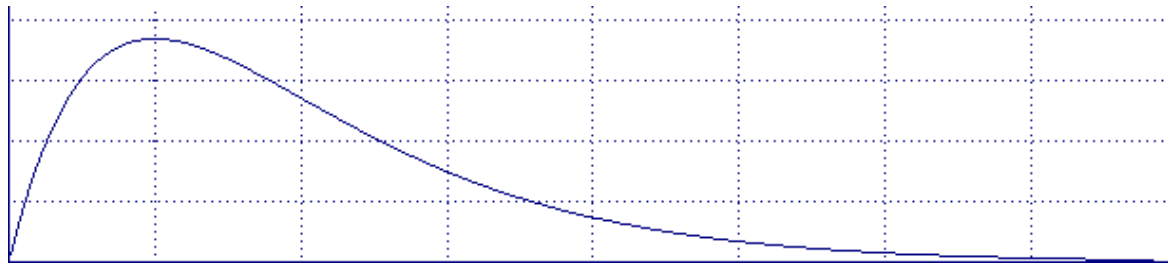


## **Boltzmann - Maxwell - Verteilung - Dokumentation**

**Problemstellung:** Betrachtet man die Energieverteilung der Teilchen eines Gases, so stellt man fest, daß nicht alle Teilchen die gleiche Energie haben (z.B. verdunstet Wasser schon bei 20°C, woraus man schließen kann, daß bestimmte Teilchen eine höhere Energie als die Durchschnittsenergie haben.). Vielmehr bildet sich eine Energieverteilung, die sich auch mathematisch beschreiben läßt:

**Die Boltzmann-Maxwell-Verteilung:**

$$f(E) = 4\pi(M/(2\pi * R * T))^{3/2} * 2E * Na/M * e^{-E*Na/(R*T)}$$



Mit Hilfe unseres Programms wollten wir nun zeigen, daß sich die aus theoretischen Überlegungen zur kinetischen Gastheorie herleitbare Verteilung von Teilchen eines Gases tatsächlich einstellt, wenn man die Flugbahnen einzelner Teilchen möglichst exakt berechnet. Die Erhaltene Verteilung sollte sodann mit der theoretischen Kurve vergleichbar sein.

- Die Randbedingungen waren:
1. Die Teilchen führen nur elastische Stöße aus.
  2. Die Teilchen befinden sich in einem genau definierten Raum, der dem Raum entspricht, den die gegebene Teilchenanzahl im Mittel einnehmen würde.
  3. Die Wand wird als ideal elastisch angesehen; die Masse der Wand geht gegen unendlich.
  4. Die Teilchen sind Kugeln, deren Durchmesser gegeben ist.

**Lösung:** Unserem Programm werden Zunächst wird die quadratisch gemittelte Teilchengeschwindigkeit<sup>1</sup> sowie die Raumgröße aus gegebenen Werten<sup>2</sup> berechnet. Sodann wird die Richtung der Geschwindigkeit (am Anfang werden alle Teilchen auf die gleiche Geschwindigkeit gesetzt) sowie der genaue Ort der Teilchen innerhalb des Volumens durch Zufall festgelegt. Dies sollte Effekte (z.B. wenn alle Teilchen in eine Richtung fliegen, gibt es evtl. keine Zusammenstöße), die sich aus den Anfangsbedingungen ergeben könnten (nach einigen Berechnungen) minimieren.

Sodann wird berechnet, wann der nächste Stoß stattfindet. Hierzu werden alle möglichen Stöße in allen möglichen Stoßarten (Wand - und Teilchenzusammenstöße (jedes mit jedem)) durchprobiert und verglichen.

---

<sup>1</sup> Wenn jedes Teilchen am Anfang die gleiche Geschwindigkeit und das Gas eine bestimmte Temperatur haben soll, so darf man nicht einfach die Durchschnittsgeschwindigkeit nehmen, da ja nicht die "Geschwindigkeitserhaltung", sondern die Energieerhaltung gewährleistet sein muß.

<sup>2</sup> Temperatur, Druck, Anzahl der Teilchen, Molare Masse

Über das gefundene Zeitintervall werden die neuen Ortsvektoren aller Teilchen bestimmt. Daraufhin werden die neuen Geschwindigkeitsvektoren des bzw. der kollidierenden Teilchen(s) berechnet. Dazu dient in allen Fällen sowohl die Energieerhaltung als auch die Impulserhaltung als Grundlage. Dies führt dazu, daß ein Zusammenstoß mit der Wand auf eine Umkehr der Geschwindigkeitsvektoren in der entsprechenden Richtung hinausläuft. Bei Teilchenzusammenstößen führen diese Gesetzmäßigkeiten dazu, daß sich die Teilchen in einem mitbewegten Koordinatensystem (ein Teilchen ruht, dies dient einer besseren Vorstellung und einer einfacheren Berechnung; Wechsel zwischen Inertialsystemen sind ja allgemein erlaubt) rechtwinklig trennen (gilt nur für Teilchen gleicher Masse, da dann  $V^2 = V_1^2 + V_2^2$  (Pythagoras)). Diese Berechnung wird nun über längere Zeiträume (Der simulierte Zeitraum beträgt trotzdem nur maximal nur ca.  $10^{-6}$  s. Da aber in Gasen bei normalen Bedingungen sehr hohe Stoßfrequenzen (Größenordnung ca.  $10^{10}$ ) herrschen reicht dies vollkommen aus.) wiederholt. Da sich eine Gleichgewichtsverteilung erst nach vielen Stößen einstellt, und da die Rechenleistung eines normalen PCs für Teilchenanzahlen, die wesentlich größer als 1000 sind, nicht ausreicht, mußten wir eine Mittelwertbildung durchführen, denn z.B. 20 Teilchen könne keine richtige Gleichgewichtsverteilung ausbilden, da ja ein Teilchen schon 5% der Gesamtverteilung ausmacht und das Gleichgewicht, das sich hier einstellt ja kein statisches sondern ein dynamisches ist. Deswegen haben wir die einzelnen Verteilungen über einen gewissen Zeitraum gemittelt.

**Das Programm:** Damit das Programm nicht zu unübersichtlich wird, haben wir es in mehrere Units gegliedert.

Die Units *Monitor*, *Intro*, *Tasten*, *Speichern* werden nur für Auswertung, Grafikausgabe und Bedienung benötigt.

Die Unit *Struktur* beinhaltet die Datenstruktur des Programms. Entscheidend ist der Array "Teil". In ihm werden die Positions- und Geschwindigkeitsvektoren gespeichert. Desweiteren werden einige physikalische Konstanten festgelegt.

Die Unit *Allgor* beinhaltet Prozeduren um die Variablen auf Anfangswerte zu setzen, und einige mathematische Funktionen.

Die Unit *Rechner* enthält alle Prozeduren, die benötigt werden, um das Teilchensystem zu simulieren.

**Procedure Treffer:** Berechnet den nächsten evtl. Treffer zweier Teilchen unter Verwendung der nach t umgestellten Abstandsgleichung:  $D^2 = \sum_1^3 (\Delta x_i + \Delta v_i * t)^2$

Um sicherzugehen, daß für die Teilchen nicht bereits neue Vektoren berechnet wurden, wird noch geprüft, ob die Ableitung der Abstandsgleichung kleiner null ist.

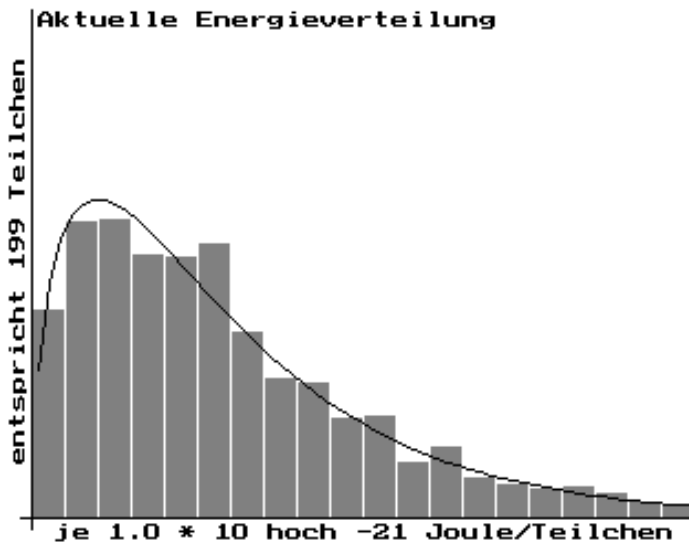
**Procedure Wandberührung:** Berechnet die nächste Berührung eines Teilchens mit einer der Außenwände. Damit die Geschwindigkeitsrichtung eines Teilchen nicht zwei mal hintereinander umgekehrt wird, wird zusätzlich geprüft, ob der Geschwindigkeitsvektor nicht bereits umgekehrt wurde.

**Procedure Nächster\_Treffer:** Berechnet die als nächstes vorkommende Kollision unter Verwendung der Prozeduren "Treffer" und "Wandberührung".

**Procedure Neue\_Vektoren:** Berechnet die neuen Geschwindigkeitsvektoren nach einem Zusammenstoß. Als erstes wird eine Transformation in ein Koordinatensystem, in dem ein Teilchen ruht durchgeführt. Desweiteren wird ein Einheitsvektor zwischen den Mittelpunkten der beiden Teilchen bestimmt. Mit Hilfe der Überlegung, daß das ruhende Teilchen nur in

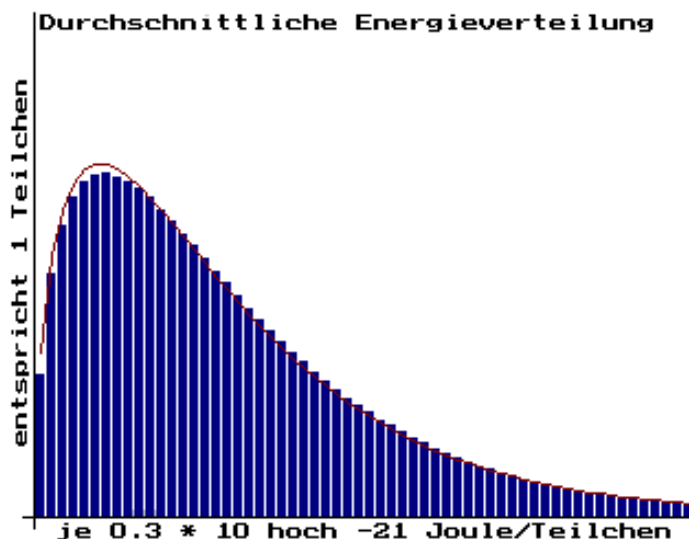
Richtung des Einheitsvektors beschleunigt werden kann, wird der Geschwindigkeitsvektor dieses Teilchen bestimmt. Da das zweite Teilchen sich rechtwinklig zum ersten Teilchen (siehe oben) wegbewegen muß, kann aus der Impulserhaltung die Geschwindigkeit mittels vektorieller Subtraktion der Geschwindigkeit des ersten Teilchens von der Geschwindigkeit vor dem Stoß (bewegtes Teilchen) berechnet werden.

### Einige Probedurchläufe:



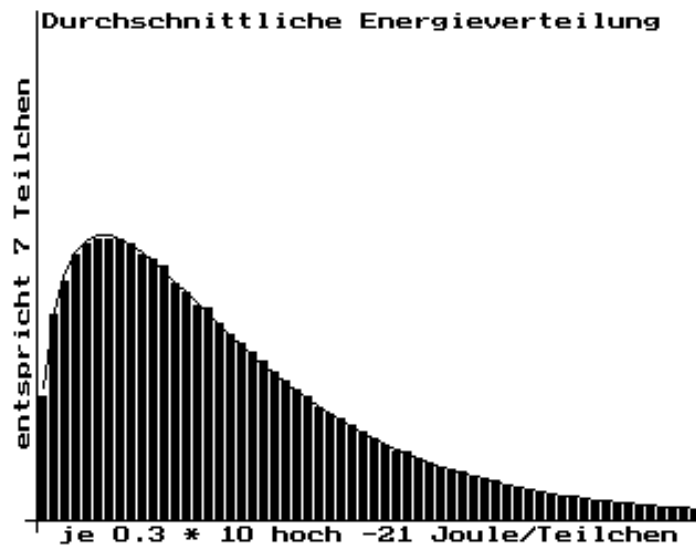
1. Berechnung von Butan (am besten geeignet, da der große Teilchendurchmesser eine hohe Kollisionsrate zwischen den einzelnen Teilchen bewirkt) bei Standardbedingungen mit 1000 Teilchen: (2100 Stöße zwischen Teilchen berechnet)

Wie man sieht, erhält man selbst bei 1000 Teilchen nur eine unebene Verteilung!



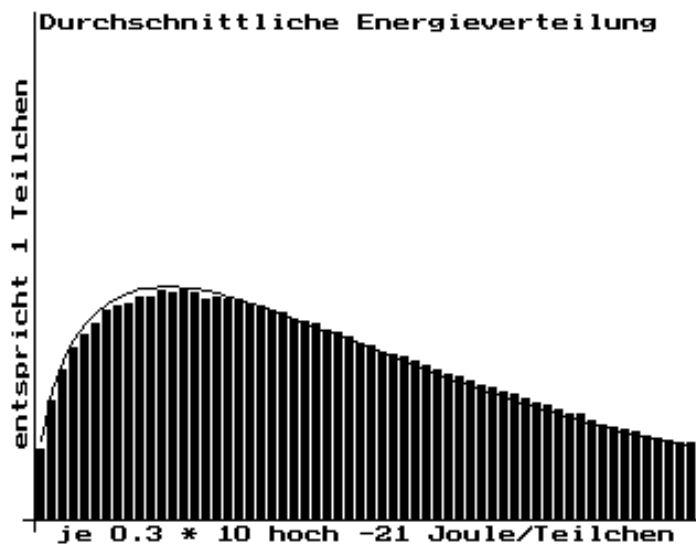
2. Berechnung von Butan bei Standardbedingungen mit 20 Teilchen: (4000000 Stöße zwischen Teilchen berechnet)

Die gemittelte Kurve entspricht also ziemlich genau der theoretischen Vorhersage. Eine kleine Abweichung erkennt man nur im Extrema. Dies liegt an der geringen Teilchenanzahl, mit der gerechnet wurde.



3. Identische Bedingungen wie unter 2. , jedoch nun mit 100 Teilchen: (230000 Stöße zwischen Teilchen berechnet)

Aufgrund der höheren Teilchenanzahl ist nun der Fehler im Bereich des Extremas minimiert worden!



4. Berechnung von Butan bei 300°C und sonst Standardbedingungen mit 20 Teilchen: (1100000 Stöße zwischen Teilchen berechnet)

Auch hier bestätigt das Programm die Theorie.