontinuitätsgleichung aus einer Mastergleichung wird eine lineare Näherung der Reaktionsraten mit Hilfe der TAYLOR-Näherung[5] durchgeführt:

$$R(\boldsymbol{k} \rightarrow \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) - R(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_i \rightarrow \boldsymbol{k}) \approx \boldsymbol{k}_i \operatorname{grad}_k \left(R(\boldsymbol{k} \rightarrow \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) \right), \tag{2.8.1}$$

für $|\boldsymbol{k}_i| << |\boldsymbol{k}|$, dabei setzen wir zunächst nur kontinuierliche Prozesse voraus. Die eckige Klammer der Mastergleichung

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} = \sum_i \left[R(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_i \rightarrow \boldsymbol{k}) - R(\boldsymbol{k} \rightarrow \boldsymbol{k}_i + \boldsymbol{k}) \right] \tag{2.8.2}$$

kann nun mit Hilfe der Näherung (2.8.1) substituiert werden:

[5] $f(\boldsymbol{x} \pm \boldsymbol{a}) = f(\boldsymbol{x}) \pm \boldsymbol{a} \operatorname{grad} f(\boldsymbol{x})$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} &= -\sum_i \boldsymbol{k}_i \operatorname{grad}_{\boldsymbol{k}}\big(R(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_i)\big),\\
\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} &= -\operatorname{div}_{\boldsymbol{k}}\left(\sum_i \boldsymbol{k}_i \omega(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_i) f(\boldsymbol{k},t)\right),\\
\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} &= -\operatorname{div}_{\boldsymbol{k}}\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k}) f(\boldsymbol{k},t)\big).
\end{aligned} \tag{2.8.3}$$

Durch die nächste Umformung erhält die Kontinuitätsgleichung die bekannte Form [12, S.463]:

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} + \operatorname{div}_{\boldsymbol{k}}\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k}) f(\boldsymbol{k},t)\big) = 0\,. \tag{2.8.4}$$

Der $\boldsymbol{k}$-Index an den Differentialoperatoren soll immer daran erinnern, daß hier nach den Parametern der Verteilungsfunktion differenziert wird. Die räumliche Divergenz ist nur dann in der Kontinuitätsgleichung enthalten, wenn als Parameter der Ort $\boldsymbol{r}$ des Staubkorns auftritt. Ohne großen Aufwand können nun auch nichtkontinuierliche Prozesse wie Spallation und Koagulation berücksichtigt werden, indem wir bei der Kontinuitätsgleichung lokale Quellen zulassen. Die allgemeinste Form erhält man, wenn man zusätzlich die Quellen und die Reaktionsraten zeitabhängig macht:

$$\boxed{\begin{array}{ll}
\text{a)} & \dfrac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} + \operatorname{div}_{\boldsymbol{k}}\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t) f(\boldsymbol{k},t)\big) = q(\boldsymbol{k},t)\\
\text{mit} & \\
\text{b)} & \boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t) = \sum_i \boldsymbol{k}_i \omega(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_i, t).
\end{array}} \tag{2.8.5}$$

Mastergleichung und Kontinuitätsgleichung beschreiben also das gleiche statistische System nur aus verschiedenen Blickwinkeln. Die Mastergleichung betrachtet die Verhältnisse im Kleinen durch eine Ratenbilanz für jeden Zustand. Bei der Kontinuitätsgleichung wird das System „aus der Ferne“ betrachtet ($|\boldsymbol{k}| >> |\boldsymbol{k}_i|$). Einzelne Übergänge sind nicht mehr interessant und die Raten verschwimmen zu einem Geschwindigkeitsfeld. Die Kontinuitätsgleichung läßt sich umwandeln in ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem mit p + 1 Gleichungen (p - Zahl der Ordungsparameter) erster Ordnung, was im Anhang B ausführlich beschrieben ist. Der numerischen Behandlung ist ein eigenes Kapitel (2.9) gewidmet.

Für den allgemeinen Fall können wir folgende Schlußfolgerung ziehen: Wird zur Zeit t_0 eine Anfangsverteilung $f_0(\boldsymbol{k}, t_0)$ vorgegeben, so ist die zeitliche Entwicklung von $f(\boldsymbol{k}, t)$ durch die Kontinuitätsgleichung (2.8.5a) gegeben. Das Geschwindigkeitsfeld $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k}, t)$ wird aus den einfachen Übergangsraten $\omega(\boldsymbol{k} \rightarrow \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i,\ t)$ gemäß der Relation (2.8.5b) gebildet. $f(\boldsymbol{k},\ t)$ ist durch die Kontinuitätsgleichung und der Anfangsbedingung eindeutig bestimmt im Sinne der Sätze aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen [6]. Das Geschwindigkeitsfeld sollte zu einer einfachen analytischen Größe genähert werden, damit sich die Berechnungen der Verteilungsfunktion vereinfachen. Rechnet man mit der exakten Summe, stellt das kontinuumsmechanische Verfahren bei einer numerischen Berechnung unter Umständen keine Verbesserung dar.

Wie man mit der kontinuumsmechanischen Methode die Staubverteilungsfunktion berechnet, soll im Folgenden gezeigt werden, wobei wir uns zunächst auf die bekannte eindimensionale Verteilungsfunktion $f(N,\ t)$ beschränken. Wir nehmen dazu homogenes homomolekulares Wachstum an (siehe auch [3]). Die Raten sind ($k = N$, $k_i = \pm i$):

$$\begin{aligned} R(N-i \rightarrow N,t) &= A_{N-i} f(i,t) v_{i,N-i} \alpha(N-i,i) f(N-i,t), \\ R(N \rightarrow N+i,t) &= A_N f(i,t) v_{i,N} \alpha(N,i) f(N,t), \\ R(N \rightarrow N-i,t) &= A_N \beta(N,i) f(N,t), \\ R(N+i \rightarrow N,t) &= A_{N+i} \beta(N+i,i) f(N+i,t). \end{aligned} \tag{2.8.6}$$

Dabei bedeuten:

A_N - die Oberfläche eines Staubkorns der Größe N,

$v_{i,N}$ - die Relativgeschwindigkeit zwischen den Stoßpartnern,

$\alpha(N,i)$ - die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen der Größe i an einem Teilchen der Größe N haften bleibt und

$\beta(N,i)$ - die Rate, mit der ein i-Teilchen von der Oberfläche eines N-Teilchens verdampft.

Die Einteilchenübergangsraten sind demnach:

$$\begin{aligned} \omega(N-i \rightarrow N,t) &= A_{N-i} f(i,t) v_{i,N-i} \alpha(N-i,i), \\ \omega(N \rightarrow N+i,t) &= A_N f(i,t) v_{i,N} \alpha(N,i), \\ \omega(N \rightarrow N-i,t) &= A_N \beta(N,i), \\ \omega(N+i \rightarrow N,t) &= A_{N+i} \beta(N+i,i). \end{aligned} \tag{2.8.7}$$

Die Wachstumsgeschwindigkeit ist dann

$$\begin{aligned} u(N,t) &= \sum_{i=-I}^{I} i\omega(N \rightarrow N+i,t), \\ &= \sum_{i=1}^{I} iA_N \left(f(i,t) v_{i,N} \alpha(N,i) - \beta(N,i) \right). \end{aligned} \tag{2.8.8}$$

Für große N kann man noch A_N mit

$$A_N = A_0 N^{\frac{d-1}{d}} \tag{2.8.9}$$

nähern, wobei d die räumliche Dimension der Staubkörner bezeichnet. Man erhält dann mit

$$\frac{1}{\tau(N,t)} = \sum_{i=1}^{I} i\Big(f(i,t)v_{i,N}\alpha(N,i) - \beta(N,i)\Big) \tag{2.8.10}$$

das einfach aussehende Geschwindigkeitsfeld

$$u(N) = \frac{1}{\tau(N,t)} N^{\frac{d-1}{d}}\,. \tag{2.8.11}$$

Für große N hängt τ nicht von N ab (vgl. [3], S. 163, Gl. (73)). Ferner wollen wir voraussetzen, daß τ zeitunabhängig ist. Dies würde bedeuten, daß immer gleichbleibend Wachstumsspezien vorhanden sind und kein Verbrauch auftritt.

Die Kontinuitätsgleichung ergibt sich damit zu

$$\frac{\partial f(N,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{1}{\tau} N^{\frac{d-1}{d}} f(N,t)\right) = q(N,t). \tag{2.8.12}$$

Die Keimbildungsrate spiegelt sich hier in den Quellen $q(N,\ t)$ wider. Wir nehmen dazu an, daß im Größenraum an der Stelle N_* Staubkörner mit der Rate J_* produziert werden. Dies müssen wir tun, da unsere Forderung war, daß die Übergänge klein im Vergleich zur betrachteten Staubkorngröße sind, wodurch der Bereich B, in dem die TAYLOR-Näherung durchführbar ist, weit vom Nullpunkt entfernt ist und somit die Keimbildung eigentlich nicht stattfinden könnte. Für die Quellen setzen wir also

$$q(N) = J_*\delta(N - N_*) \tag{2.8.13}$$

an. Damit erhalten wir folgende Differentialgleichung:

$$\frac{\partial f(N,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial N} j(N,t) = J_*\delta(N - N_*). \tag{2.8.14}$$

j stellt den Strom (im $\boldsymbol{k}$-Raum) $\boldsymbol{uf}$ dar. Es ist bei einem stationärem Problem mit einem Parameter sinnvoll, die Gleichung für den Strom und nicht für die Verteilungsfunktion zu lösen. Dazu wird die Kontinuitätsgleichung mit $u(N)$ multipliziert:

$$\frac{\partial j}{\partial t} + u(N)\frac{\partial j}{\partial N} = u(N)\, J_* \delta(N - N_*)\,. \tag{2.8.15}$$

Bei mehr als einem Ordnungsparameter ist diese Vorgehensweise keine nennenswerte Vereinfachung, da dann ein gekoppeltes System von partiellen Differentialgleichungen entsteht. Für die Differentialgleichung (2.8.15) erhalten wir als charakteristische Gleichungen (siehe Anhang B)

$$\begin{aligned} &\frac{dt}{ds} = 1, \\ &\frac{dN}{ds} = u(N) = \frac{1}{\tau} N^{\frac{d-1}{d}}, \\ &\frac{dj}{ds} = u(N)\, J_* \delta(N - N_*) = \frac{1}{\tau} N^{\frac{d-1}{d}} J_* \delta(N - N_*). \end{aligned} \tag{2.8.16}$$

Daraus eliminieren wir s, wodurch die ersten beiden Gleichungen auf

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{\tau} N^{\frac{d-1}{d}}, \tag{2.8.17}$$

und die zweiten beiden Gleichungen auf

$$\frac{dj}{dN} = J_* \delta(N - N_*) \tag{2.8.18}$$

gebracht werden. In (2.8.17) wird die Deutung des Geschwindigkeitsfeldes voll unterstützt. Die Integration der Gleichungen (2.8.17) und (2.8.18) liefert

$$\begin{aligned} d \cdot \tau \left(N^{\frac{1}{d}} - N_0^{\frac{1}{d}} \right) &= t - t_0, \\ j - j_0 &= J_*, \end{aligned} \tag{2.8.19}$$

der Anfangszeitpunkt t_0 wird null gesetzt. Man erhält

$$\begin{aligned} N_0^{\frac{1}{d}} &= N^{\frac{1}{d}} - \frac{t}{d\tau}, \\ j_0 &= j - J_*. \end{aligned} \tag{2.8.20}$$

Die beiden Konstanten j_0 und N_0 müssen nun durch eine beliebige Anfangsverteilung $j_0 = \tilde{\Phi}(N_0)$ zusammenhängen. Da aber in der Regel nicht die anfängliche Stromverteilung j_0 sondern die anfängliche Größenverteilung f_0 gegeben ist, lautet der Zusammenhang zwischen den Konstanten wegen $j_0 = u_0 f_0$

$$j_0 = \frac{1}{\tau} N_0^{\frac{d-1}{d}} \Phi(N_0, t_0 = 0)\,. \tag{2.8.21}$$

Damit ergibt sich die Lösung für den Strom nachdem man N_0 eliminiert hat:

$$j = J_* + \frac{1}{\tau}\left(N^{\frac{1}{d}} - \frac{t}{d\tau}\right)^{d-1} \Phi\left(\left(N^{\frac{1}{d}} - \frac{t}{d\tau}\right)^{d}\right). \tag{2.8.22}$$

Die Verteilungsfunktion erhält man, wenn man diese Gleichung noch durch die Geschwindigkeit teilt:

$$\boxed{f(N,t) = \tau N^{\frac{1-d}{d}} J_* + \left(\frac{N^{\frac{1}{d}} - \frac{t}{d\tau}}{N^{\frac{1}{d}}}\right)^{d-1} \Phi\left(\left(N^{\frac{1}{d}} - \frac{t}{d\tau}\right)^{d}\right)} \tag{2.8.23}$$

Dies ist die allgemeine Lösung für Staubwachstumsprobleme mit der Keimbildungsrate J_* und der konstanten Zeitskala τ. Geht man noch davon aus, daß zu Beginn des Staubbildungsprozesses kein Staub vorhanden war, muß die Anfangsverteilung identisch null gesetzt werden. Dieses Problem ist dann durch

$$f(N,t) = \tau N^{\frac{1-d}{d}} J_* \tag{2.8.24}$$

gelöst.

Bei diesem Beispiel war der Geschwindigkeitsvektor $\boldsymbol{u}$ vollständig bekannt. Das ist aber nicht immer der Fall. Oft ist nur die zeitliche Ableitung des Geschwindigkeitsvektors bekannt. Wir kommen auf dieses Problem in Teil 3 bei den Anwendungen zu sprechen.

2.9 Das Momentenverfahren über die Kontinuitätsgleichung

Mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung ist es auch möglich ein System von Momentengleichungen aufzustellen. Ausgegangen wird von der Gleichung (2.8.5)

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t}+\operatorname{div}_k\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t)f(\boldsymbol{k},t)\big)=q(\boldsymbol{k},t)\,, \tag{2.9.1}$$

die über einen Bereich des $\boldsymbol{k}$-Raumes mit der zeitunabhängigen Gewichtung $g(\boldsymbol{k})$ multipliziert und danach integriert wird:

$$\iiint g(\boldsymbol{k})\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t}+\operatorname{div}_k\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t)f(\boldsymbol{k},t)\big)\right]d^p\boldsymbol{k}=\iiint g(\boldsymbol{k})q(\boldsymbol{k},t)d^p\boldsymbol{k}\,. \tag{2.9.2}$$

Die rechte Seite der Gleichung wird mit $Q(t)$ abgekürzt. Auf der linken Seite kann die Gewichtung in die Zeitableitung gezogen werden. Dadurch erhält man die zeitliche Änderung des Momentes $K(t)=\iiint g(\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{k},t)d^p\boldsymbol{k}$:

$$\iiint\left(\frac{\partial g(\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t}+g(\boldsymbol{k})\operatorname{div}_k\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t)f(\boldsymbol{k},t)\big)\right)d^p\boldsymbol{k}=Q(t)\,,$$

$$\frac{dK(t)}{dt}+\iiint g(\boldsymbol{k})\operatorname{div}_k\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t)f(\boldsymbol{k},t)\big)d^p\boldsymbol{k}=Q(t)\,. \tag{2.9.3}$$

Das Integral in (2.9.3) muß noch weiter umgeformt werden. Es gilt (ohne Argumente):

$$g\operatorname{div}\boldsymbol{j}=\operatorname{div}(g\boldsymbol{j})-\boldsymbol{j}\operatorname{grad}g\,. \tag{2.9.4}$$

Dabei wurde zur Abkürzung $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{u}f$ gesetzt. Dadurch ergibt sich:

$$\frac{dK(t)}{dt}+\iiint\big(\operatorname{div}_k(g\boldsymbol{u}f)-\boldsymbol{u}f\operatorname{grad}_k g\big)d^p\boldsymbol{k}=Q(t)\,. \tag{2.9.5}$$

Nach dem GAUSSschen Satz kann das Volumenintegral über die Divergenz in ein Oberflächenintegral überführt werden. Für diesen Term erhält man folgenden Ausdruck:

$$\iiint\operatorname{div}_k(g\boldsymbol{u}f)d^p\boldsymbol{k}=\oiint\big(g\boldsymbol{u}f\big)d^{p-1}\sigma\,. \tag{2.9.6}$$

Dies bezeichnet den gesamten aus dem Volumen austretenden Strom, der mit $g(\boldsymbol{k})$ gewichtet ist. Wir bezeichnen ihn mit $-J(t)$ (J steht also für den gewichteten einfallenden Gesamtstrom). Aus (2.9.5) wird dann

$$\frac{dK(t)}{dt} = \iiint \big(f(\boldsymbol{k},t)\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t)\,\mathrm{grad}_k\, g(\boldsymbol{k}) \big) d^p\boldsymbol{k} + J(t) + Q(t)\,. \tag{2.9.7}$$

Es müssen nun zwei Bedingungen gestellt werden, damit daraus eine einfache Momentengleichung wird. Zum ersten muß die Gewichtung die Bedingung

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t)\,\mathrm{grad}_k\, g(\boldsymbol{k}) = g(\boldsymbol{k}) \tag{2.9.8}$$

erfüllen, damit das letzte ausbleibende Integral wieder in das Moment K verwandelt werden kann. Das ist aber nur dann sinnvoll, wenn der Geschwindigkeitsvektor $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},\ t)$ in einen zeitabhängigen skalaren Teil $\omega(t)$ und einen parameterabhängigen vektoriellen Teil $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{k})$ separierbar ist. Dies ist die zweite Bedingung. In (2.9.8) würde die Gewichtung zeitabhängig werden, was im Widerspruch zur Annahme steht[6]. Die Bedingungen lauten demnach

$$\begin{aligned} &\text{a) } \boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t) = \omega(t)\boldsymbol{h}(\boldsymbol{k}) \\ &\text{b) } \boldsymbol{h}(\boldsymbol{k})\,\mathrm{grad}_k\, g(\boldsymbol{k}) = g(\boldsymbol{k}) \end{aligned} \tag{2.9.9}$$

Damit ergibt sich für die Momentengleichung

$$\frac{dK(t)}{dt} = \omega(t)K(t) + J(t) + Q(t)\,. \tag{2.9.10}$$

$Q(t)$ kann nun als der durch die nichtkontinuierlichen Prozesse geleistete Beitrag zur Momentenänderung (gewichtet mit g) gedeutet werden. Diese gehen additiv in die Momentengleichung ein, was nicht verwunderlich ist, da die kontinuierlichen und nichtkontinuierlichen Prozesse über die Raten additiv entkoppelt worden waren. $J(t)$ ist der von außen zuströmende Teil der kontinuierlichen Prozesse und vergleichbar mit der Keimbildungsrate im Teilchenzahlformalismus. Die ganze Herleitung ist analog mit indizierten Momenten und Gewichtungen möglich. Im Gegensatz zu der vorher behandelten Gewichtungsbedingung stellt (2.9.9b) eine Gleichung für eine Unbekannte dar. Sie ist daher nicht überbestimmt wie es bei der Gleichung (2.5.1) der Fall war und stellt somit keine Forderungen an $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{k})$. Der Grund dafür liegt in der Definition des Geschwindigkeitsfeldes (2.8.5), in der die Raten zu einem Vektor zusammengefaßt werden und dadurch das Skalarprodukt mit dem Gradienten in (2.9.9b) entsteht[7]. Die

[6] Der Grund für die Zeitunabhängigkeit der Gewichtung bestand darin, daß das Moment sich nur dann zeitlich ändern soll, wenn sich die Verteilungsfunktion zeitlich ändert, da die Momente den Zustand des Staubes repräsentieren sollen.

[7] In der anderen Herleitung der Momentengleichung (Kapitel 2.4) erhielten wir das Produkt des Gradienten mit einer skalaren Funktion.

einzig übrigbleibende Forderung ist die Separation des Geschwindigkeitsvektors. Für den eindimensionalen Fall ergibt sich wieder die in Kapitel 2.1 betrachtete Situation.

Eine weitere Aufspaltung des Geschwindigkeitsvektors ist nicht sinnvoll: Mit

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t) = \omega_1(t)\boldsymbol{h}_1(\boldsymbol{k}) + \omega_2(t)\boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{k}) \tag{2.9.11}$$

läßt sich zwar eine weitere Momentengleichung aufstellen

$$\frac{dK(t)}{dt} = \omega_1(t)K_1(t) + \omega_2(t)K_2(t) + J(t) + Q(t)\,, \tag{2.9.12}$$

jedoch müssen dann folgende Gleichungen erfüllt sein:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{h}_1(\boldsymbol{k})\,\mathrm{grad}_k\, g(\boldsymbol{k}) &= g_1(\boldsymbol{k}) \\ \boldsymbol{h}_2(\boldsymbol{k})\,\mathrm{grad}_k\, g(\boldsymbol{k}) &= g_2(\boldsymbol{k}) \end{aligned} \tag{2.9.13}$$

Dies sind zwei Gleichungen mit drei Unbekannten. Somit ist das System unterbestimmt. Diese Methode ist nur dann anwendbar, wenn ein Moment und deren zeitliche Entwicklung auf andere Art und Weise bekannt sind. In der Regel sollen jedoch gerade diese Eigenschaften des Staubes berechnet werden.

Um also Momentengleichungen aufstellen zu können, muß für jedes Problem die Bedingung (2.9.9a) geprüft und ggf. genähert werden. Dann müssen (2.9.9b) gelöst und die sich ergebenden Momente physikalisch gedeutet werden. Allerdings ist schon die Berechnung von Staubwachstum und Drift mit dieser Methode nicht durchführbar, da der Geschwindigkeitsvektor $\boldsymbol{u}$ aus Momentangeschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ und Wachstumsgeschwindigkeit τ zusammengesetzt ist. Diese haben völlig verschiedene funktionale Zeitabhängigkeiten, so daß sie nicht von den Komponenten entkoppelt werden können.

Gleichung (2.9.9b) stellt, wie die Kontinuitätsgleichung, eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung dar. Das analytische Problem bleibt daher mit Ausnahme der Zeitabhängigkeit das Gleiche. Allerdings hat man nach Lösung der Gleichung (2.9.9b) das Problem noch nicht gelöst. Im Gegensatz zur Kontinuitätsgleichung, bei der das Resultat nach Integrieren der Charakteristiken vorliegt, muß zusätzlich die Momentengleichung gelöst werden. Dann kommt noch hinzu, daß die Momente möglicherweise keine physikalische Interpretation finden. Es ist daher ratsam, gleich die Kontinuitätsgleichung zu lösen.

2.10 Numerische Behandlung der Kontinuitätsgleichung nach der Charakteristikenmethode

Es gibt genügend Staubwachstumsprobleme, bei denen die Raten für eine analytische Behandlung zu kompliziert sind (siehe z.B. [4]) und daher Kontinuitätsgleichung nur numerisch zu lösen ist. Es sollen in diesem Kapitel zwei Möglichkeiten der numerischen Behandlung vorgestellt werden. Die Erste löst die Kontinuitätsgleichung über das Charakteristikenverfahren, das auch bei der analytischen Methode benutzt wird (siehe Kapitel 2.8 und Anhang B), die Zweite löst die Kontinuitätsgleichung durch direkte Differenzenbildung, wie sie üblicherweise gelöst wird (wie z.B. in [7] Kapitel 7.1).

Für die erste Methode wird zunächst die Anfangsverteilung diskretisiert. Dazu überdeckt man den $\boldsymbol{k}$-Raum mit einem Punktgitter und ordnet jedem dieser Punkte im $\boldsymbol{k}$-Raum über die Anfangsverteilung einen Wert für die Verteilungsfunktion zu. Man erhält damit ein Satz von Anfangswerten für $\boldsymbol{k}$ und f

$$f_{0,d} = \varphi(\boldsymbol{k}_{0,d}, t=0)\,. \tag{2.10.1}$$

Der Parameter d, der das Punktgitter durchnumeriert, geht von 1 bis D. Die Kontinuitätsgleichung kann man mit Hilfe eines Systems von gewöhnlichen Differentialgleichungen lösen. Wir gehen von der allgemeinen Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} + \operatorname{div}_{\boldsymbol{k}}\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t) f(\boldsymbol{k},t)\big) = q(\boldsymbol{k},t) \tag{2.10.2}$$

aus und erhalten, nachdem wir den Divergenzausdruck zerlegt haben, das charakteristische Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
\frac{dt}{ds} &= 1, \\
\frac{d\boldsymbol{k}}{ds} &= \boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t), \\
\frac{df}{ds} &= q(\boldsymbol{k},t) - f \operatorname{div}_{\boldsymbol{k}}\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t)\big).
\end{aligned} \tag{2.10.3}$$

Durch die erste Gleichung in (2.10.3) kann man ds durch dt ersetzen:

$$\begin{aligned}\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} &= \boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t),\\ \frac{df}{dt} &= q(\boldsymbol{k},t) - f\,\mathrm{div}_{\boldsymbol{k}}\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},t)\big).\end{aligned} \tag{2.10.4}$$

Diskretisiert sehen die Differentialgleichungen folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{k}_{t_i+\Delta t_i,d} &= \boldsymbol{k}_{t_i,d} + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{k}_{t_i,d},t_i)\Delta t_i\\ f_{t_i+\Delta t_i,d} &= f_{t_i,d} + \Big(q(\boldsymbol{k}_{t_i,d},t_i) - f_{t_i,d} div_k \boldsymbol{u}(\boldsymbol{k}_{t_i,d},t_i)\Big)\Delta t_i\end{aligned} \tag{2.10.5}$$

Dieses Differentialgleichungssystem lösen wir jetzt D mal mit den D verschiedenen Anfangsbedingungen. Man berechnet also im Prinzip die Endpunkte der Charakteristiken mit den vorgegebenen Anfangswerten. Zu einer Zeit t ergeben sich dann die Werte

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{k}_{t,d}(\boldsymbol{k}_{0,d}, f_{0,d}, t),\\ &f_{t,d}(\boldsymbol{k}_{0,d}, f_{0,d}, t).\end{aligned} \tag{2.10.6}$$

Dadurch erhalten wir ein neues im allgemeinen verzerrtes Gitter im $\boldsymbol{k}$-Raum und die dazugehörigen Werte der Verteilungsfunktion. Es ist bei dieser numerischen Methode nicht möglich, die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion für einen festen Bereich im $\boldsymbol{k}$-Raum zu berechnen, weil sich die Anfangswerte mit der Zeit längs der Charakteristiken verschoben haben. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 2.10.1 dargestellt.

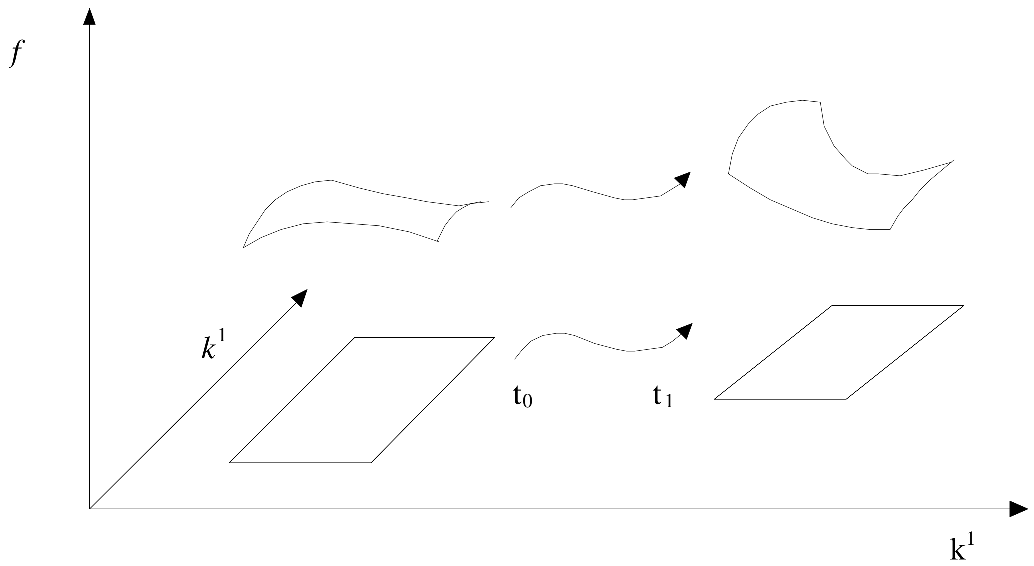

Abbildung 2.10.1: Grafische Darstellung der Entwicklung der Verteilungsfunktion von einem Zeitpunkt t_0 zu einem Zeitpunkt t_1. Die Überdeckung des $\boldsymbol{k}$-Raumes ändert sich ebenfalls mit der Zeit.

Man kann sich die Vorgehensweise an einem Diagramm veranschaulichen:

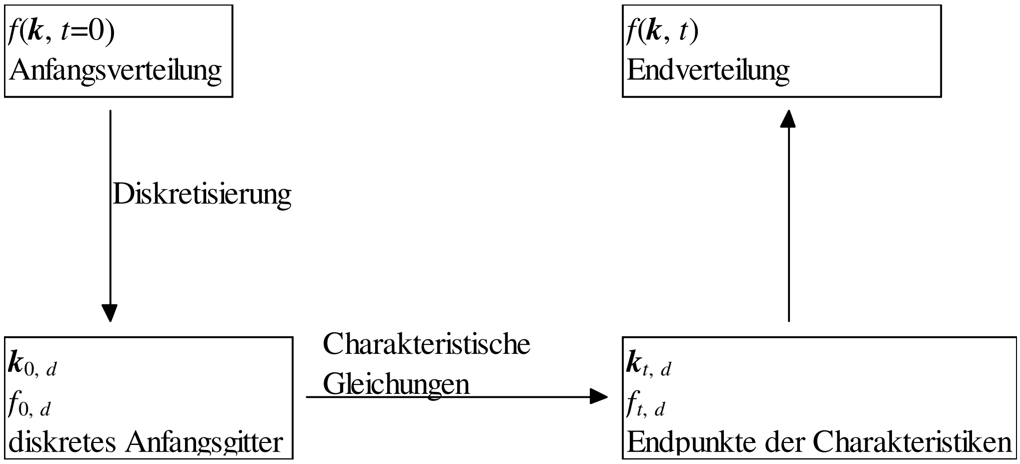

Abbildung 2.10.2: Schematische Darstellung des Lösungsverfahrens mit Hilfe der charakteristischen Gleichung

Um also die Verteilungsfunktion zu berechnen, muß man $D\ (p + 1)$ Differentialgleichungen lösen (p ist die Anzahl der Ordnungsparameter).

Bei der zweiten Methode werden die partiellen Ableitungen in Differenzen verwandelt. Dazu ist es notwendig, daß die Parameter jeder für sich diskretisiert werden, um die partiellen Ableitungen umschreiben zu können. Dadurch entsteht ein orthogonales Gitter im $\boldsymbol{k}$-Raum. Gibt man nun eine Anfangsverteilung vor, dann sind die Anfangswerte automatisch durch die Diskretisierung vorgegeben. Das war bei der vorherigen Methode nicht so. Dort konnten die D Anfangswerte in dem betrachteten Bereich beliebig angeordnet sein.

$$\begin{aligned} &k^i \to k^i_{d_i}; \quad i = 1,\dots,p; \quad d_i = 1,\dots,D_i \\ &t \to t_n; \quad n = 0,\dots,N \end{aligned} \tag{2.10.7}$$

Wir kürzen ab:

$$f(k^1_{d_1}, k^2_{d_2}, \dots, k^p_{d_p}, t_n) = f_{d_1,d_2,\dots,d_p,n} \tag{2.10.8}$$

Die Verteilungsfunktion ist durch die Anfangsverteilung zur Zeit t_0 gegeben. Mit dieser Vorbereitung können wir die Kontinuitätsgleichung direkt diskretisieren, wobei wir darauf achten müssen, daß der Strom $\boldsymbol{u}f$ eine flußartige Größe ist:

$$f_{d_1,\dots,d_p,n+1} = f_{d_1,\dots,d_p,n} + \left(\sum_{i=1}^{p} \frac{j^i_{d_1,\dots,d_i-\frac{1}{2},\dots,d_p,n} - j^i_{d_1,\dots,d_i+\frac{1}{2},\dots,d_p,n}}{k^i_{d_i+\frac{1}{2}} - k^i_{d_i-\frac{1}{2}}} + q_{d_1,\dots,d_p,n} \right) (t_{n+1} - t_n) \tag{2.10.9}$$

Dabei wurde zur Vereinfachung $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{u}f$ gesetzt. Außerdem bedeuten:

$$k^i_{d_i \pm 1/2} = \tfrac{1}{2}\left[k^i_{d_i \pm 1} + k^i_{d_i}\right],$$
$$j^i_{d_1,\ldots,d_i \pm 1/2,\ldots,d_p,n} = \tfrac{1}{2}\left[j^i(k^1_{d_1},\ldots,k^i_{d_i \pm 1},\ldots,k^p_{d_p},t_n) + j^i(k^1_{d_1},\ldots,k^i_{d_i},\ldots,k^p_{d_p},t_n)\right], \tag{2.10.10}$$

Diese Ausdrücke kann man noch in (2.10.9) einsetzten und erhält:

$$f_{d_1,\ldots,d_p,n+1} = f_{d_1,\ldots,d_p,n} + \left(\sum_{i=1}^{p} \frac{j^i_{d_1,\ldots,d_i-1,\ldots,d_p,n} - j^i_{d_1,\ldots,d_i+1,\ldots,d_p,n}}{k^i_{d_i+1} - k^i_{d_i-1}} + q_{d_1,\ldots,d_p,n}\right)(t_{n+1} - t_n) \tag{2.10.11}$$

Diese Methode ist aufwendiger als die vorherige, hat jedoch den Vorteil, daß sie die Verteilung in einem fest vorgegebenen Bereich berechnet. Es ist für eine zeitsparende Berechnung besser die erste Methode zu verwenden, weil eine beliebige diskrete Überdeckung gewählt werden kann.

2.11 Irrwege

Im Folgenden Abschnitt dieser Arbeit sollen diejenigen Ansätze vorgestellt werden, die nicht in gewünschter Weise zum Erfolg geführt haben. Damit wird auch verdeutlicht, welche Probleme bei einem Momentenverfahren mit mehrdimensionaler Verteilungsfunktion entstehen können.

Ausgehend von der Definition für das Moment K_1

$$K_1(t) = \sum_B g_1(\boldsymbol{k}) f(\boldsymbol{k}, t) \tag{2.11.1}$$

erhält man durch Zeitableitung

$$\frac{dK_1(t)}{dt} = \sum_i \sum_B \left[g_1(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) - g_1(\boldsymbol{k}) \right] R(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) + J_{\partial B}, \tag{2.11.2}$$

wobei $J_{\partial B}$ wieder die mit g gewichteten Übergänge in B sind. Für die eckigen Klammern setzt man wieder die Taylor-Näherung ein:

$$\frac{dK_1(t)}{dt} = \sum_i \sum_B \left[k_i^1 \frac{\partial g_1}{\partial k^1} + k_i^2 \frac{\partial g_1}{\partial k^2} + \ldots + k_i^p \frac{\partial g_1}{\partial k^p} \right] R(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) + J_{\partial B}. \tag{2.11.3}$$

Betrachten wir den Fall $p = 2$ und setzen $k^1 = x$ und $k^2 = y$. Mit der Separation der Raten erhalten wir

$$\frac{dK_1(t)}{dt} = \sum_i \sum_B \left[x_i \frac{\partial g_1(x,y)}{\partial x} h(x,y) + y_i \frac{\partial g_1(x,y)}{\partial y} h(x,y) \right] \omega(x_i, y_i) f(x,y,t) + J_{\partial B}. \tag{2.11.4}$$

Wir definieren

$$\frac{\partial g_1}{\partial x} h = g_2 \text{ und } \frac{\partial g_1}{\partial y} h = g_3, \tag{2.11.5}$$

so daß

$$\frac{dK_1}{dt} = u_x K_2 + u_y K_3 + J_{\partial B} \text{ mit } \boldsymbol{u} = \sum_{\boldsymbol{i}} \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} \omega(x_i, y_i) = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} \tag{2.11.6}$$

entsteht. Um aber das Gleichungssystem komplett zu machen, müssen auch die zeitlichen Änderungen von K_2 und K_3 bestimmt werden, die aus den Momenten K_i (i=1…3) zusammengesetzt sind. Dadurch entstehen Bedingungen für die Funktionen g_1 und g_2 :

$$\frac{\partial g_2}{\partial x} h = ? \quad \frac{\partial g_2}{\partial y} h = ? \quad \frac{\partial g_3}{\partial x} h = ? \quad \frac{\partial g_3}{\partial y} h = ? \tag{2.11.7}$$

Zusammen mit (2.11.5) sind das 6 Gleichungen für die 3 unbekannten Funktionen g_i. Im allgemeinen gibt es immer p mal so viele Gleichungen wie es Unbekannte gibt, um das Gleichungssystem vollständig zu machen. Auf diese Überbestimmtheit trifft man immer dann, wenn die Zahl der Ordnungsparameter größer ist als eins, also mehrdimensional. Der Grund dafür ist die Tatsache, daß bei der Momentenbildung die Raten auf Geraden im $\boldsymbol{k}$-Raum zusammengefaßt werden. Man könnte nun versuchen die Raten auf andere Art und Weise zusammenzufassen, beispielsweise auf Kurven. Aber das würde das Problem nicht beheben sondern nur komplizierter machen, da auch hier eine mehrdimensionale Mannigfaltigkeit in eine eindimensionale reduziert wird.

Eine andere Möglichkeit bestünde darin, bei der Taylor-Näherung nicht bis zur ersten sondern bis zur zweiten Ordnung zu gehen. Aber damit hätte man noch mehr Unbekannte und würde eine noch größere Überbestimmtheit erlangen.

3 ANWENDUNGEN

In diesem Abschnitt der Diplomarbeit sollen modellhaft einige Beispiele gegeben werden, um die Anwendungsvielfalt des Verfahrens zu demonstrieren. Dabei wird hier mehr Wert auf eine theoretische Behandlung als auf eine numerische Berechnung gelegt.

3.1 Wachstum und Drift homogen zusammengesetzter Staubteilchen

Es sei eine Verteilungsfunktion $f(\boldsymbol{r}, N, t)$ gegeben, die angibt, wieviele Staubteilchen der Größe N im Volumen $d^3\boldsymbol{r}$ um den Ort $\boldsymbol{r}$ vorhanden sind. Wir betrachten zunächst ein ruhendes Staubkorn, das von einem heißen Gas umgeben ist. Die Gasatome oder -moleküle treffen gleichmäßig mit einer mittleren thermischen Geschwindigkeit v_{th} auf die Oberfläche des als sphärisch angenommenen Staubkorns.

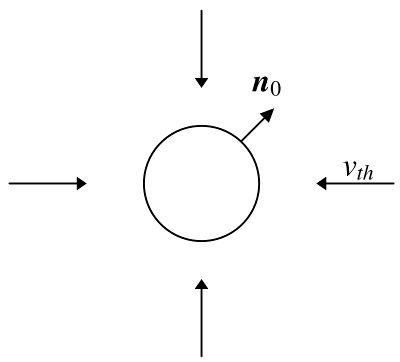

Abbildung 3.1.1: Diese Grafik soll veranschaulichen, daß die Gasteilchen im Mittel senkrecht auf die Oberfläche des Staubkorns treffen. An jedem Punkt der Oberfläche hat der Geschwindigkeitsvektor die Form $\boldsymbol{v}_{th} = -v_{th}\boldsymbol{n}_0$.

Die Zahl der Gasatome pro Zeiteinheit, die an dem Staubkorn haften bleibt, ist gegeben durch:

$$Z_{zu} = -\int_A \alpha n \boldsymbol{v}_{th}\, d\boldsymbol{A} = -\int_A \alpha n v_{th} \boldsymbol{n}_0\, dA\ . \tag{3.1.1}$$

Dabei steht n für die Dichte der Gasmoleküle, α für die Haftwahrscheinlichkeit und $d\boldsymbol{A}$ ist das Oberflächenelement des Staubteilchens. Die Geschwindigkeit ist hier vektoriell geschrieben und zeigt immer in entgegengesetzter Richtung der Flächennormalen $\boldsymbol{v}_{th} = -v_{th}\boldsymbol{n}_0$. Dadurch erklärt sich auch das negative Vorzeichen vor dem Integral. $\boldsymbol{n}_0$ ist der Flächennormalenvektor. Eine präzisere Berechnung erfordert die Kenntnis der Geschwindigkeitsverteilung $f_{\max}(\boldsymbol{v})$ der Gasatome. Dann muß über den Geschwindigkeitsraum integriert werden:

$$Z_{zu} = -\int_A \int_{R_v^3} \alpha n \boldsymbol{v} \boldsymbol{n}_0 f_{\max}(\boldsymbol{v})\, d^3\boldsymbol{v}\, dA\,. \tag{3.1.2}$$

Exemplarisch sei hier eine Maxwellverteilung angesetzt:

$$f_{\max}(\boldsymbol{v}) = \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3} \exp\left(-\frac{m}{2kT}\boldsymbol{v}^2\right). \tag{3.1.3}$$

Damit die Gasatome, die sich von der Oberfläche weg bewegen, nicht in das Integral mit einbezogen werden, benötigen wir die Sprungfunktion $\Theta(x)$. Für sie gilt[8]

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad x < 0, \\ 1 & \text{für} \quad x \geq 0. \end{cases} \tag{3.1.4}$$

Damit ergibt sich:

$$Z_{zu} = -\int_A \int_{R_v^3} \alpha n\, \boldsymbol{v} \boldsymbol{n}_0 f_{\max}(\boldsymbol{v}) \Theta(-\boldsymbol{v}\boldsymbol{n}_0) d^3\boldsymbol{v}\, dA \tag{3.1.5}$$

Wenn sich nun das Staubteilchen mit der Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}_d$ bewegt, muß die Geschwindigkeitsverteilung mit $\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_d \to \boldsymbol{v}$ substituiert werden:

$$Z_{zu} = -\int_A \int_{R_v^3} \alpha n\, \boldsymbol{v} \boldsymbol{n}_0 f_{\max}(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_d) \Theta\big(-(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_d)\boldsymbol{n}_0\big) d^3\boldsymbol{v}\, dA \tag{3.1.6}$$

Analog kann das Verdampfen von Gasatomen vom Staubteilchen kann ebenfalls als Flächenintegral geschrieben werden

$$Z_{ab} = \int_A \beta\, dA\,. \tag{3.1.7}$$

Nach dieser Betrachtung kehren wir zur Verteilungsfunktion $f(\boldsymbol{r}, N, t)$ zurück. Ein allgemeiner Zustand besteht also aus vier Komponenten r_x, r_y, r_z und N. Betrachten wir den Übergang von einem Zustand $\boldsymbol{k}$ in einen Zustand $\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i$:

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{r} \\ N \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \boldsymbol{r} \\ N \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta\boldsymbol{r} \\ \Delta N \end{pmatrix}. \tag{3.1.8}$$

Setzen wir zunächst $\Delta\boldsymbol{r} = 0$, erhalten wir

---

[8] Es sei noch erwähnt, daß die Sprungfunktion eliminiert werden kann, indem man die Integrationsgrenzen einschränkt.

$$\boldsymbol{k}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \Delta N \end{pmatrix}. \tag{3.1.9}$$

Es handelt sich dabei um Wachstums- und Verdampfungsprozesse, die ein ruhendes Staubkorn um die Größe ΔN anwachsen beziehungsweise, falls $\Delta N < 0$ ist, schrumpfen lassen. Wir können somit für die Einteilchenübergangsrate

$$\omega\left(\begin{pmatrix} \boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{N} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{N} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \Delta N \end{pmatrix}\right) = \begin{cases} Z_{zu}(N, \Delta N, \boldsymbol{r}) & \text{für } \Delta N > 0 \\ Z_{ab}(N, \Delta N, \boldsymbol{r}) & \text{für } \Delta N < 0 \end{cases} \tag{3.1.10}$$

schreiben.

Betrachten wir jetzt den Fall $\Delta N = 0$ und $\Delta \boldsymbol{r} \neq 0$. Wir beziehen uns auf ein Volumenelement $d^3\boldsymbol{r}$ um den Ort $\boldsymbol{r}$. Die Zahl der Teilchen, die bei $r_x - dr_x$ eintreten ist

$$v_x(r_x - dr_x, N) \cdot f(r_x - dr_x, N, t)$$

mal der betrachteten Fläche des Volumenelements $A = d^3\boldsymbol{r}/dr_x$. Die Zahl der Teilchen, die bei $r_x + dr_x$ austreten ist

$$v_x(r_x + dr_x, N) \cdot f(r_x + dr_x, N, t) \cdot A\,.$$

Man erhält also:

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{r}, N, t)}{\partial t} d^3\boldsymbol{r} = \frac{v_x(r_x - dr_x, N) \cdot f(r_x - dr_x, N) - v_x(r_x + dr_x, N) \cdot f(r_x + dr_x, N)}{dr_x} d^3\boldsymbol{r}\,. \tag{3.1.11}$$

Natürlich muß diese Betrachtung mit jeder räumlichen Komponente von $\boldsymbol{r}$ getan werden. Mit dem Grenzübergang $dr_x \to 0$ geht die Differenz in eine Ableitung über und es ergibt sich die bekannte Divergenz über den Strom $\boldsymbol{v}f$. Wenn man jetzt noch den Grenzwert $dt \to 0$ durchführt und $d^3\boldsymbol{r}$ ausklammert, ergibt sich

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{r}, N, t)}{\partial t} = -\operatorname{div}\big(\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}, N, t) f(\boldsymbol{r}, N, t)\big), \tag{3.1.12}$$

aber nur für den Fall $\Delta N = 0$. Diese Ableitung, die im Prinzip nur einer Wiederholung der Herleitung der Kontinuitätsgleichung in der Kontinuumsmechanik entspricht, zeigt, wie die Kontinuitätsgleichung in der Mechanik auch durch eine Mastergleichung beschrieben werden kann, wenn man den dreidimensionalen Ortsraum in Zellen aufteilt und für jede Zelle Raten von Zu- und Abnahme der Teilchenzahl pro Zeiteinheit bestimmt. Die Raten sind gerade durch den Strom, der durch die Zellwände geht, gegeben.

Wie sehen nun die Raten aus, wenn $\Delta N \neq 0$? Gibt es einen Prozeß der dafür sorgt, daß gleichzeitig N und $\boldsymbol{r}$ geändert werden, wie es in der nachfolgenden Abbildung gezeigt ist?

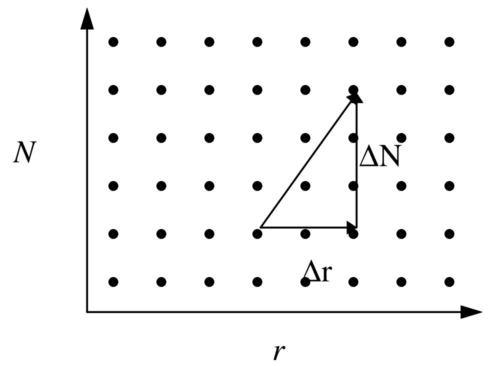

Abbildung 3.1.2: Veranschaulichung eines Überganges mit $\Delta N \neq 0$ und $\Delta \boldsymbol{r} \neq 0$.

Dabei wird hier nach **einem** Prozeß und nicht nach zwei aufeinanderfolgenden gesucht. Ich bin zu dem Ergebnis gekommen, daß Staubwachstum und Drift als voneinander unabhängige Prozesse anzusehen sind und es in diesem Sinne keine solchen Übergänge gibt. Zwar beeinflussen sich beide Phänomene (z.B. ist die Wachstumsgeschwindigkeit von der Ort abhängig und die Driftgeschwindigkeit hängt mit der Teilchengröße zusammen), jedoch bilden sie keinen gemeinsamen Prozeß. Wenn ein Monomer auf das Staubkorn trifft ändert sich nur der Impuls und die Monomerenzahl des Staubkorns, jedoch nicht der Ort. Der allgemeine Ansatz lautet also

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f(\boldsymbol{r},N,t)}{\partial t} &= -\operatorname{div}\big(\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},N,t)\, f(\boldsymbol{r},N,t)\big) \\
&\quad + \sum_{i=1}^{I}\Big(Z_{zu}(N-i)\cdot f(\boldsymbol{r},N-i,t) - Z_{ab}(N)\cdot f(\boldsymbol{r},N,t) \\
&\quad + Z_{ab}(N+i)\cdot f(\boldsymbol{r},N+i,t) - Z_{zu}(N)\cdot f(\boldsymbol{r},N,t)\Big),
\end{aligned}
\tag{3.1.13}
$$

und wir können die kontinuumsmechanische Näherung durchführen. Man erhält

$$
\frac{\partial f(\boldsymbol{r},N,t)}{\partial t} + \operatorname{div}\big(\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},N,t)\, f(\boldsymbol{r},N,t)\big) + \frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{1}{\tilde{\tau}(\boldsymbol{r},N,t)}\, f(\boldsymbol{r},N,t)\right) = 0 \tag{3.1.14}
$$

mit

$$
\frac{1}{\tilde{\tau}(\boldsymbol{r},N,t)} = \sum_{i=1}^{I} i\big(Z_{zu}(N,\boldsymbol{r}) - Z_{ab}(N,\boldsymbol{r})\big). \tag{3.1.15}
$$

Es wurde schon darauf hingewiesen, daß es vorkommen kann, daß bei manchen Problemen nicht die Prozeßgeschwindigkeit $\boldsymbol{u}$ selbst, sondern nur ihre zeitliche Ableitung bekannt ist. Das hängt von der jeweils betrachteten physikalischen Situation ab und ist hier der Fall. Bei diesem Staubwachstumsproblem kennt man nicht das Geschwindigkeitsfeld $\boldsymbol{v}(N, \boldsymbol{r}, t)$ sondern nur das Beschleunigungsfeld

$$\frac{d\boldsymbol{v}(N,\boldsymbol{r},t)}{dt} = \boldsymbol{a}(N,\boldsymbol{r},t), \tag{3.1.16}$$

welches durch die auf das Staubkorn einwirkenden Kräfte gegeben ist. Dadurch ist es nicht möglich die Kontinuitätsgleichung für $f(N, \boldsymbol{r}, t)$ mit Hilfe des Charakteristikenverfahrens analytisch zu lösen, weil man dazu die Ableitungen aller $\boldsymbol{u}$-Komponenten benötigt. Da wir aber die kinetische Geschwindigkeit nicht kennen, können wir die Kontinuitätsgleichung nicht so umschreiben, daß man darauf ein Charakteristikenverfahren anwenden kann[9]. Man behebt das Problem, indem man die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ als zusätzlichen Parameter in die Verteilungsfunktion integriert: $f(N, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t)$. Man muß sich dann wieder klar machen, ob es Prozesse $\boldsymbol{k}_i$ gibt, die gleichzeitig die Größe, den Ort und die Geschwindigkeit eines Staubkorns ändern. Diese Frage ist eindeutig mit „Ja“ zu beantworten, da ein auf das Staubkorn treffendes Gasatom das Staubkorn beschleunigt, wenn auch nur minimal[10]. Der Geschwindigkeitsvektor $\boldsymbol{u}$ muß also wieder neu berechnet werden. Trotzdem ergibt sich die Kontinuitätsgleichung zu

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{1}{\tilde{\tau}} f\right) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\left(\boldsymbol{v} f\right) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{v}}\left(\boldsymbol{a} f\right) = 0. \tag{3.1.17}$$

$\partial/\partial\boldsymbol{r}$ und $\partial/\partial\boldsymbol{v}$ stehen jeweils für die Divergenz. Der Vektor $\boldsymbol{u}$ besteht nun aus 7 Komponenten, eine für das Staubwachstum, drei für die Geschwindigkeit und drei für die Beschleunigung. Gleichung (3.1.17) entspricht der Boltzmanngleichung mit dem Unterschied, daß das Stoßintegral auf der rechten Seite fehlt. Dafür enthält sie die Divergenz im Größenraum.

Wir erhalten nun das Charakteristikensystem

[9] $\mathrm{div}(\boldsymbol{u}f) = \boldsymbol{u} \cdot \mathrm{grad}\, f + f \cdot \mathrm{div}\, \boldsymbol{u}$

[10] Dies geht aus einer Impulsbilanz hervor.

$$\begin{aligned}
\frac{dN}{dt} &= \frac{1}{\tilde{\tau}} N^{\frac{d-1}{d}}, \\
\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} &= \boldsymbol{v}, \\
\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} &= \boldsymbol{a}, \\
\frac{df}{dt} &= -f\left(\frac{1}{\tilde{\tau}}\frac{d-1}{d}N^{-\frac{1}{d}} + \frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{v}}\right).
\end{aligned} \tag{3.1.18}$$

Ab hier wäre eine numerische Berechnung von Nöten, da die Beziehungen zwischen Geschwindigkeits- und Beschleunigungsfeld sowie der Teilchengröße sehr komplex sind. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wird die numerische Berechnung nicht weiter verfolgt, sondern auf KRÜGER, WOITKE & SEDLMAYR [4] verwiesen, die dieses Problem stationär sowie in einer Orts- und Geschwindigkeitsrichtung mit einer Mehrkomponentenmethode gelöst haben.

3.2 Wachstum unterschiedlich geformter Staubkörner

Dieses Beispiel beschreibt homogenes Staubwachstum, wobei der Staub aus unterschiedlich geformten Quadern bestehen soll. Das ist natürlich ein sehr extravagantes Modell, weil die Staubkörner in Wirklichkeit unregelmäßig geformt sind. Wir wenden es hier an, um wenigstens das Prinzip des Wachstums unregelmäßig geformter Staubkörner zu erkennen. Die Kantenlängen eines Quaders seinen a, b und c. Die Verteilungsfunktion $f(a, b, c, t)$ $dadbdc$ gibt an, wieviele Staubteilchen mit dem Seitenlängen a, b, c im Intervall $dadbdc$ existieren. Ferner wollen wir vereinfachend annehmen, daß die Quader von einem Gas umgeben sind, das aus vielen kleinen Würfeln der Kantenlänge d besteht, und daß die Flächen aller Würfel und Quader stets parallel sind. Wie sieht nun die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion aus?

Zunächst einmal ist klar, daß das Wachstum zweier Kantenlängen nicht korreliert ist. Es gibt keinen Prozeß, der dafür sorgt, daß gleichzeitig etwa a und b geändert werden, weil ein Würfel entweder auf die eine oder auf die andere Fläche eines Quaders treffen kann.

Betrachten wir exemplarisch die Seitenlänge a. Die für die Würfel zur Verfügung stehende Fläche ist $A_a = bc$.

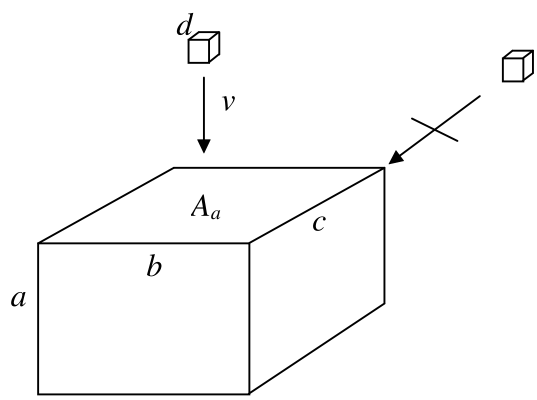

Abbildung 3.2.1: Diese Grafik gibt eine Vorstellung von dem Wachstumsprozeß. Ein Gasmolekül trifft auf die Oberfläche des Staubkorns. Ein Stoß auf die Kanten und Ecken des Quaders bleibt unberücksichtigt (durchgestrichener Pfeil).

Die Wahrscheinlichkeit p, daß ein Würfel auf dieser Fläche haften bleibt, ist

$$p = j_a A_a \alpha_a \Delta t \,. \qquad (3.2.1)$$

Dabei bezeichnet j_a den Würfelstrom auf die Fläche A_a. α_a ist wieder die Haftwahrscheinlichkeit. Um wieviel ist jetzt a gewachsen? Für den Aufbau einer ganzen Würfelschicht sind $Z =$

A_a/d^2 Würfel nötig. Wenn so viele Würfel die Fläche A_a treffen, ist die Kantenlänge um d gewachsen. Trifft aber nur ein Würfel auf die Fläche A_a, dann ist die Kantenlänge a im Mittel nur um d/Z also d^3/A_a gewachsen. Also ist

$$\omega\left(a \to a + \frac{d^3}{A_a}\right) = 2 j_a A_a \alpha_a \tag{3.2.2}$$

die Rate dafür, daß a um d^3/A_a wächst. Der Faktor zwei berücksichtigt die Tatsache, daß zwei Seiten zum Wachstum zur Verfügung stehen, und daß beide Seiten gleichermaßen wachsen.

Die Übergangswahrscheinlichkeit, daß ein Würfel von einem Quader verdampft, ist

$$\omega\left(a \to a - \frac{d^3}{A_a}\right) = 2 A_a \beta_a, \tag{3.2.3}$$

wobei β_a die Wahrscheinlichkeit (pro Zeiteinheit) dafür ist, daß sich ein Würfel vom Quader löst. Die anderen Raten sehen entsprechend aus:

$$\begin{aligned}
&\omega\left(b \to b + \frac{d^3}{A_b}\right) = 2 j_b A_b \alpha_b, \quad \boldsymbol{k}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{d^3}{A_b} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \omega\left(b \to b - \frac{d^3}{A_b}\right) = 2 A_b \beta_b, \quad \boldsymbol{k}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{d^3}{A_b} \\ 0 \end{pmatrix}; \\
&\omega\left(c \to c + \frac{d^3}{A_c}\right) = 2 j_c A_c \alpha_c, \quad \boldsymbol{k}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{d^3}{A_c} \end{pmatrix}; \quad \omega\left(c \to c - \frac{d^3}{A_c}\right) = 2 A_c \beta_c, \quad \boldsymbol{k}_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{d^3}{A_c} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.2.4}$$

Der Geschwindigkeitsvektor ist dann:

$$\boldsymbol{u} = \sum_{i=1}^{6} \boldsymbol{k}_i \omega(\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) = 2d^3 \begin{pmatrix} j_a \alpha_a - \beta_a \\ j_b \alpha_b - \beta_b \\ j_c \alpha_c - \beta_c \end{pmatrix} = 2V_{Würfel} \begin{pmatrix} 1/\tau_a \\ 1/\tau_b \\ 1/\tau_c \end{pmatrix}. \tag{3.2.5}$$

Man beachte, daß $1/\tau_i$ die Dimension $1/(m^2 s)$ hat. In diese Gleichung geht interessanterweise nur das Würfelvolumen und die unterschiedlichen Zeitskalen der jeweiligen Seiten ein. Man kann zeigen, daß dieses Ergebnis auch für einen beliebig geformtes kleines Quaderchen gilt, der anstelle des Würfels für das Wachstum verantwortlich ist. In diesem Falle würde anstelle des Würfelvolumens das Quaderchenvolumen in (3.2.5) eingehen. Man könnte jetzt weitergehen und die Orientierung der Würfel zum Quader berücksichtigen, was eine Abhängigkeit der

Haftwahrscheinlichkeit von der Orientierung zur Folge hätte. Wir wollen diesen Weg nicht weiter verfolgen, sondern die Kontinuitätsgleichung betrachten. Sie lautet

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} + \mathrm{div}_{\boldsymbol{k}}\big(\boldsymbol{u} f(\boldsymbol{k},t)\big) = q(\boldsymbol{k},t)\,. \tag{3.2.6}$$

Hier kann man den Geschwindigkeitsvektor vorziehen, wenn die Zeitskalen $1/\tau_i$ nicht von den Quaderausmaßen abhängen:

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{k},t)}{\partial t} + \boldsymbol{u}\,\mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\, f(\boldsymbol{k},t) = q(\boldsymbol{k},t)\,. \tag{3.2.7}$$

Die Lösung dieser Gleichung ist

$$f(\boldsymbol{k},t) = \int q(\boldsymbol{u}t + \boldsymbol{k}_0, t)dt + \Phi(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{u}t)\,, \tag{3.2.8}$$

wobei $\Phi(\boldsymbol{k})$ die Anfangsverteilung darstellt.

Im Folgenden wollen wir diese Überlegungen verallgemeinern und die Formänderung eines beliebig geformten Staubteilchens betrachten ohne speziell auf die Verteilungsfunktion einzugehen, da dafür die kontinuumsmechanische Näherung nicht überprüft worden ist (siehe Fußnote 3 in Kapitel 2.2).

Ein Staubkorn besitze die Oberfläche $\boldsymbol{A}(u, v)$ mit den beiden Flächenparametern u und v. Es sei von einem Gas umgeben, dessen Atome das Volumen V_{atom} beanspruchen. Wie ändert sich durch Anlagerung der Gasatome an das Staubkorn dessen Oberfläche? Greifen wir uns dazu ein Flächenelement ΔA heraus:

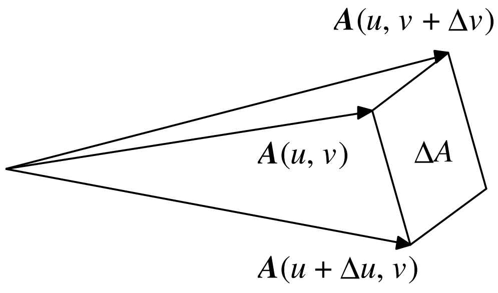

Abbildung 3.2.2: Das Flächenelement ΔA in der Entfernung $\boldsymbol{A}$ vom Koordinatenursprung.

Die Zahl der Staubteilchen, die in der Zeit Δt auf diese Fläche treffen ist mit $\boldsymbol{v}_{rel} = \boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_d$ durch

$$Z_{zu} = -\int_{R_v^3} n\boldsymbol{v}\boldsymbol{n}_0 f(\boldsymbol{v}_{rel})\Theta(-\boldsymbol{v}_{rel}\boldsymbol{n}_0)d^3\boldsymbol{v}\,\Delta A\Delta t \tag{3.2.9}$$

gegeben (siehe auch (3.1.6)). Um auf die Fläche eine Schicht der Dicke d aufwachsen zu lassen, benötigt man $Z_d = d\Delta A\ /\ V_{atom}$ Gasatome. Der Vektor $\boldsymbol{A}$ wäre dann um d in Richtung der Flächennormalen $\boldsymbol{n}_0$ gewachsen. Wir können also eine Übergangsrate für das Wachstum eines Flächenvektors angeben:

$$\omega\left(\boldsymbol{A}(u,v) \to \boldsymbol{A}(u,v) + \frac{d}{Z_d}\boldsymbol{n}_0\right) = -\int_{R_v^3} n\boldsymbol{v}\,\boldsymbol{n}_0 f(\boldsymbol{v}_{rel})\Theta(-\boldsymbol{v}_{rel}\boldsymbol{n}_0)d^3\boldsymbol{v}\Delta A\,. \qquad (3.2.10)$$

Dadurch ergibt sich eine Änderung von $\boldsymbol{A}$ gemäß:

$$\frac{\partial \boldsymbol{A}(u,v)}{\partial t} = -V_{atom}\boldsymbol{n}_0(u,v)\int_{R_v^3} n\boldsymbol{v}(u,v)\boldsymbol{n}_0(u,v)f(\boldsymbol{v}_{rel}(u,v))\Theta(-\boldsymbol{v}_{rel}(u,v)\boldsymbol{n}_0(u,v))d^3\boldsymbol{v} \quad (3.2.11)$$

Wie man sieht, hat sich das Flächenelement herausgekürzt, und man kann es ohne Probleme gegen null gehen lassen. Die Sprungfunktion dient wieder dazu, die Gasatome zu ignorieren, die sich vom Flächenelement entfernen.

Kompliziert wird die Sache dadurch, daß der Normalenvektor von der Fläche abhängt, die sich ja mit der Zeit ändern soll. Er ist gegeben durch

$$\boldsymbol{n}_0 = \frac{\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial u}\times\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial v}}{\left|\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial u}\times\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial v}\right|}\,. \qquad (3.2.12)$$

Dadurch entsteht das sehr komplizierte partielle Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{A}(u,v)}{\partial t} = -V_{atom}\frac{\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial u}\times\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial v}}{\left|\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial u}\times\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial v}\right|}\cdot \\ \int_{R_v^3}\left\{n\boldsymbol{v}(u,v)\frac{\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial u}\times\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial v}}{\left|\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial u}\times\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial v}\right|}f(\boldsymbol{v}_{rel}(u,v))\Theta\left(-\boldsymbol{v}_{rel}(u,v)\frac{\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial u}\times\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial v}}{\left|\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial u}\times\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial v}\right|}\right)\right\}d^3\boldsymbol{v}\end{aligned} \qquad (3.2.13)$$

Man sieht an dieser Rechnung sehr gut, wie schnell die Versuche, eine detaillierte Formbildung zu berechnen, in analytische Unmöglichkeiten ausufern. Eine weitere Vertiefung (etwa die numerische Behandlung von Formbildung) würde den Rahmen dieser Diplomarbeit sprengen.

3.3 Heterogenes nicht stöchiometrisches Staubwachstum

Wir wollen wieder auf das Beispiel des SiO-Staubes zurückkommen. Die Staubverteilungsfunktion lautet $f(N_{Si}, N_O, t)$ und gibt die Zahl der Teilchen an, die N_{Si} Siliziumatome und N_O Sauerstoffatome enthält. Ferner möge der Staub von einem Gasgemisch umgeben sein, der aus kleinen SiO-Clustern besteht (Si_2-, Si-, O_2-, O-, SiO-, SiO_2-Cluster und so weiter). Wir betrachten hier nur die Anlagerung oder Verdampfung dieser Moleküle vom Staubkorn. Das Wachstum, das durch Austausch von $Si_\mu O_\nu$-Molekülen in chemischen Reaktionen von statten geht, soll hier nicht berücksichtigt werden. Der Übergangsvektor, der die Anlagerung eines Si_μ O_ν-Clusters bewirkt, lautet einfach

$$\boldsymbol{k}_i = \begin{pmatrix} \mu \\ \nu \end{pmatrix} \quad \mu, \nu = 1, 2, 3\,, \tag{3.3.1}$$

deren Verdampfung

$$\boldsymbol{k}_i = \begin{pmatrix} -\mu \\ -\nu \end{pmatrix}. \tag{3.3.2}$$

Die Übergangsraten sind gegeben durch

$$\omega(\boldsymbol{k} \rightarrow \boldsymbol{k} + \begin{pmatrix} \mu \\ \nu \end{pmatrix}) = A(\boldsymbol{k}) v_{rel} f(\mu, \nu) \alpha(\boldsymbol{k}, \mu, \nu) \tag{3.3.3}$$

Wir setzen zur Vereinfachung $\alpha = 1$, was bedeutet, das jedes Gasmolekül am Staubkorn haften bleibt. Eine Abnahme der Staubkorngröße kann somit nur durch Abdampfen erfolgen:

$$\omega(\boldsymbol{k} \rightarrow \boldsymbol{k} - \begin{pmatrix} \mu \\ \nu \end{pmatrix}) = A(\boldsymbol{k}) \beta(\boldsymbol{k}, \mu, \nu) \tag{3.3.4}$$

Die Übergangsraten für Prozesse, wie z.B. des Austausches von einem Si-Atom mit einem O-Atom ist aufgrund des fehlenden dritten Reaktionspartners null:

$$\omega(\boldsymbol{k} \rightarrow \boldsymbol{k} + \begin{pmatrix} \mu \\ -\nu \end{pmatrix}) = 0 \tag{3.3.5}$$

Man könnte so etwas als Auswahlregel bezeichnen, weil diese Bedingung verbotene Übergänge kennzeichnet. Dabei hängen diese Auswahlregeln entscheidend von der betrachteten physikalischen und chemischen Situation ab, wie es schon in Kapitel 3.1 in etwas anderem Zusammenhang angesprochen wurde. Existieren nämlich Moleküle A, die eine Reaktion

$$\mathrm{Si}_m\mathrm{O}_n + A(\mathrm{O}) \rightarrow \mathrm{Si}_{m-1}\mathrm{O}_{n+1} + A'(\mathrm{Si}) \tag{3.3.6}$$

bewirken, dann ist die Übergangsrate nicht null und der Übergang ist somit erlaubt! Die folgende Skizze soll eine Vorstellung davon geben, welche Übergänge in der hier betrachteten Situation (nur Anlagerung und Verdampfung) erlaubt sind:

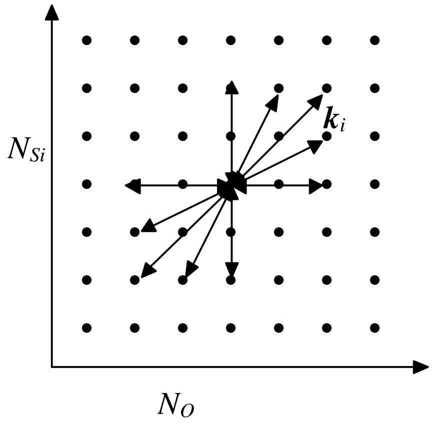

Abbildung 3.3.1: Erlaubte Übergänge, die einem Staubkorn widerfahren können. Teilchenaustausch ist bei den hier betrachteten Reaktionen aufgrund fehlender Reaktionspartner nicht erlaubt. Selbst $\mathrm{Si}_\mu\mathrm{O}_\nu$-Moleküle können nicht als Reaktionspartner dienen, da sie wegen $\alpha = 1$ haften bleiben.

Die Übergangsraten sind von der folgenden Form:

$$\omega(\boldsymbol{k} \rightarrow \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_i) = \begin{cases} j_i A(N_{Si}, N_O) & \text{für Wachstum} \\ \beta_i A(N_{Si}, N_O) & \text{für Verdampfung} \end{cases} \tag{3.3.7}$$

Dabei nehmen wir an, daß $j_i\alpha_i$ und β_i konstante Größen sind. Der Geschwindigkeitsvektor ergibt sich dann zu

$$\boldsymbol{u}(N_{Si}, N_O) = \sum_i \boldsymbol{k}_i (j_i - \beta_i) A(N_{Si}, N_O) = \begin{pmatrix} 1/\tau_{Si} \\ 1/\tau_O \end{pmatrix} A(N_{Si}, N_O)\,. \tag{3.3.8}$$

Man beachte, daß $1/\tau$ auch hier die Dimension (Fläche * Zeit)$^{-1}$ hat. Um die Funktion $A(N_{Si}, N_O)$ zu bestimmen, gehen wir davon aus, daß jede Atomart ein gewisses mittleres Volumen zum Staubkorn beiträgt. Das Siliziumatom das Volumen V_{si} das Sauerstoffatom das Volumen V_O. Das Gesamtvolumen des als sphärisch symmetrisch angenommenen Staubteilchens ist dann

$$V = N_{Si} V_{Si} + N_o V_o\,, \tag{3.3.9}$$

woraus sich die Oberfläche zu

$$
\begin{aligned}
A(N_{Si}, N_O) &= \sqrt[3]{36\pi}\left(N_{Si}V_{Si} + N_O V_O\right)^{2/3} \\
&= \xi_A V^{2/3}
\end{aligned}
\tag{3.3.10}
$$

ergibt (siehe auch [8]). Die Kontinuitätsgleichung lautet damit

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f(N_{Si},N_O)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial N_{Si}}\left(\frac{1}{\tau_{Si}} A(N_{Si},N_O) f(N_{Si},N_O)\right) + \frac{\partial}{\partial N_O}\left(\frac{1}{\tau_O} A(N_{Si},N_O) f(N_{Si},N_O)\right) \\
= q(N_{Si},N_O)
\end{aligned}
\tag{3.3.11}
$$

und das Charakteristikensystem

$$
\begin{aligned}
\frac{dN_{Si}}{dt} &= \frac{1}{\tau_{Si}} \xi_A \left(N_{Si}V_{Si} + N_O V_O\right)^{2/3}, \\
\frac{dN_O}{dt} &= \frac{1}{\tau_O} \xi_A \left(N_{Si}V_{Si} + N_O V_O\right)^{2/3}, \\
\frac{df}{dt} &= -\frac{2}{3}\xi_A\, \gamma \left(N_{Si}V_{Si} + N_O V_O\right)^{-1/3} f + q(N_{Si},N_O).
\end{aligned}
\tag{3.3.12}
$$

Dabei wird zur Abkürzung $\gamma = \frac{V_{Si}}{\tau_{Si}} + \frac{V_O}{\tau_O}$ geschrieben. Als Lösung für die Kontinuitätsgleichung ergibt sich die Verteilungsfunktion

$$
\begin{aligned}
f(N_{Si},N_O,t) = &\left(\frac{V^{1/3} - \xi_A \gamma \frac{t}{3}}{V^{1/3}}\right) \cdot \\
&\Phi\left(N_{Si} - \frac{1}{\tau_{Si}\gamma}\left[V - \left(V^{1/3} - \xi_A\gamma\frac{t}{3}\right)^3\right], N_O - \frac{1}{\tau_O\gamma}\left[V - \left(V^{1/3} - \xi_A\gamma\frac{t}{3}\right)^3\right]\right) \\
&+ \int \frac{q(N_{Si},N_O)}{\gamma \xi_A V^{2/3}} dV
\end{aligned}
\tag{3.3.13}
$$

Der genaue Rechenweg findet sich im Anhang C. Φ gibt die Anfangsverteilung zur Zeit $t = 0$ wieder. Der Vorfaktor beschreibt, wie sich die Verteilung zu höheren Teilchenzahlen verdünnt. In den Argumenten von Φ stehen aber die Charakteristiken. Sie zeigen, wie sich ein bestimmter Zustand mit der Zeit ändert. Die Lösung stellt also ein Produkt aus retardierter Verteilungsfunktion und verdünnendem Vorfaktor dar.

4 SCHLUSSBETRACHTUNG

In dieser Diplomarbeit wurde eine sehr effiziente Methode zur Behandlung von mehrdimensionalen Staubwachstumsproblemen ausgearbeitet. Dabei gingen wir von einem Momentenverfahren aus, das sich zur Behandlung von Staubwachstumsproblemen eines Ordnungsparameters sehr bewährt hat, da sich die wichtigsten physikalischen Größen der Staubverteilungsfunktion mit Hilfe eines einfachen Differentialgleichungssystems berechnen lassen.

Die Tatsache, daß das Momentenverfahren aufeinanderfolgende Raten zusammenfaßt, verhindert die Verallgemeinerung dieser Methode auf mehrere Dimensionen. Das mehrdimensionale Momentenverfahren ist nur dann durchführbar, wenn die Raten von einer Linearkombination der in der Staubverteilungsfunktion enthaltenen Parameter abhängen. Daß dies im Prinzip einer Rückführung zum eindimensionalen entspricht, zeigt eine Parametertransformation, in der die Parameter auf diese Linearkombination transformiert werden. Das Momentenverfahren gibt aber durch den Geschwindigkeitsvektor einen Hinweis, wie man fortfahren kann: Definiert man sich über die Raten ein Geschwindigkeitsfeld, so läßt sich die Mastergleichung in eine Kontinuitätsgleichung überführen, mit deren Hilfe man über das Charakteristikenverfahren die Verteilungsfunktion direkt berechnen kann. Die Kontinuitätsgleichung stellt somit eine weitere Methode zur Behandlung von Staubwachstumsproblemen dar. Das kontinuumsmechanische Verfahren läßt sich auf endlich viele Ordnungsparameter anwenden, ist aber nicht für unendlich viele Ordnungsparameter überprüft worden. Hier finden sich noch Ansätze zur weiteren Forschung. Als Beispiel bietet sich wieder die Formbildung an: Wie groß ist die Zahl der Teilchen, die eine bestimmte Form besitzen? Dabei wird nicht von einem Quader als Staubteilchengrundform ausgegangen, sondern von einer beliebig geformten Oberfläche. Das erfordert dann unendlich viele Ordnungsparameter.

Mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung ist es möglich ein Momentengleichungssystem aufzustellen. Aber auch hier kommt man an Einschränkungen nicht vorbei. Diesmal betrifft es das Geschwindigkeitsfeld, das in einen zeitabhängigen skalaren und einen zeitunabhängigen vektoriellen Teil separierbar sein muß. Auch diese Bedingung ist zu stark, um komplexe Staubwachstumsprobleme (wie z.B. Drift) behandeln zu können.

Zudem wurde die numerische Berechnung der Kontinuitätsgleichung vorgestellt. Das ist insbesondere dann wichtig, wenn die Raten für eine analytische Berechnung zu kompliziert sind.

Dabei sind zwei Methoden vorgestellt worden. Die eine löst die Kontinuitätsgleichung mit Hilfe des Charakteristikenverfahrens, das auch bei der analytischen Berechnung seine Anwendung findet; die andere (das Standardverfahren zur numerischen Lösung von Differentialgleichungen) wandelt die partiellen Ableitungen direkt in Differenzen um. Der Nachteil der letzteren Methode ist der höhere Aufwand, den man bei der Diskretisierung treiben muß. Dies führt zu einer längeren Berechnungszeit. Der Vorteil besteht darin, daß die Änderung der Verteilungsfunktion für einen fest vorgegebenen Bereich berechnet werden kann. Das ist bei der ersten Methode nicht möglich, da der bei der Anfangsverteilung ausgewählte Bereich sich mit den Charakteristiken mit bewegt.

Ein großer Vorteil des kontinuumsmechanischen Verfahrens ist die große Anwendungsvielfalt. Die Herleitung der Kontinuitätsgleichung ist so allgemein, daß diese Methode nicht nur auf astrophysikalische Anwendungen beschränkt ist. Es läßt sich jeder beliebige Prozeß aus der statistischen Physik, der mit Hilfe einer Mastergleichung dargestellt werden kann, zu einer Kontinuitätsgleichung nähern. Es muß nur das dazugehörige Geschwindigkeitsfeld ermittelt werden. Voraussetzung dazu ist allerdings, daß die Raten in einer analytischen Form vorliegen. Darüber hinaus wurde in Kapitel 3.1 mit Gleichung (3.1.17) auf einen möglichen Zusammenhang zur Boltzmanngleichung hingewiesen. Dabei stellt sich automatisch die Frage, ob das Stoßintegral in der Boltzmanngleichung durch einen einfachen quasikontinuierlichen Ausdruck genähert werden kann und somit die Boltzmanngleichung einfacher zu lösen ist. Dies würde auch eine andere mögliche Berechnungsmethode der Strahlungstransportgleichung zur Folge haben.

Mit Hilfe des Geschwindigkeitsfeldes lassen sich (z.B. durch die Ermittlung singulärer Punkte) schon ohne die Berechnung der Verteilungsfunktion Aussagen über Eigenschaften der Verteilung machen. Es gelten natürlich immer die Sätze der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen, da ja eine Kontinuitätsgleichung immer in ein Charakteristikensystem überführt werden kann (z.B. schneiden sich zwei Charakteristiken nie, da das den Existenz- und Eindeutigkeitssatz der Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichung verletzen würde).

Die Anwendungsbeispiele in dieser Diplomarbeit sollen nur eine Anleitung für die Herangehensweise an bestimmte Staubwachstumsprobleme geben. Die Vertiefung in Probleme wie z.B. Formbildung würde den Rahmen dieser Diplomarbeit sprengen. Man sieht aber schon anhand des heterogenen Staubwachstumsproblems, wieviel dieses Verfahren zu leisten im

Stande ist. Es ist daher zur analytischen Berechnung von statistischen Problemen dieser Art nur zu empfehlen.

5 ANHANG

5.1 Anhang A: Berechnung der Momentengleichung für einen Ordnungsparameter

Wir beginnen mit der Mastergleichung und der Definition der Momente

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f(k,t)}{\partial t} &= \sum_{i=1}^{I}\Big(R(k-k_i \to k,t) - R(k \to k+k_i,t)\Big),\\
K_m(t) &= \sum_{k=k_\ell}^{\infty} g_m(k) f(k,t).
\end{aligned}
\tag{A.1}
$$

$K_m(t)$ wird nach der Zeit abgeleitet und mit Hilfe der Mastergleichung auf

$$
\frac{dK_m(t)}{dt} = \sum_{i=1}^{I}\sum_{k=k_\ell}^{\infty} g_m(k)\Big(R(k-k_i \to k,t) - R(k \to k+k_i,t)\Big) \tag{A.2}
$$

gebracht. Durch die Doppelsumme treten hier die meisten Raten zweifach auf und können deshalb zusammengefaßt werden. Für $k_i = 1{,}2$ wollen wir das explizit hinschreiben.

$$
\begin{aligned}
\frac{dK_m(t)}{dt} =&\\
&g(k_\ell+0)R(k_\ell-1\to k_\ell+0)-g(k_\ell+0)R(k_\ell+0\to k_\ell+1)+g(k_\ell+0)R(k_\ell-2\to k_\ell+0)-g(k_\ell+0)R(k_\ell+0\to k_\ell+2)\\
&+g(k_\ell+1)R(k_\ell+0\to k_\ell+1)-g(k_\ell+1)R(k_\ell+1\to k_\ell+2)+g(k_\ell+1)R(k_\ell-1\to k_\ell+1)-g(k_\ell+1)R(k_\ell+1\to k_\ell+3)\\
&+g(k_\ell+2)R(k_\ell+1\to k_\ell+2)-g(k_\ell+2)R(k_\ell+2\to k_\ell+3)+g(k_\ell+2)R(k_\ell+0\to k_\ell+2)-g(k_\ell+2)R(k_\ell+2\to k_\ell+4)\\
&+g(k_\ell+3)R(k_\ell+2\to k_\ell+3)-g(k_\ell+3)R(k_\ell+3\to k_\ell+4)+g(k_\ell+3)R(k_\ell+1\to k_\ell+3)-g(k_\ell+3)R(k_\ell+3\to k_\ell+5)\\
&\vdots
\end{aligned}
$$

Hierbei ist die k_i-Summation waagerecht und die k-Summation senkrecht durchgeführt. Die mit den Pfeilen markierten Terme können jeweils zusammengefaßt werden. Eleganter löst man dieses Problem, wenn man für positive k_i die Substitution $k_{alt} = k_{neu} + k_i$ beim ersten Summenterm in durchführt:

$$
\begin{aligned}
\sum_{k=k_\ell}^{\infty} g_m(k)R(k-k_i\to k,t) &= \sum_{k=k_\ell-k_i}^{\infty} g_m(k+k_i)R(k\to k+k_i,t)\\
&= \sum_{k=k_\ell-k_i}^{k_\ell-1} g_m(k+k_i)R(k\to k+k_i,t) + \sum_{k=k_\ell}^{\infty} g_m(k+k_i)R(k\to k+k_i,t)
\end{aligned}
\tag{A.3}
$$

Man erhält dann

$$\frac{dK_m(t)}{dt} = \sum_{i=1}^{I'} \sum_{k=k_\ell-k_i}^{k_\ell-1} g_m(k+k_i) R(k \to k+k_i,t) + \sum_{i=1}^{I'} \sum_{k=k_\ell}^{\infty} \big(g_m(k+k_i) - g_m(k)\big) R(k \to k+k_i,t)$$

$$\text{wobei } k_1,\ldots,k_{I'} > 0 \tag{A.4}$$

und weiter mit der Taylor-Näherung und der Forderung an die Raten

$$\begin{aligned} \frac{dK_m(t)}{dt} &= \sum_{i=1}^{I'} \sum_{k=k_\ell-k_i}^{k_\ell-1} g_m(k+k_i) R(k \to k+k_i,t) + \sum_{i=1}^{I'} \sum_{k=k_\ell}^{\infty} \frac{dg_m(k)}{dk} k_i R(k \to k+k_i,t) \\ &= J_{k_\ell}^{+} + \sum_{i=1}^{I'} \sum_{k=k_\ell}^{\infty} \frac{dg_m(k)}{dk} k_i \omega(k_i) h(k) f(k,t) \end{aligned} \tag{A.5}$$

Der erste Term wurde hier mit $J_{k_\ell}^{+}$ abgekürzt und bezeichnet alle mit $g_m(k)$ gewichteten Raten, die von einem Wert unter k_ℓ zu einem Wert über k_ℓ gehen. Für negative k_i führt man die Substitution $k_{alt} = k_{neu} - k_i$ beim zweiten Summenterm von (A.2) aus und erhält damit

$$\begin{aligned} \sum_{k=k_\ell}^{\infty} g_m(k) R(k \to k+k_i,t) &= \sum_{k=k_\ell+k_i}^{\infty} g_m(k-k_i) R(k-k_i \to k,t) \\ &= \sum_{k=k_\ell+k_i}^{k_\ell-1} g_m(k-k_i) R(k-k_i \to k,t) + \sum_{k=k_\ell}^{\infty} g_m(k-k_i) R(k-k_i \to k,t) \end{aligned}$$

$$\text{wobei } k_{I'+1},\ldots,k_{I''} < 0 \tag{A.6}$$

und weiter

$$\begin{aligned} \frac{dK_m(t)}{dt} &= -\sum_{i=I'+1}^{I''} \sum_{k=k_\ell+k_i}^{k_\ell-1} g_m(k-k_i) R(k-k_i \to k,t) + \sum_{i=I'+1}^{I''} \sum_{k=k_\ell}^{\infty} \big(g_m(k) - g_m(k-k_i)\big) R(k-k_i \to k,t) \\ &= -J_{k_\ell}^{-} + \sum_{i=I'+1}^{I''} \sum_{k=k_\ell}^{\infty} \frac{dg_m(k)}{dk} k_i \omega(k_i) h(k) f(k,t) \end{aligned} \tag{A.7}$$

Obwohl es auf den ersten Blick nicht den Anschein hat, sind $J_{k_\ell}^{-}$ die gewichteten Raten, die von einen Zustand größer als k_ℓ in einen niedrigeren Zustand übergehen. Jetzt kann man die beiden i-Summationen zusammenfassen und erhält

$$
\begin{aligned}
\frac{dK_m(t)}{dt} &= J_{k_\ell}^{+} - J_{k_\ell}^{-} + \sum_{i=1}^{I} \sum_{k=k_\ell}^{\infty} \frac{dg_m(k)}{dk} k_i \omega(k_i) h(k) f(k,t), \\
&= J_{k_\ell} + \sum_{i=1}^{I} k_i \omega(k_i) \underbrace{\sum_{k=k_\ell}^{\infty} g_{m-1}(k) f(k,t)}_{K_{m-1}},
\end{aligned}
\tag{A.8}
$$

wenn

$$
\frac{dg_m(k)}{dk} h(k) = g_{m-1}(k) \tag{A.9}
$$

erfüllt ist.

5.2 Anhang B: Quasilineare partielle Differentialgleichung 1.Ordnung

Dieser Anhang soll nur die wichtigsten Informationen zur Lösung von quasilinearen partiellen Differentialgleichung liefern. Er erhebt kein Anspruch auf eine vollständige Darstellung dieser Theorie. Für ein tiefergehendes Studium sei auf jedes Lehrbuch von partiellen Differentialgleichungen verwiesen z.B. [6].

Unter einer quasilinearen[11] partiellen Differentialgleichung erster Ordnung der Abhängigen z und der n Unabhängigen x_i versteht man ganz allgemein eine Gleichung der Form

$$\sum_{i=1}^{n} P_i(x_1, x_2, \ldots, x_n, z)\, p_i = R(x_1, x_2, \ldots, x_n, z)\,. \tag{B.1}$$

Hier ist zur Abkürzung $p_i = \dfrac{\partial z}{\partial x_i}$ gesetzt.

Unter einem Integral oder einer Lösung der Differentialgleichung (B.1) versteht man eine stetig differenzierbare Funktion $z = \varphi\,(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, die die Differentialgleichung zur Identität macht.

Der besseren Anschauung wegen beschränken wir uns zunächst auf $n = 2$, da in diesem Falle die Funktion $z = \varphi(x_1, x_2)$ eine Fläche im dreidimensionalen Raum darstellt. Wir schreiben dann kurz

$$\begin{aligned} x_1 &= x, \quad x_2 = y, \\ p &= \frac{\partial z}{\partial x}, \quad q = \frac{\partial z}{\partial y} \end{aligned} \tag{B.2}$$

also

$$P(x, y, z)p + Q(x, y, z)q = R(x, y, z). \tag{B.3}$$

Eine Kurve c: $s \to R^3$ heißt eine Charakteristik der Differentialgleichung, wenn sie folgendem Gleichungssystem gehorcht:

---

[11] Der Begriff „quasilinear“ dient zur Unterscheidung des Begriffes „linear“ bei den gewöhnlichen Differentialgleichungen: Während eine gewöhnlichen Differentialgleichung linear ist, wenn sie in der

$$\begin{aligned} \frac{dx}{ds} &= P(x,y,z) \\ \frac{dy}{ds} &= Q(x,y,z) \\ \frac{dz}{ds} &= R(x,y,z) \end{aligned} \tag{B.4}$$

In diesem Fall liegt die Kurve vollständig in der Lösung der Differentialgleichung, wenn die Anfangswerte der Kurve x_0, y_0, z_0 mit einer beliebigen Anfangsverteilung $z_0 = \varphi(x_0, y_0)$ übereinstimmen:

$$\begin{aligned} z(s) &= \varphi(x(s), y(s)), \\ \frac{d}{ds} z(s) &= \frac{d}{ds} \varphi(x(s), y(s)), \\ \dot{z} &= \dot{x}p + \dot{y}q, \\ R &= Pp + Qq. \end{aligned} \tag{B.5}$$

Eliminiert man dann den Kurvenparameter und danach mit Hilfe der Anfangsverteilungsfunktion $z_0 = \varphi(x_0, y_0)$ alle bis auf einen Anfangswert, ergibt sich die gesuchte Funktion z.

Eine Kontinuitätsgleichung für eine eindimensionale Verteilungsfunktion, die mit der Zeit variiert, möge ein illustratives Beispiel sein. Die Anfangsverteilung sei $z_0 = \varphi(x_0, t_0 = 0)$. Gesucht ist nun die Verteilungsfunktion, die sich nach einer Zeit t ergibt, wenn man die folgende Kontinuitätsgleichung zugrunde legt:

$$\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(ax^n z\right) = 0\,. \tag{B. 6}$$

Man erhält, nachdem man die x-Ableitung ausdifferenziert hat

$$\frac{\partial z}{\partial t} + ax^n \frac{\partial z}{\partial x} = -anx^{n-1} z\,. \tag{B. 7}$$

Die Charakteristischen Gleichungen lauten

Unbekannten und deren Ableitungen linear ist, genügt bei partiellen Differentialgleichung nur die Linearität der Ableitungen der Unbekannten.

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \frac{dt}{ds} = 1 \\ &\text{b)} \quad \frac{dx}{ds} = ax^n \\ &\text{c)} \quad \frac{dz}{ds} = -anx^{n-1}z \end{aligned} \tag{B. 8}$$

Es ist nun möglich den Kurvenparameter s schon vor dem Integrieren zu eliminieren. Das erleichtert in der Regel den Vorgang:

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \frac{dx}{dt} = ax^n \\ &\text{b)} \quad \frac{dz}{dx} = -n\frac{z}{x} \end{aligned} \tag{B. 9}$$

Die Integration dieses Systems liefert

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad x^{1-n} - x_0^{1-n} = a(1-n)\left(t - t_0\right) \\ &\text{b)} \quad \frac{z}{z_0} = \left(\frac{x_0}{x}\right)^n \end{aligned} \tag{B. 10}$$

z_0 in Gleichung (B. 10b) ist durch die Anfangsverteilung $\Phi(x_0, t_0)$ zur Zeit $t_0 = 0$ gegeben. Also

$$z = \left(\frac{x_0}{x}\right)^n \Phi(x_0, t_0)\,. \tag{B. 11}$$

Jetzt braucht man nur noch x_0 durch (B. 10a)

$$z = \left(\frac{\left(x^{1-n} - a(1-n)(t-t_0)\right)^{\frac{1}{1-n}}}{x}\right)^n \Phi\left(\left(x^{1-n} - a(1-n)(t-t_0)\right)^{\frac{1}{1-n}}, t_0\right) \tag{B. 12}$$

und t_0 durch 0 zu ersetzen

$$z = \left(1 - a(1-n)x^{n-1}t\right)^{\frac{n}{1-n}} \Phi\left(\left(x^{1-n} - a(1-n)t\right)^{\frac{1}{1-n}}\right). \tag{B. 13}$$

Mit mehr als zwei Parametern in der Verteilungsfunktion funktioniert das Ganze genauso, nur daß sich die Zahl der charakteristischen Gleichungen um die Zahl der Parameter erhöht (vgl. (B.1)):

$$\frac{dx_i}{ds} = P_i, \qquad \frac{dz}{ds} = R. \tag{B. 14}$$

Als Beispiel wollen wir eine Funktion f annehmen, die von x und y sowie der Zeit t abhängt. Die Kontinuitätsgleichung laute:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(ax^n f\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(by^m f\right) = 0 \tag{B. 15}$$

Daraus ergeben sich nach Elimination von s folgende charakteristischen Gleichungen:

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \frac{dx}{dt} = ax^m \\ &\text{b)} \quad \frac{dy}{dt} = by^n \\ &\text{c)} \quad \frac{df}{dt} = -f\left(amx^{m-1} + bny^{n-1}\right) \end{aligned} \tag{B. 16}$$

Die Gleichungen (B. 16 a + b) ergeben :

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad x^{1-m} - x_0^{1-m} = (1-m)a\left(t - t_0\right) \\ &\text{b)} \quad y^{1-n} - y_0^{1-n} = (1-n)b\left(t - t_0\right) \end{aligned} \tag{B. 17}$$

Gleichung (B. 16c) löst man, indem man x und y durch (B. 17) ersetzt:

$$\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = -\frac{am}{(1-m)a\left(t-t_0\right) + x_0^{1-m}} - \frac{bn}{(1-n)b\left(t-t_0\right) + y_0^{1-n}} \tag{B. 18}$$

und integriert:

$$\ln\left(\frac{f}{f_0}\right) = \frac{m}{m-1}\ln\left(\frac{(1-m)at + x_0^{1-m}}{x_0^{1-m}}\right) + \frac{n}{n-1}\ln\left(\frac{(1-n)bt + y_0^{1-n}}{y_0^{1-n}}\right) \tag{B. 19}$$

Dabei wurde der Anfangszeitpunkt t_0 wieder auf null gesetzt. Mit Hilfe der Logarithmusgesetze läßt sich dieser Ausdruck in Produkte zusammenfassen:

$$f = f_0\left(\frac{(1-m)at + x_0^{1-m}}{x_0^{1-m}}\right)^{\frac{m}{m-1}}\left(\frac{(1-n)bt + y_0^{1-n}}{y_0^{1-n}}\right)^{\frac{n}{n-1}}. \tag{B. 20}$$

f_0 geht nun durch die Anfangsverteilung $\Phi(x_0,y_0)$ hervor:

$$f = \Phi(x_0, y_0)\left(\frac{(1-m)at + x_0^{1-m}}{x_0^{1-m}}\right)^{\frac{m}{m-1}}\left(\frac{(1-n)bt + y_0^{1-n}}{y_0^{1-n}}\right)^{\frac{n}{n-1}}. \tag{B. 21}$$

Der letzte Schritt besteht nun darin die Anfangswerte x_0 und y_0 mit Hilfe der Charakteristiken (B. 17) zu eliminieren:

$$\begin{aligned} f(x,y,t) = \Phi\left(\left(x^{1-m} - (1-m)at\right)^{\frac{1}{1-m}}, \left(y^{1-n} - (1-n)bt\right)^{\frac{1}{1-n}}\right)\cdot \\ \left(1-(1-m)at\cdot x^{m-1}\right)^{\frac{m}{1-m}}\left(1-(1-n)bt\cdot y^{n-1}\right)^{\frac{n}{1-n}} \end{aligned} \tag{B. 22}$$

Es ist bei dem Charakteristikenverfahren außerordentlich wichtig die Integrationskonstanten mitzuziehen, da sie die Schnittstelle zwischen alter und neuer Verteilung darstellen. Das wird besonders deutlich, wenn man ein Problem numerisch lösen will (siehe Kap. 2.2.8).

5.3 Anhang C: Lösung der Kontinuitätsgleichung für SiO-Staub

In Abschnitt 3.3 erhielten wir die Kontinuitätsgleichung für den SiO-Staub:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial N_{Si}}\left(\frac{1}{\tau_{Si}} A(N_{Si}, N_O) f\right) + \frac{\partial}{\partial N_O}\left(\frac{1}{\tau_O} A(N_{Si}, N_O) f\right) = q(N_{Si}, N_O)\,. \tag{C. 1}$$

Daraus ergibt sich das Charakteristikensystem

$$\begin{aligned}
&\text{a)} \quad \frac{dN_{Si}}{dt} = \frac{1}{\tau_{Si}} \xi_A \left(N_{Si} V_{Si} + N_O V_O\right)^{2/3} \\
&\text{b)} \quad \frac{dN_O}{dt} = \frac{1}{\tau_O} \xi_A \left(N_{Si} V_{Si} + N_O V_O\right)^{2/3} \\
&\text{c)} \quad \frac{df}{dt} = -\frac{2}{3} \xi_A \, \gamma \left(N_{Si} V_{Si} + N_O V_O\right)^{-1/3} f + q(N_{Si}, N_O)
\end{aligned} \tag{C. 2}$$

mit der Abkürzung

$$\gamma = \frac{V_{Si}}{\tau_{Si}} + \frac{V_O}{\tau_O}\,.$$

Multipliziert man nun Gleichung (C. 2a) mit V_{Si} und Gleichung (C. 2b) mit V_O und addiert diese, erhält man eine Differentialgleichung für V

$$\frac{dV}{dt} = \gamma \xi_A V^{2/3}\,, \tag{C. 3}$$

die als Lösung

$$V^{1/3} - V_0^{1/3} = \frac{\gamma \xi_A t}{3} \tag{C. 4}$$

besitzt. Gleichung (C. 3) läßt sich nun mit den Gleichungen (C. 2 a + b) kombinieren, indem man Gleichung (C. 3) nach dt auflöst und in (C. 2 a + b) einsetzt. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned}
&\text{a)} \quad \frac{dN_{Si}}{dV} = \frac{1}{\tau_{Si}\gamma}\,, \\
&\text{b)} \quad \frac{dN_O}{dV} = \frac{1}{\tau_O\gamma}\,.
\end{aligned} \tag{C. 5}$$

Diese beiden Gleichungen lassen sich leicht integrieren, da τ und γ Konstanten sind:

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad N_{Si} - N_{Si,0} = \frac{1}{\tau_{Si}\gamma}(V - V_0), \\ &\text{b)} \quad N_O - N_{O,0} = \frac{1}{\tau_O\gamma}(V - V_0). \end{aligned} \qquad \text{(C. 6)}$$

Mit der letzten Gleichung aus (C. 2) wird genauso verfahren:

$$\frac{df}{dV} = -\frac{2}{3}\frac{f}{V} + \frac{q(N_{Si}, N_O)}{\gamma\xi_A V^{2/3}} . \qquad \text{(C. 7)}$$

Die Lösung ist

$$f = \left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3} f_0 + \int \frac{q(N_{Si}, N_O)}{\gamma\xi_A V^{2/3}} dV . \qquad \text{(C. 8)}$$

Weil die Quellen hier nicht bekannt sind, steht zu Abkürzung das Integral über die Quellen. Für dessen Lösung müssen die Charakteristiken für N_{Si} und N_O in q eingesetzt, das Volumenintegral gelöst und schließlich die Anfangswerte $N_{Si,0}$ und $N_{O,0}$ wieder mit den Charakteristiken eliminiert werden.

f_0 geht aus der Anfangsverteilung hervor:

$$f = \left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3} \Phi(N_{Si,0}, N_{O,0}) + \int \frac{q(N_{Si}, N_O)}{\gamma\xi_A V^{2/3}} dV \qquad \text{(C. 9)}$$

Jetzt braucht man nur noch die Konstanten V_0, $N_{Si,0}$, $N_{O,0}$ mit Hilfe der Gleichungen (C. 6 a + b) und (C. 4) zu eliminieren und erhält die gesuchte Verteilungsfunktion

$$\begin{aligned} f(N_{Si}, N_O, t) = &\left(\frac{V^{1/3} - \xi_A\gamma\frac{t}{3}}{V^{1/3}}\right) \cdot \\ &\Phi\left(N_{Si} - \frac{1}{\tau_{Si}\gamma}\left[V - \left(V^{1/3} - \xi_A\gamma\frac{t}{3}\right)^3\right], N_O - \frac{1}{\tau_O\gamma}\left[V - \left(V^{1/3} - \xi_A\gamma\frac{t}{3}\right)^3\right]\right) \\ &+ \int \frac{q(N_{Si}, N_O)}{\gamma\xi_A V^{2/3}} dV \end{aligned}$$

(C. 10)

6 LITERATURVERZEICHNIS

[1] z.B. A. Unsöld, B. Baschek: „Der neue Kosmos“. Springer-Verlag, Fünfte Auflage, Kap. 6

[2] A. Gauger, H.-P- Gail, E. Sedlmayr: „Dust formation, growth and evaporation in a cool pulsating circumstellar shell“. Astron. Astrophys. 235, 345-361 (1990)

[3] H.-P. Gail, E. Sedlmayr: „Dust formation in stellar winds. IV. Heteromolecular carbon grain formation and growth“. Astron. Astrophys. 206, 153-168 (1988)

[4] D. Krüger, P. Woitke, E. Sedlmayr: „A general multi-component method for the description of dust grain processing“. Astron. Astrophys. 113, 593-602 (1995)

[5] C. Hoffmann: „Grundlagen des Momentenverfahrens zur Beschreibung von Staubbildungsprozessen“. Studienarbeit am Institut für Astronomie und Astrophysik der TU-Berlin

[6] Courant, Hilbert: „Methoden der mathematischen Physik“. Band II, 2. Auflage 1968 S. 13.

[7] Bronstein, Semendjaev: „Taschenbuch der Mathematik“. B. G. Teubner Verlagsgesellschaft

[8] C. Dominik, E. Sedlmayr, H.-P. Gail: „Dust formation in stellar winds. VI. Moment equations for the formation of heterogenous and core-mantle grains“. Astron. Astrophys. 277, 578-594 (1993)

[9] E. Sedlmayr: „Dust condensation in stellar outflows“. L. J. Allamandola and A. G. G. M. Tielens (eds.), Interstellar Dust, 467-477

[10] J.-M. Winters, C. Dominik, E. Sedlmayr: „Theoretical spectra of circumstellar dust shells around carbon-rich asymptotic giant branch stars“. Astron. Astrophys. 288, 255-272 (1994)

[11] C. Dominik, H.-P. Gail, E. Sedlmayr: „The size distribution of dust particles in a dust-driven wind“. Astron. Astrophys. 223, 227-236 (1989)

[12] E. Schmutzer: „Grundlagen der Theoretischen Physik“. Teil I, BI Wissenschaftsverlag (1989)

7 DANKSAGUNG

Auf dem Weg zu dieser Diplomarbeit haben mir viele Personen geholfen, denen ich zu tiefstem Dank verpflichtet bin. Die Reihenfolge der nachstehenden Aufzählung ist rein zufällig und gibt keinen Hinweis darauf, wer mir mehr oder weniger geholfen hat, bzw. wem ich mehr oder weniger danke.

An dieser Stelle danke ich...

… meiner Familie für die emotionale und finanzielle Unterstützung

… meiner Schwester, die für mich die Studienarbeit abgetippt hat

… Prof. Sedlmayr für die interessante Aufgabe und die Unterstützung beim Antrag für die Studienhilfe

… dem Bezirksamt Wilmersdorf von Berlin, das dem Antrag zugestimmt hat

… Beate für die geduldige Hilfe und den vielen wissenschaftlichen und formellen Tips und Tricks (von denen **ich** einen nie befolgt habe ;-)

… Boris und Jessica, die mir ihren schnellen Drucker zur Verfügung gestellt haben

… meinem sozialen Umfeld, das dafür sorgt, daß man nicht nur in Formeln spricht.