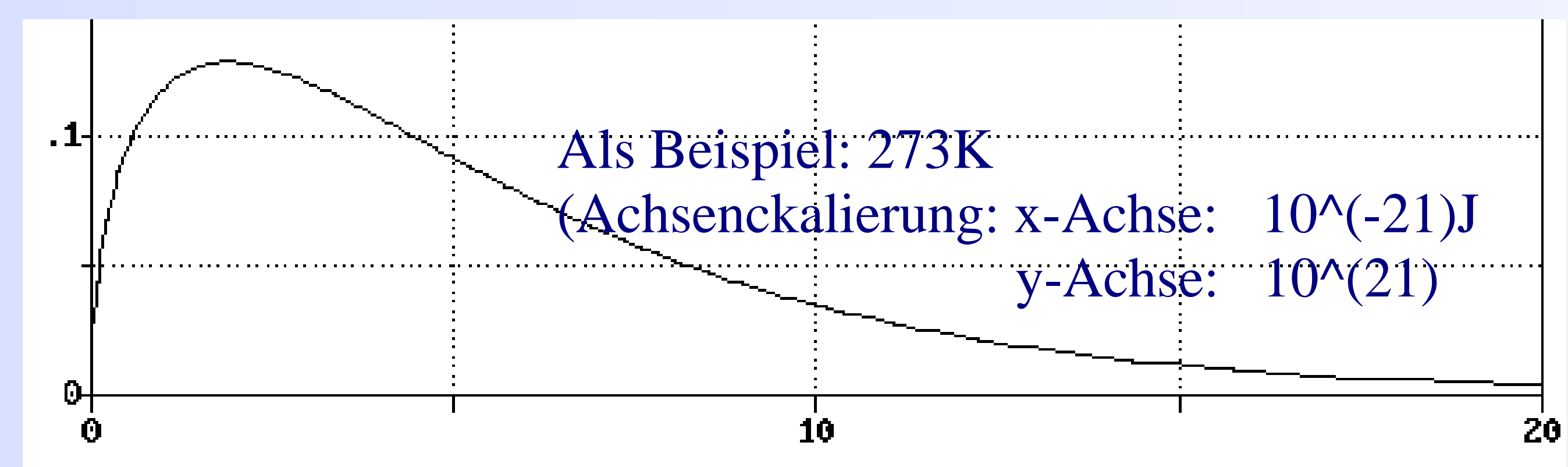


BOLTZMANN - MAXWELL - VERTEILUNG : COMPUTERSIMULATION

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:

$$f(E) = \frac{2}{\sqrt{p}} \cdot \left(\frac{1}{k_B \cdot T} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{E} \cdot e^{-\frac{E}{k_B \cdot T}}$$



Mit Hilfe eines 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:

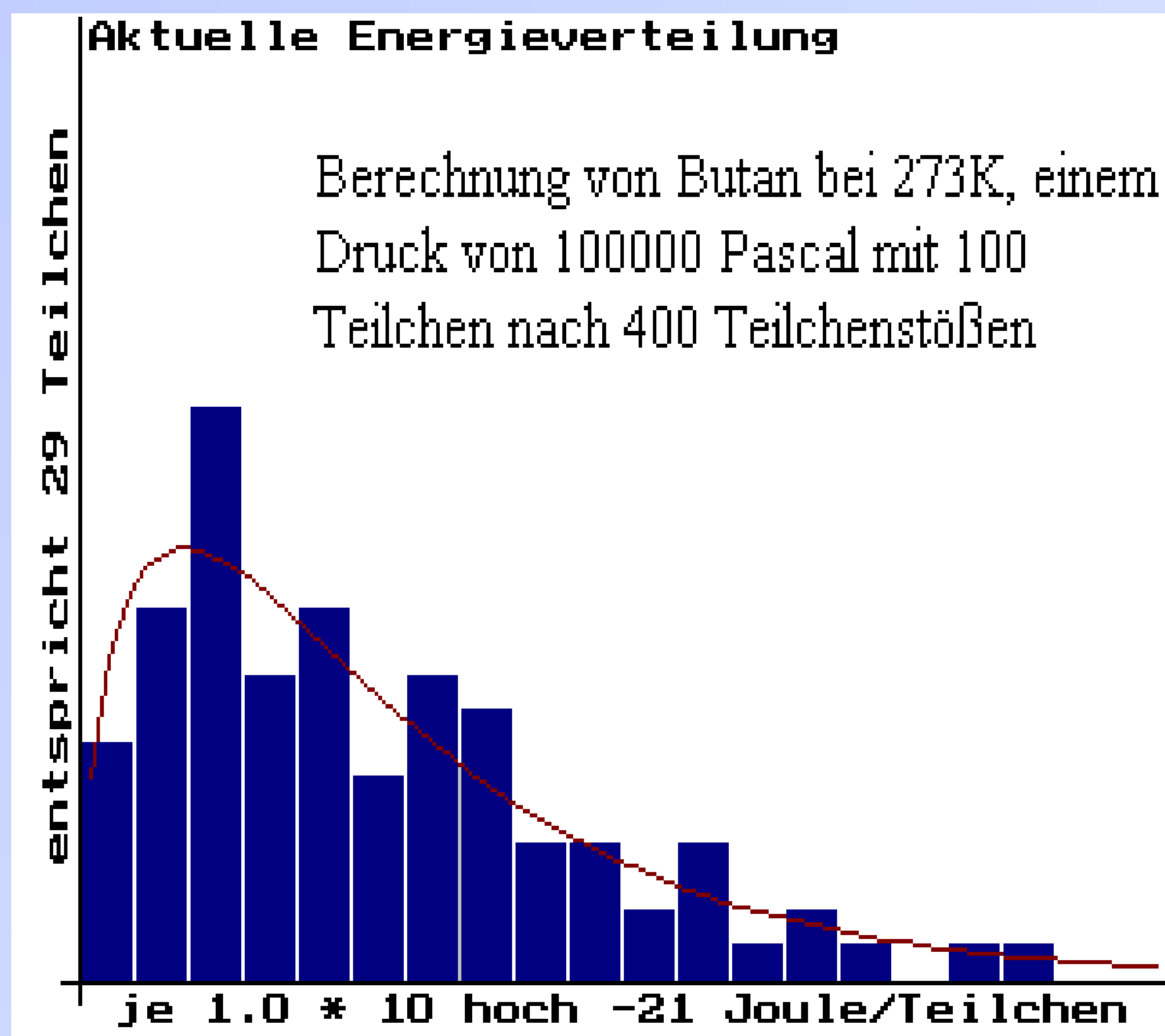
1. Die Teilchen sind Kugeln, deren Durchmesser gegeben sind.
2. Die Teilchen führen nur elastische Stöße aus.
3. Die Teilchen befinden sich in einem genau definierten Raum, der dem Raum entspricht, den die gegebene Teilchenanzahl im Mittel einnehmen würde.
4. Die Wand wird als ideal elastisch angesehen;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

Das Programm geht folgendermaßen vor: Zuerst werden die Teilchen zufällig im Raum verteilt, wobei jedes Teilchen die gleiche, der vorgegebenen Temperatur entsprechende Geschwindigkeit erhält. Nun beginnt die Simulation. Dazu wird berechnet, wann die nächste Kollision stattfindet. Hierzu werden alle möglichen Stöße in allen möglichen Stoßarten [Wand- und Teilchenzustammenstöße (jedes mit jedem)] durchprobiert und verglichen. Der Zusammenstoß, der nach dem kürzesten Zeitintervall¹ zustandekommt, gibt das Zeitintervall vor, für das die Ortsvektoren aller Teilchen anhand deren Geschwindigkeitsvektoren neu berechnet werden. Daraufhin werden die neuen Geschwindigkeitsvektoren des bzw. der kollidierenden Teilchen(s) berechnet. Diese Berechnung wird nun über längere Zeiträume² 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 können keine richtige Gleichgewichtsverteilung ausbilden, da ja ein Teilchen schon 5% der Gesamtverteilung ausmacht und das Gleichgewicht, das sich hier einstellt, kein statisches sondern ein dynamisches ist. Deswegen haben wir die einzelnen Verteilungen über einen gewissen Zeitraum gemittelt.

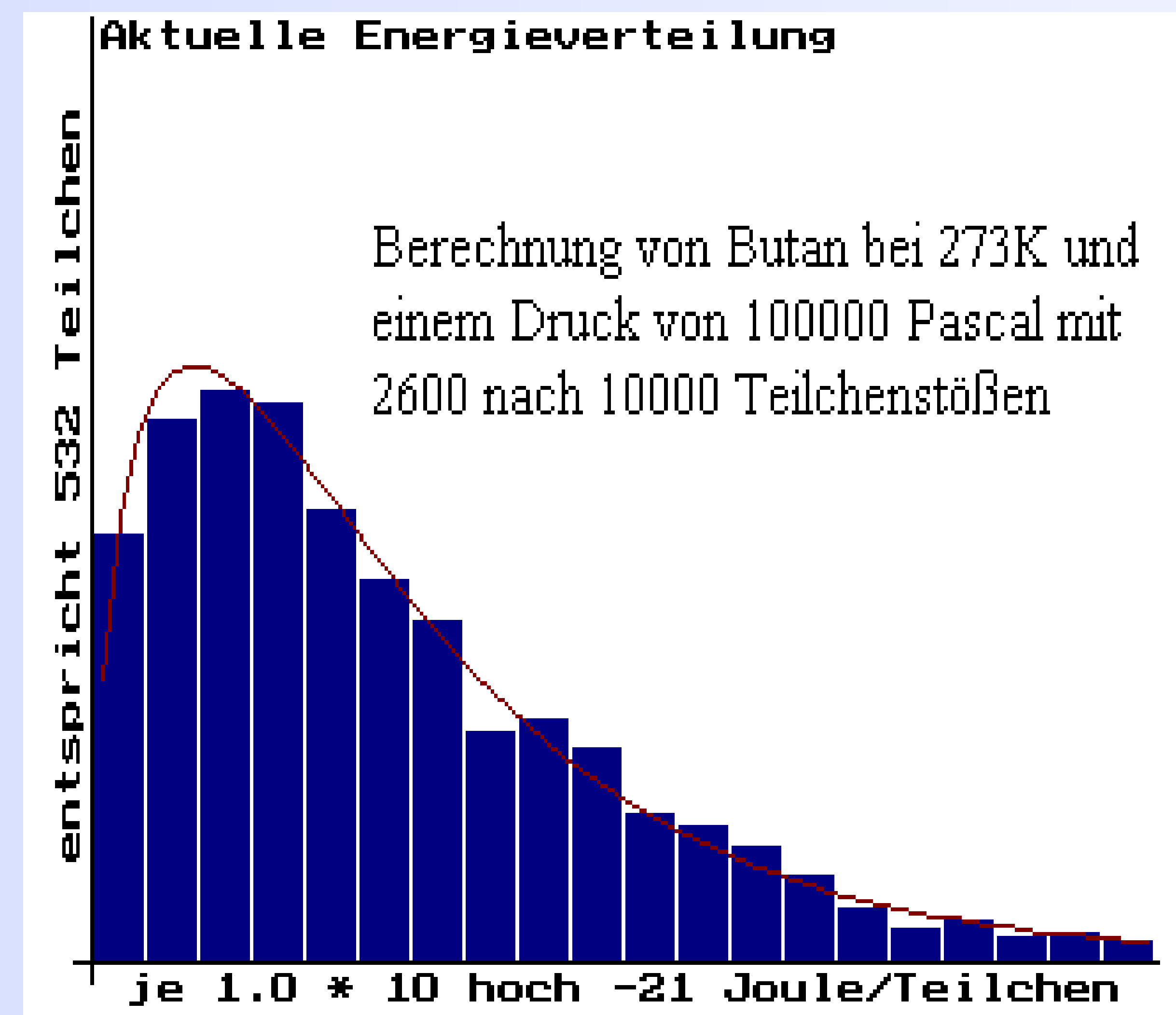
¹Berechnet, indem für den Teilchen-Teilchen-Zusammenstoß der Abstand der zwei Teilchen in Abhängigkeit von der Zeit gleich dem Durchmesser eines Teilchens gesetzt wird, und nach der Zeit umgestellt wird; für einen Zusammenstoß mit der Wand wird die Bewegungsgleichung des speziellen Teilchens gleich den Koordinaten der Raumwänden gesetzt

²Der simulierte Zeitraum beträgt trotzdem maximal nur ca. 10⁻⁶ s. Da aber in Gasen bei normalen Bedingungen sehr hohe Stoßfrequenzen (Größenordnung ca. 10¹⁰ Hz) herrschen, reicht dies vollkommen aus.

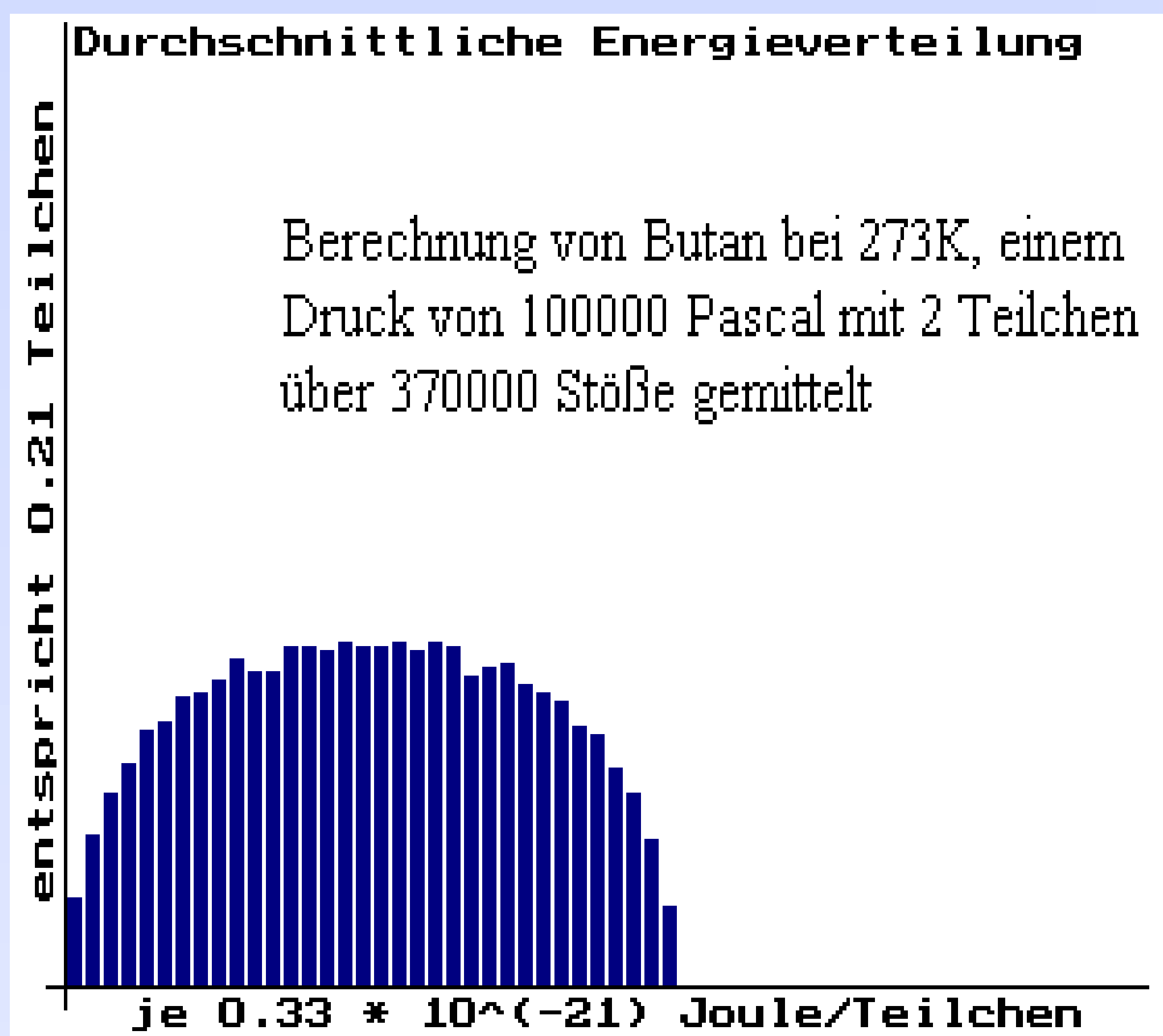
Bei den Diagrammen entspricht die durchgezogene Linie der Vorhersage der Theorie, die Balken entsprechen der Energieverteilung der simulierten Teilchen.



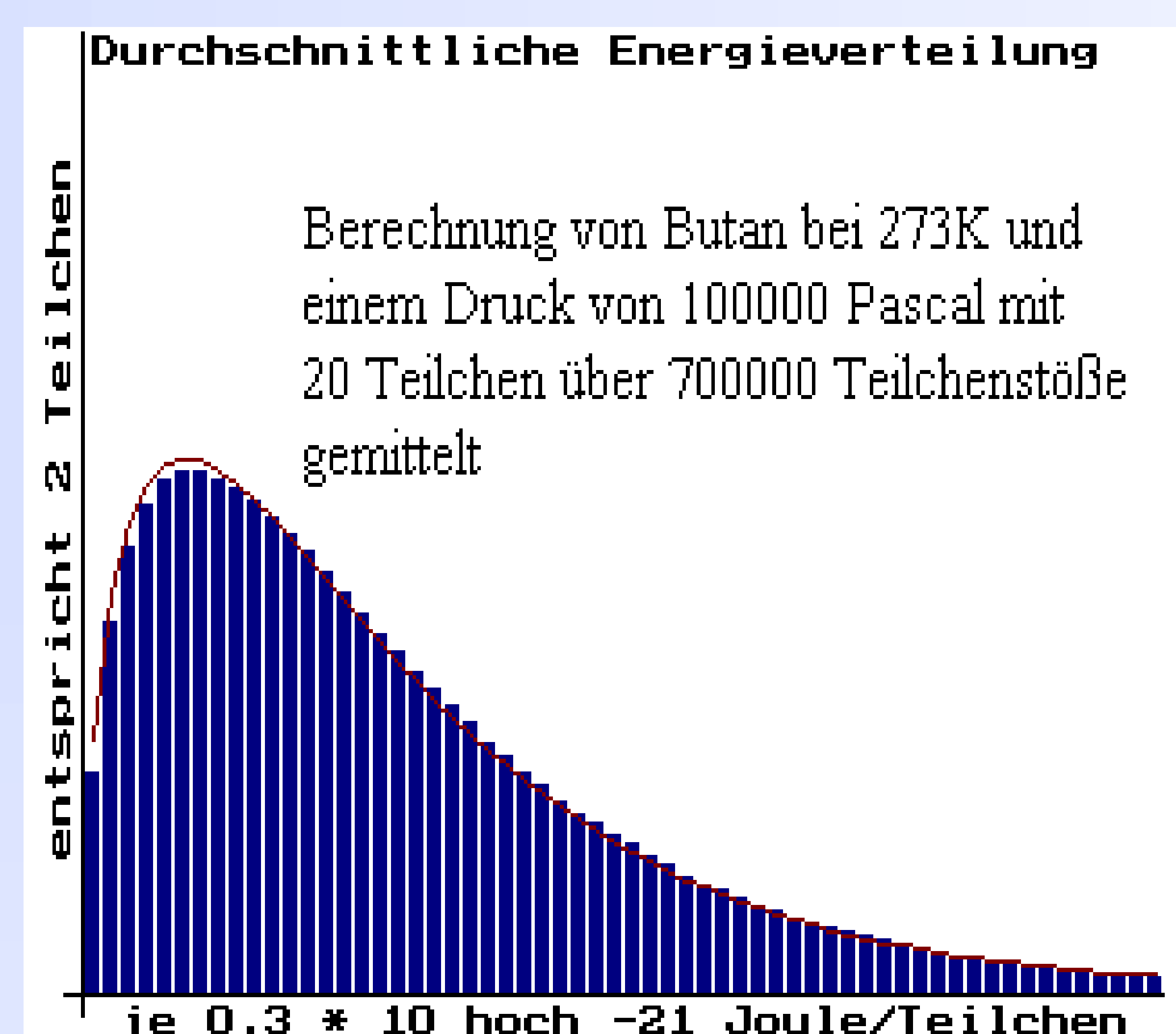
Wie man sieht, ergibt sich hier kein Gleichgewicht, sondern eher eine dynamische und dadurch unebene Verteilung.



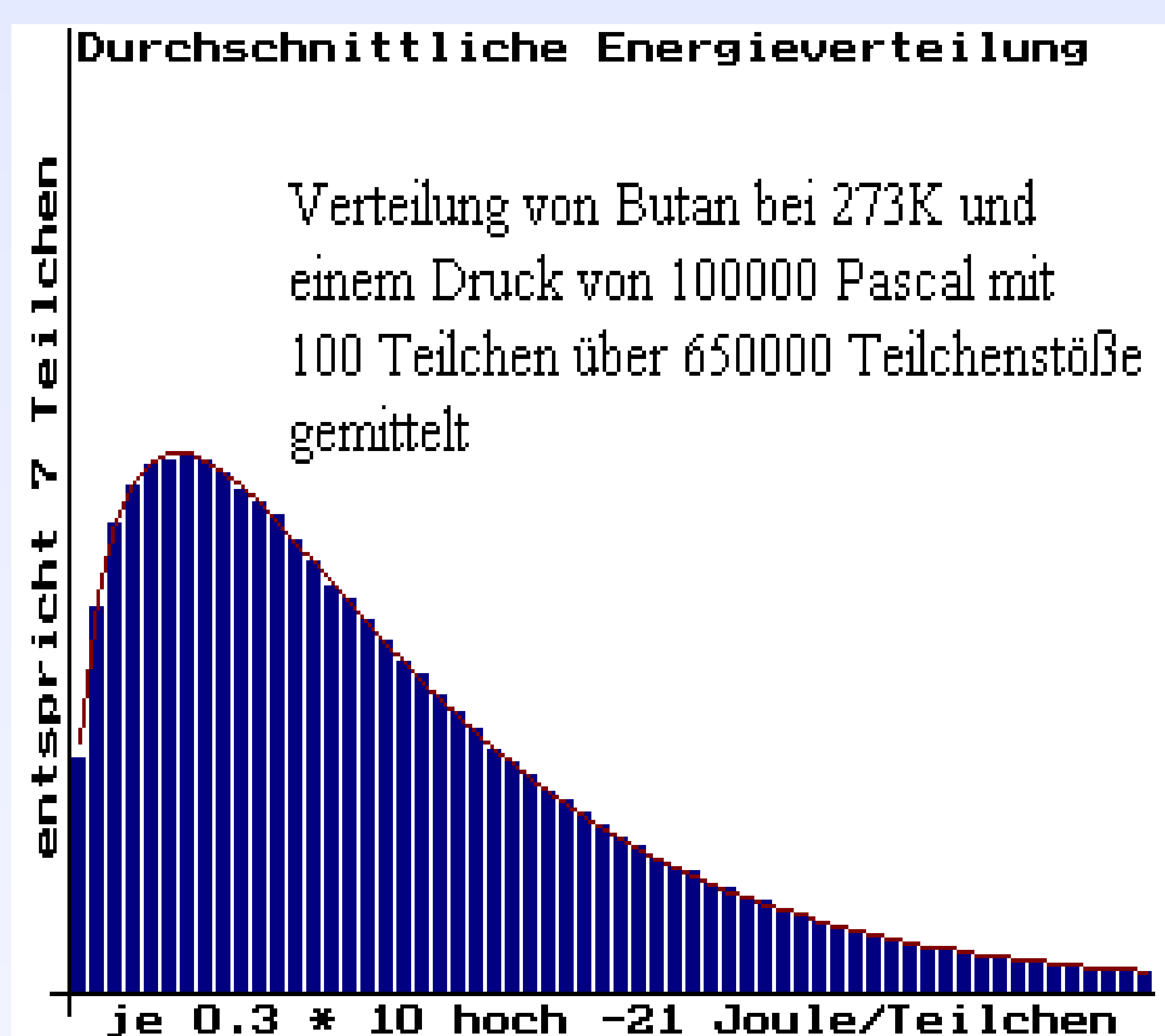
Dieses Diagramm entspricht schon viel mehr unseren Erwartungen, jedoch mußte unser armer PC dafür auch etwa zwei Monate lang jeweils die ganze Nacht lang schufften! Aus diesem Grund haben wir die weiteren Berechnungen gemittelt.



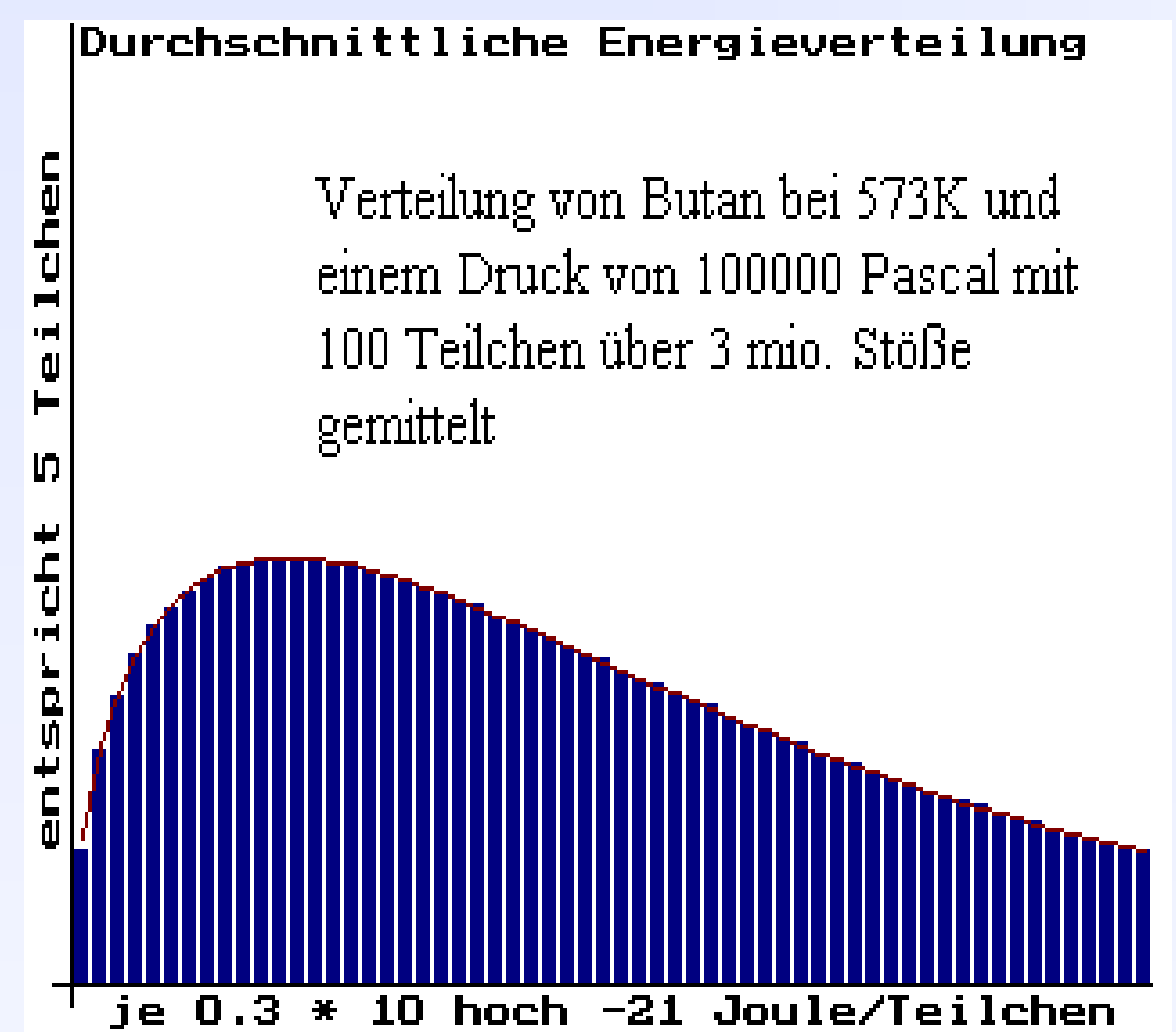
Bei zwei Teilchen ergibt sich eine symmetrische Energieverteilung, da eine Abweichung des einen Teilchens vom Mittelwert der Energie eine Abweichung des anderen Teilchens in die andere Richtung bedeutet. Eine größere Teilchenmenge ist deshalb sinnvoll.



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



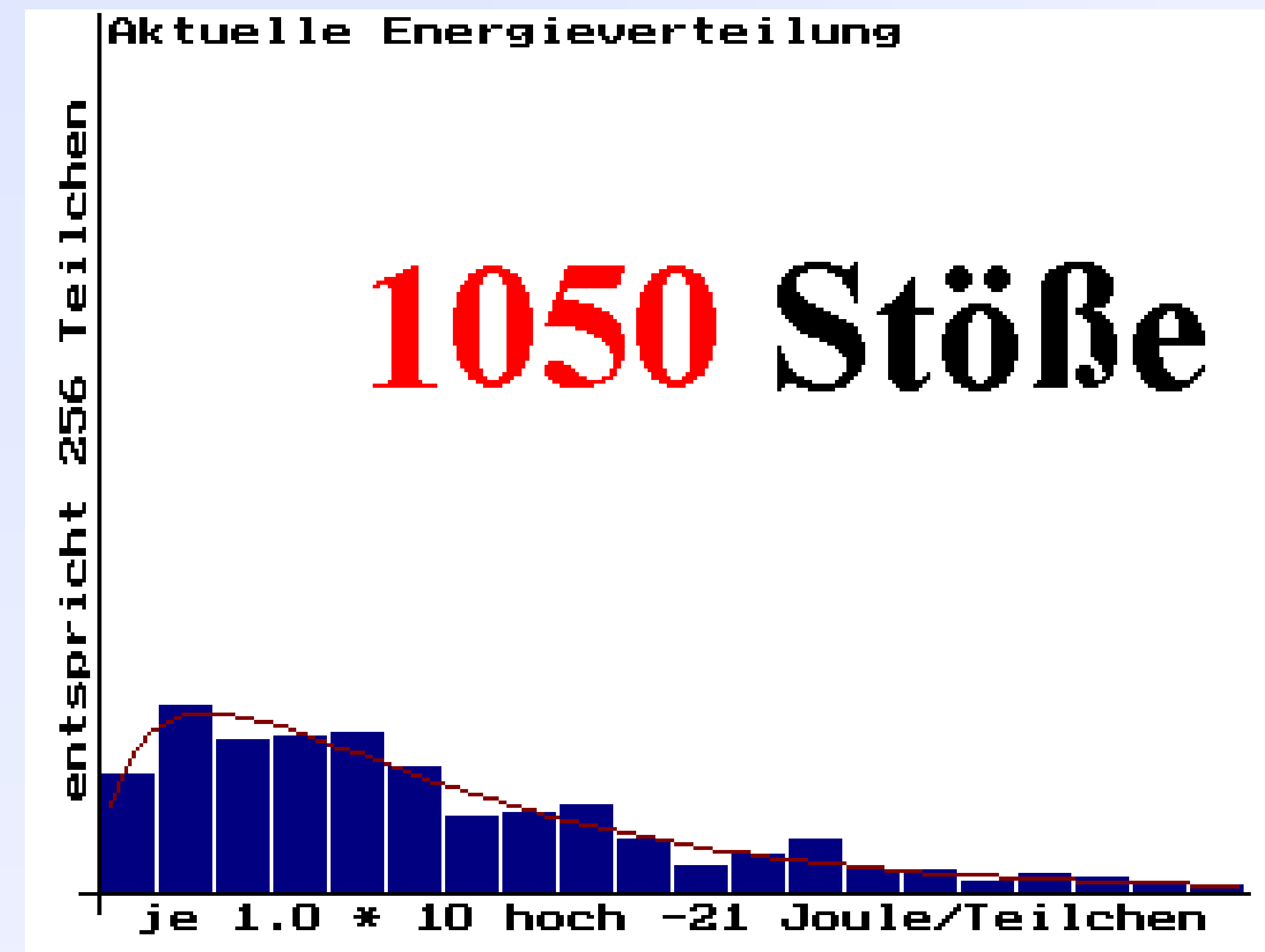
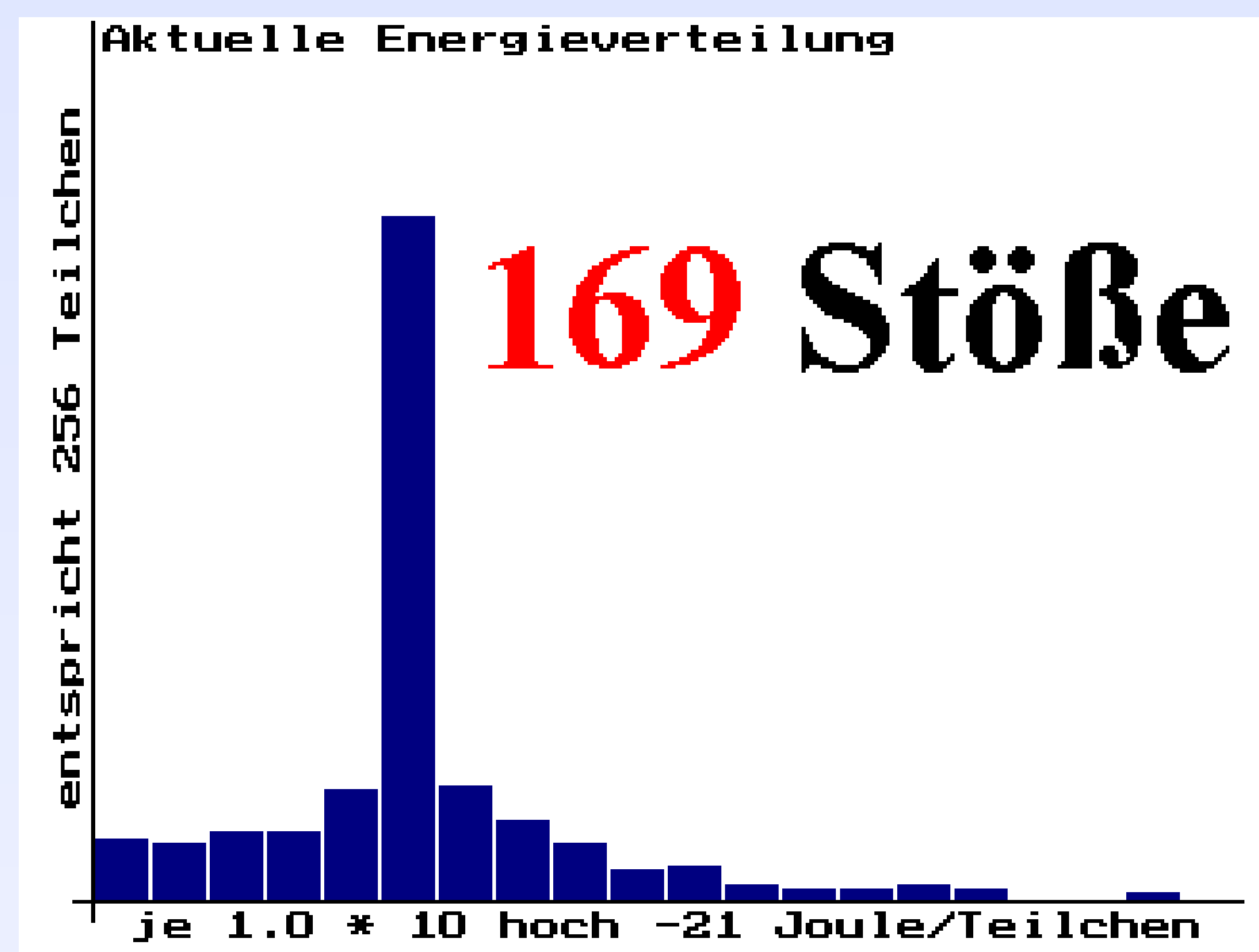
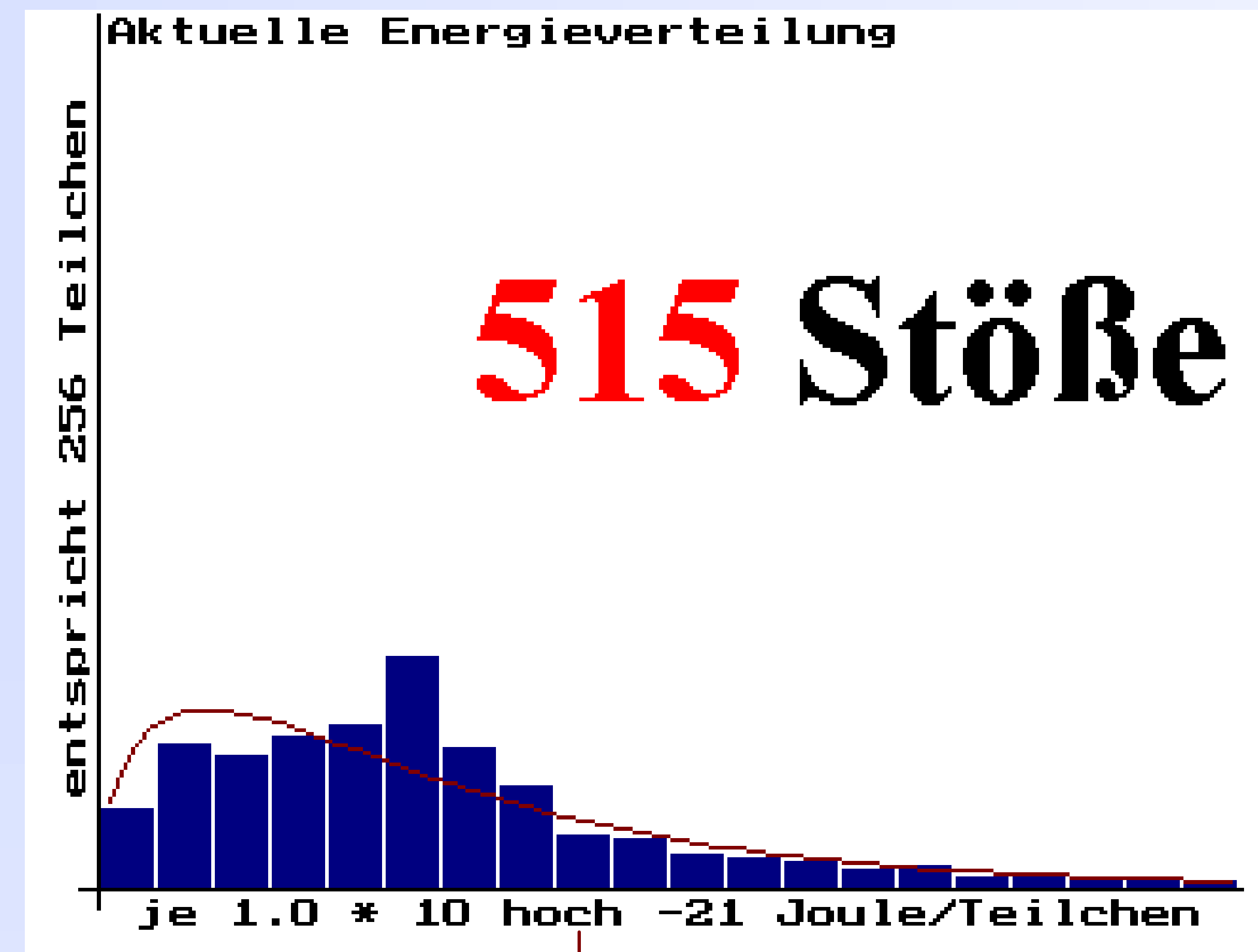
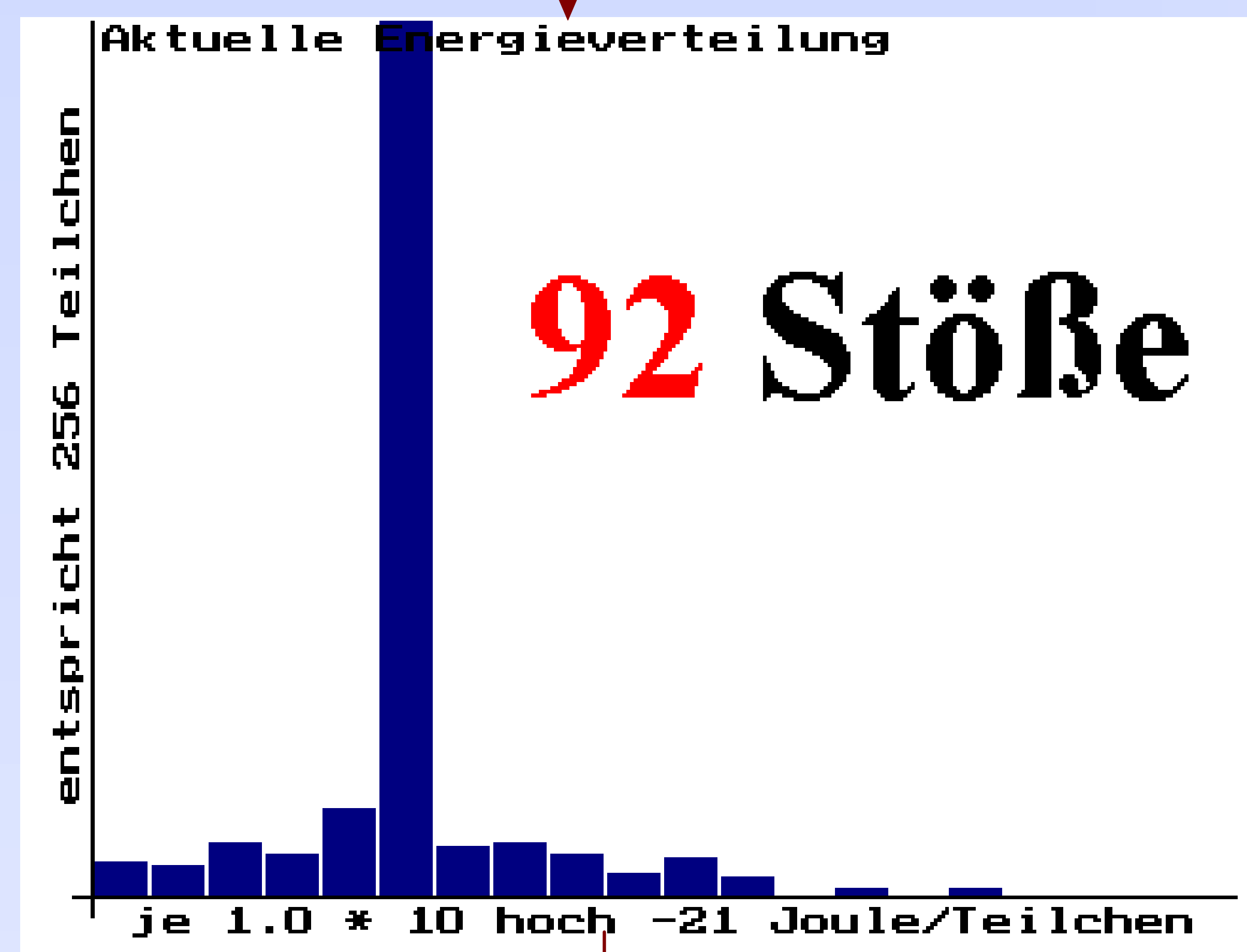
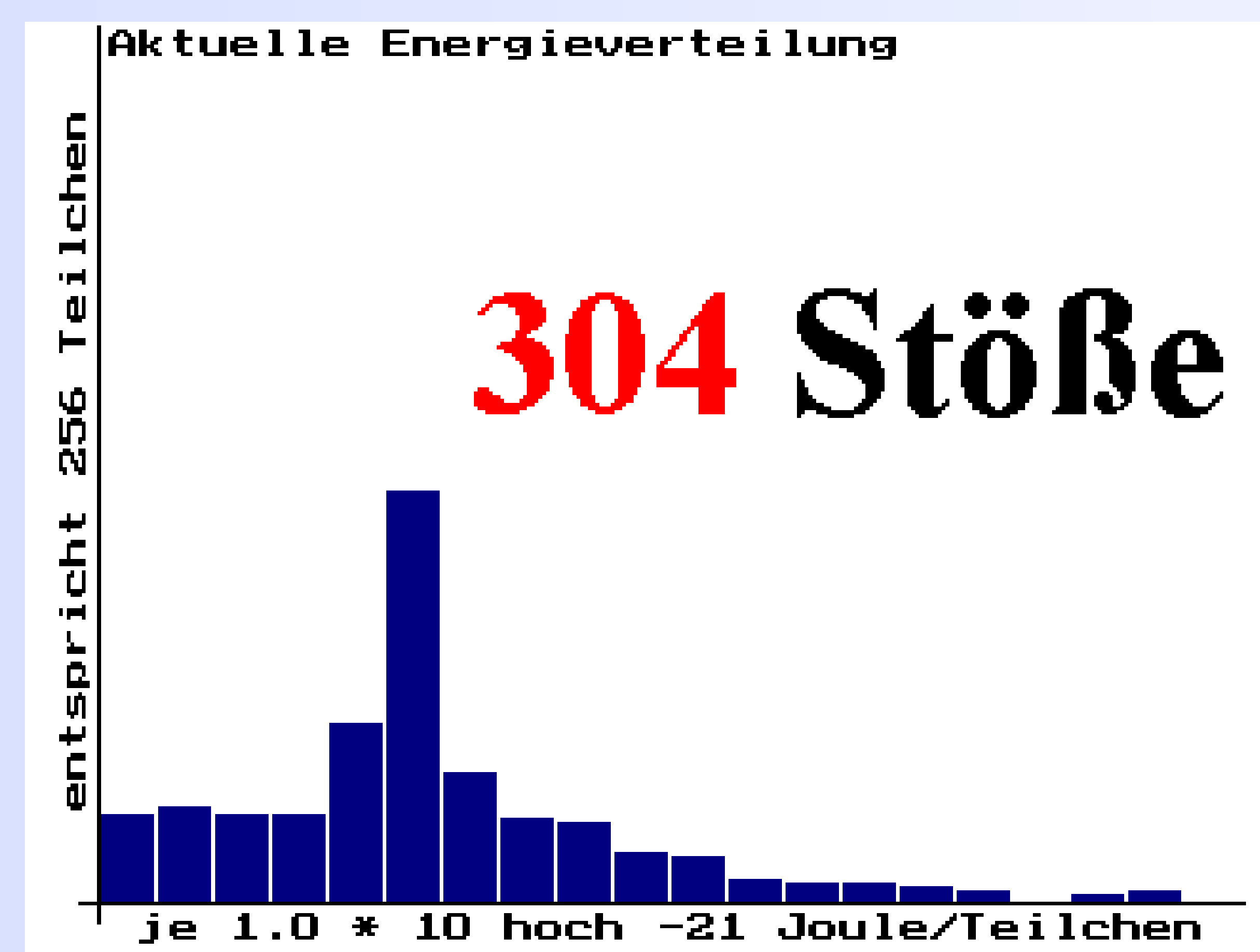
Der Fehler am Maximum ist nun minimal. 100 Teilchen reichen also für eine theoriekonforme Verteilung aus.



Auch hier zeigt sich schon bei 100 Teilchen eine ordentliche Verteilung.

Entwicklung zum Gleichgewicht:

Berechnung von Butan unter Standardbedingungen mit 400 Teilchen

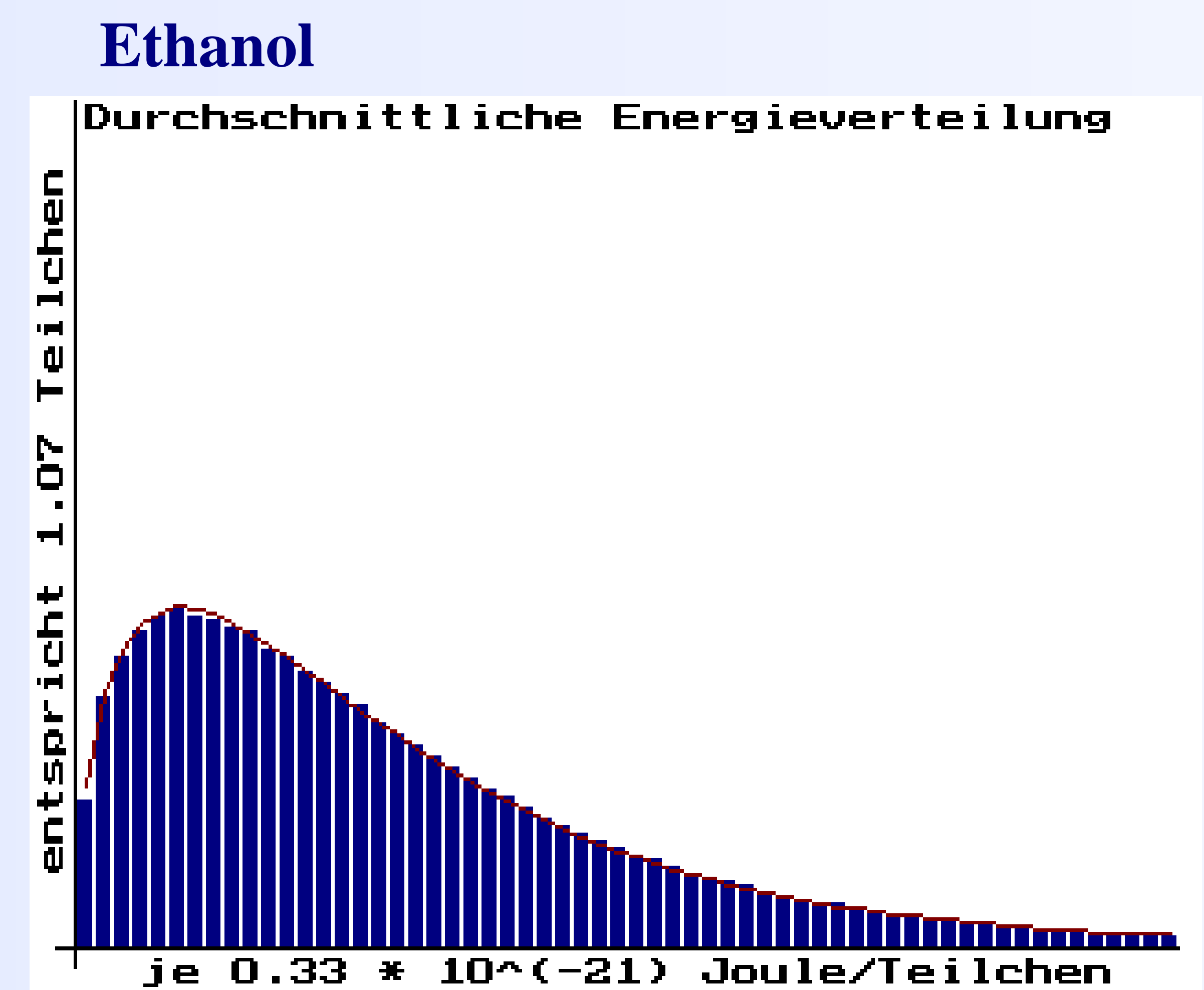
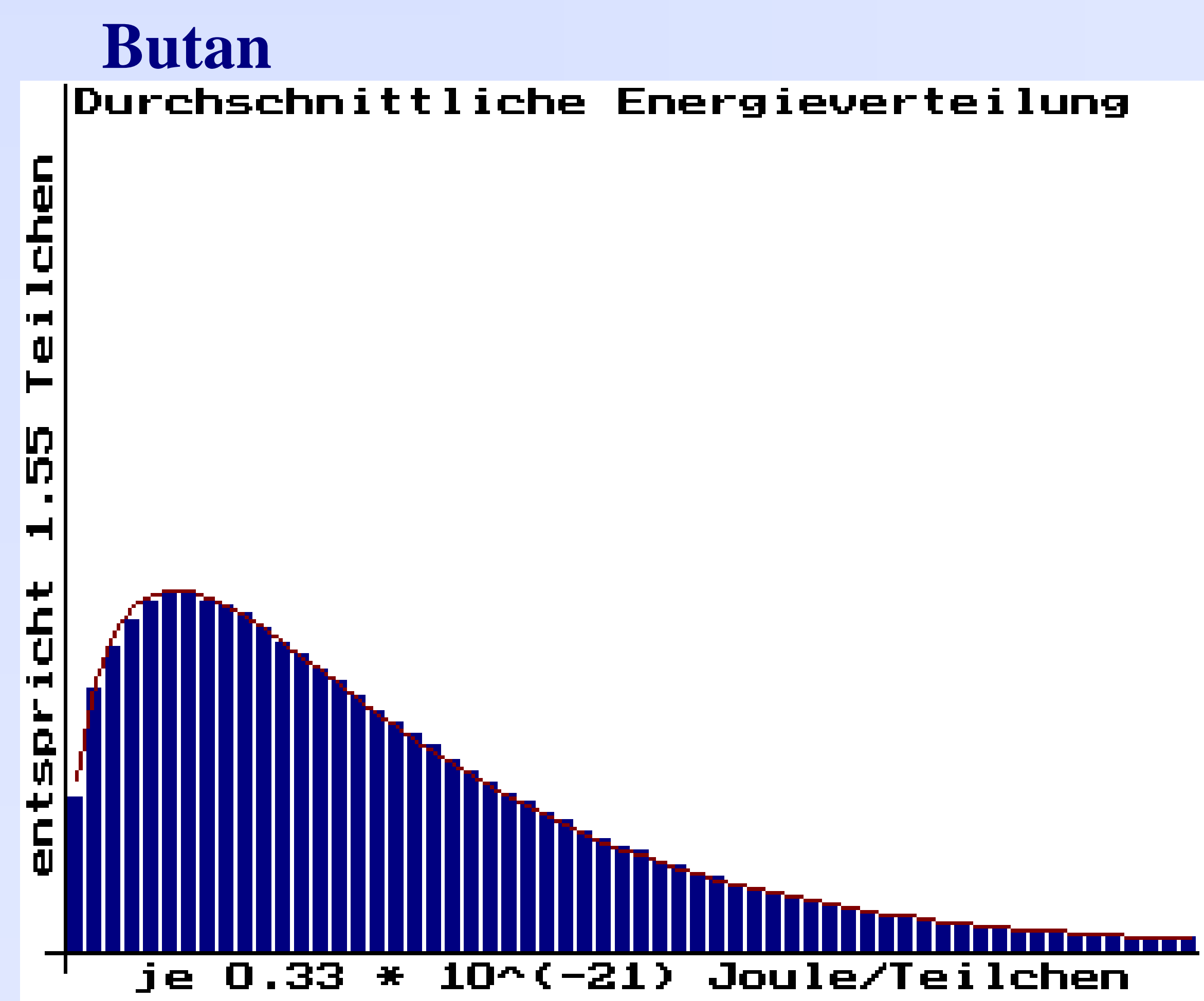


Wie man erkennen kann, bildet sich die asymmetrische Verteilung erst gegen Ende. Zu Anfang kann sich nur eine symmetrische Verteilung bilden, da die kollidierenden Teilchen die gleiche Energie haben und nach der Kollision gleichweit vom Energiemittel entfernt sind. Erst wenn Teilchen kollidieren, die schon einmal kollidiert sind, kann sich eine asymmetrische Verteilung bilden.

Erweiterungen an unserem Programm:

Bisher haben wir mit unserem Programm nur gezeigt, daß sich die genannte Verteilung bei reinen Gasen einstellt. Nun haben wir in unser Programm die Möglichkeit eingeführt, Gasgemische zu simulieren:

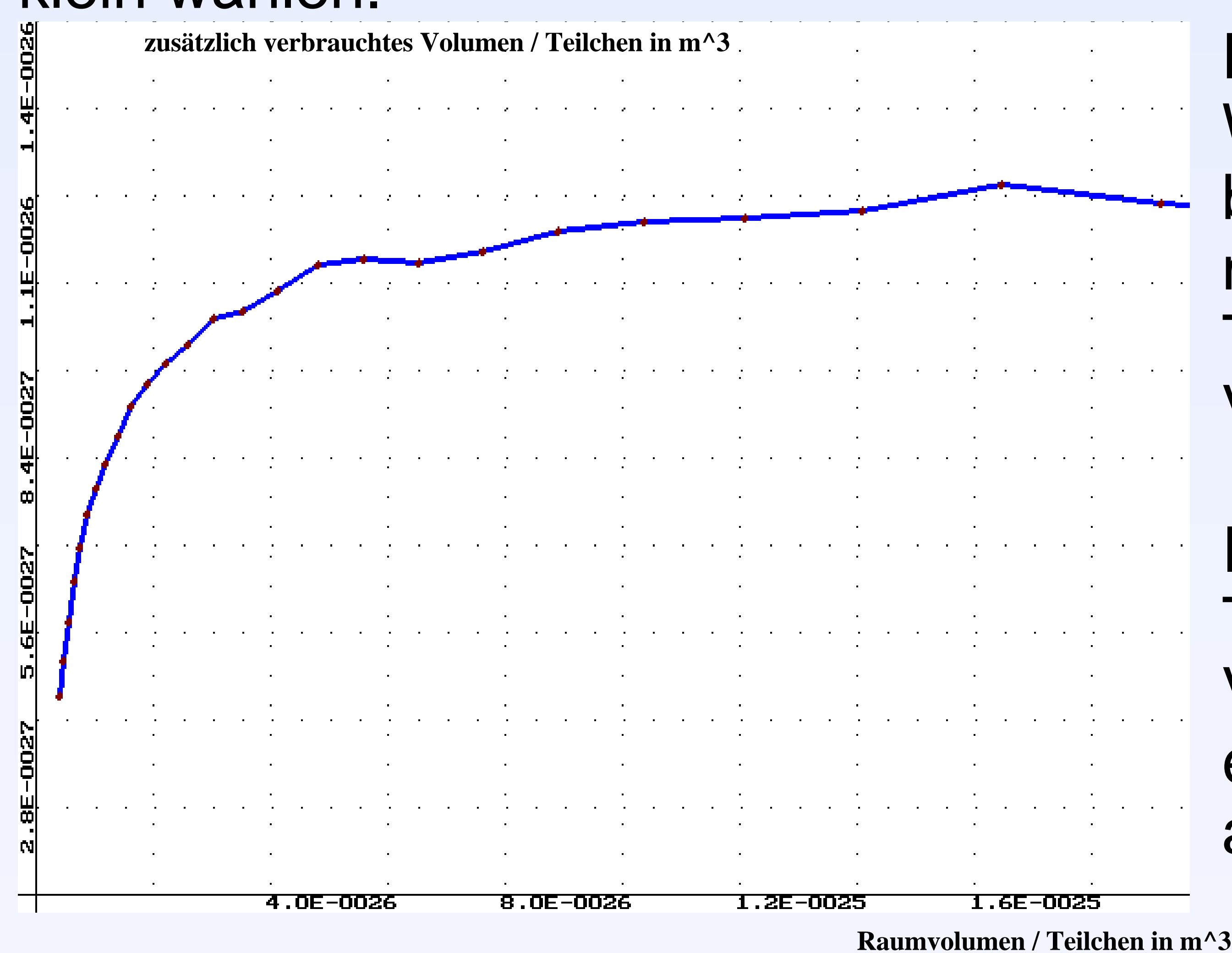
Als Beispiel: 15 Teile Butan mit 10 Teilen Ethanol gemischt unter Standardbedingungen nach 1.6 mio. Stößen



Die Maxima befinden sich, wie zu erwarten war, bei den selben Energiewerten.

Da wir jedem Teilchen eine Masse und einen Radius zuordnen können, ist es auch möglich, in eine Menge von kleinen Teilchen, ein großes Teilchen einzusetzen. Dies könnte eventuell ein Staubteilchen darstellen (andere Wechselwirkungen als Stöße wurden hier aber wieder nicht berücksichtigt). Auch hier ergab sich, daß ein Staubteilchen im Mittel die gleiche Energieverteilung und somit auch die gleiche mittlere Energie wie die es umgebenden Teilchen hat.

Des weiteren haben wir eine Ausgabe des wirklichen Drucks eingebaut, indem wir den auf die Wände übertragenen Impuls durch die Fläche der Wände und die simulierte Zeit teilten. Hierbei ergab sich dann, daß der mit der idealen Gasgleichung bestimmte Druck nicht mit dem Druck übereinstimmt, den die Wände in unserer Simulation erfahren. Dies liegt an dem nichtverschwindenden Volumen der Gasteilchen bei unserer Simulation. Die Übereinstimmung mit der idealen Gasgleichung ist nur dann vorhanden, wenn wir den Teilchendurchmesser sehr klein wählen.



Dieses zusätzliche Volumen wird in der van-der-Waals-Zustandsgleichung durch die Konstante b berücksichtigt. Mit unserem Programm ist es nun möglich, diese Konstante in Abhängigkeit von dem Teilchenvolumen und von dem den Teilchen zur Verfügung stehenden Volumen zu bestimmen.

Im linken Diagramm ist für ein Gas mit einem Teilchenvolumen von $3.05 \cdot 10^{-27} \text{ m}^3$ das zusätzliche Volumen pro Teilchen in Abhängigkeit von dem einem Teilchen zur Verfügung stehenden Raum aufgetragen.