

# Ideales Gasverhalten in einer einfachen Simulation

Moritz Smolka - Matr. Nr. 1246554

**Abstract**—Es wurde eine 2D Computersimulation idealer Teilchen entwickelt. Es wird gezeigt, dass die Simulation dem Ersten Hauptsatz der Thermodynamik und der idealen Gasgleichung gehorcht. Danach wird mit dem Modell der Einfluss von Änderungen in Druck und Temperatur auf die Verteilung der Nearest-Neighbour Distances untersucht. Zuletzt wurde die Simulation durch die Hinzugabe von Teilchen-Teilchen Interaktionen (perfekt elastischen Kollisionen) erweitert.

## I. SIMULATION

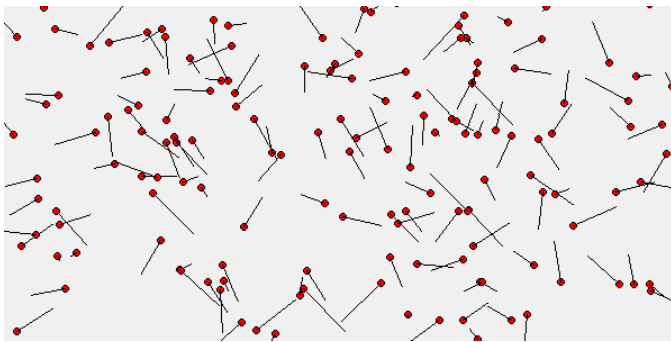


Fig. 1. Visualisierung eines Zeitpunkts in der Simulation. Punkte: Teilchen, Linien: Geschwindigkeitsvektoren

Die Simulation beinhaltet eine Menge an Teilchen. Der Zustand von jedem Teilchen ist durch einen veränderlichen Positionsvektor und einen Geschwindigkeitsvektor festgelegt. Die Bewegungsfreiheit der Teilchen ist auf einen rechteckigen Bereich (= das betrachtete System) beschränkt.

### A. Definitionen von "Volumen", Druck und Temperatur

Projiziert auf den zweidimensionalen Raum definieren wir Volumen ( $m^2$ ) neu als Fläche ( $m^2$ ), und Fläche ( $m^2$ ) neu als Länge ( $m$ ). Das Volumen ist also durch die Fläche des Simulationsbereichs definiert. Druck wird in der Simulation durch die Anzahl an Kollisionen der Teilchen mit den Wänden pro Länge (Umfang des Simulationsbereichs) pro Zeit gemessen. Die Temperatur messen wir als durchschnittliche kinetische Energie (Länge der Geschwindigkeitsvektoren zum Quadrat) der Teilchen. Der Simulationsbereich ist durch Länge und Höhe definiert.

### B. Simulationsprozess

Die Simulation findet in diskreten Zeitschritten statt. Für jeden Zeitschritt wird das Skalarprodukt des Geschwindigkeitsvektors jedes Teilchens zu dessen Position addiert. Kollisionen der Teilchen mit dem Beschränkungsbereich der Simulation sind perfekt elastisch, die Masse der Wände ist als unendlich anzusehen. Das System ist bei den folgenden Experimenten (bis auf kontrollierte Energiezufuhr) isoliert.

## II. 1. HAUPTSATZ

Wir überprüfen zunächst, ob die Simulation dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik gehorcht, bevor wir uns an weitere Analysen wagen. Da das simulierte System isoliert ist, muss die Gesamtenergie demnach konstant bleiben.

Für 1000 Teilchen mit randomisierten Geschwindigkeiten wurden 60s mit einem Zeitschritt von 1/1000s simuliert. Die Endtemperatur des Systems stimmte perfekt mit der Anfangstemperatur überein. (siehe `test_laws.py`)

## III. IDEALE GASGLEICHUNG

Wir überprüfen nun, ob die Simulation der idealen Gasgleichung  $pV = nRT$  prinzipiell gehorcht (Unterschiede in Form konstanter Faktoren wie  $R$  wurden nicht weiter beachtet). Da  $nRT = \text{const}$  (weil Vielfaches der internen Energie =  $\text{const}$ ), so müsste auch  $pV = \text{const}$  gelten. Wir testen das experimentell durch Variation des Volumens. (siehe `test_laws.py`)

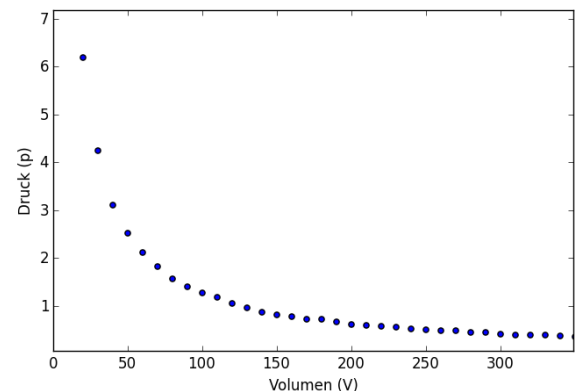


Fig. 2. Änderung des Drucks bei kontrollierter Variation des Volumens in der Simulation. Messungen erfolgten jeweils mit 1000 Teilchen simuliert über 1s mit 1000 Schritten. **Ergebnis entspricht den Erwartungen für ein i.G.**

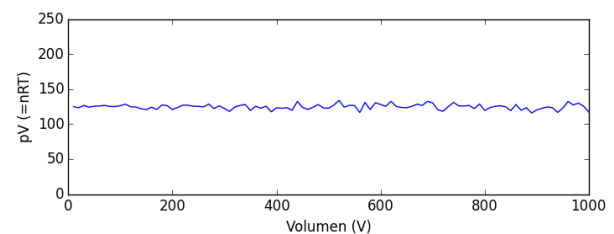


Fig. 3. Änderung des Produkts aus Druck und Volumen bei kontrollierter Variation des Volumens. Erwartung: 0. Abweichung liegt an der zu geringen Teilchen/Iterationsanzahl.

**Anmerkung:** Interessant ist es, dass die Temperatur bei der "Kompression" nicht steigt. Es stellt sich heraus, dass die

Temperatursteigerung bei der Kompression idealer Gase, auf die Geschwindigkeit der Wände (Kolben) zurückzuführen ist, welche hier als unendlich klein angenommen wird.

#### IV. NEAREST-NEIGHBOUR VERTEILUNG

Wir wollen nun die Verteilung der Nearest-Neighbours in der Simulation untersuchen, und wie diese sich mit Druck und Temperatur ändert. Dafür wurden für jede Konfiguration 10.000 randomisierte Teilchen über 1s mit Zeitschritten von 1/1000s simuliert, und danach immer die Distanzen von jedem Teilchen zu seinem nächstgelegenen Nachbarn einzeln gemessen. Die Parameter wurden je nach Experiment variiert, die Simulation dann wiederholt.

##### A. Variation der Temperatur bei konstantem Volumen

Übertragen auf die Simulation entspricht das der Änderung der Länge der Geschwindigkeitsvektoren der Teilchen.

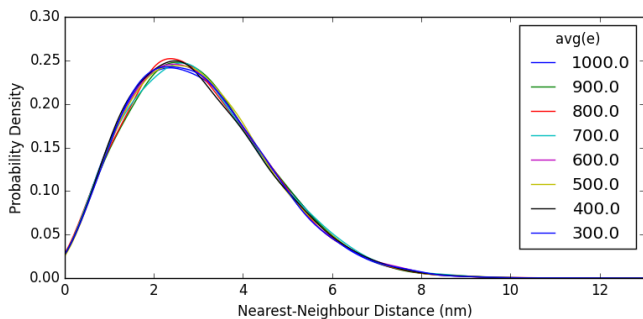


Fig. 4. NN-Verteilungen bei Änderung der internen Energie (Zu/Abfuhr von Wärme) bei  $V = \text{const.}$   $\text{avg}(e)$ : Durchschnittliche kinetische Energie der Teilchen ( $= T$ ).

**Analyse:** Die isochore Aufheizung hat keinen Effekt auf die räumliche Verteilung der Teilchen, obwohl der Druck steigt.

##### B. Variation der Temperatur bei konstantem Druck

Wir führen den Teilchen kinetische Energie zu und lassen das Volumen frei wachsen ( $w = 0$ ) bis der Druck wieder dem Ausgangsdruck entspricht.

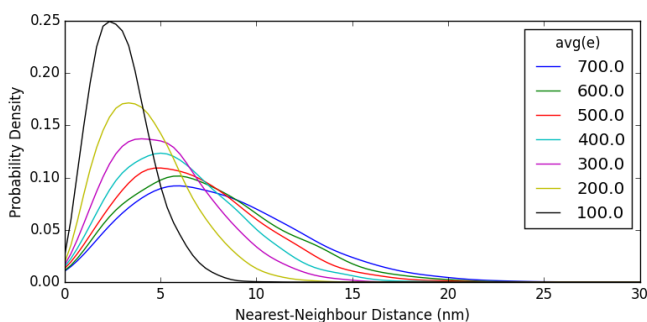


Fig. 5. NN-Verteilungen bei Änderung der internen Energie (Zu/Abfuhr von Wärme) bei  $p = \text{const.}$   $\text{avg}(e)$ : Durchschnittliche kinetische Energie der Teilchen ( $= T$ ).

**Analyse:** Wir beobachten, dass die durchschnittliche Distanz zwischen den Teilchen mit der Temperatur wächst (Aufgrund der Ausdehnung bis zum Ausgleich des Drucks).

##### C. Variation des Drucks bei konstanter Temperatur

Wir erhöhen den Druck (Effektiv durch Verringerung des Volumens. Möglich, da  $pV = \text{const.}$ , experimentell bewiesen in III).

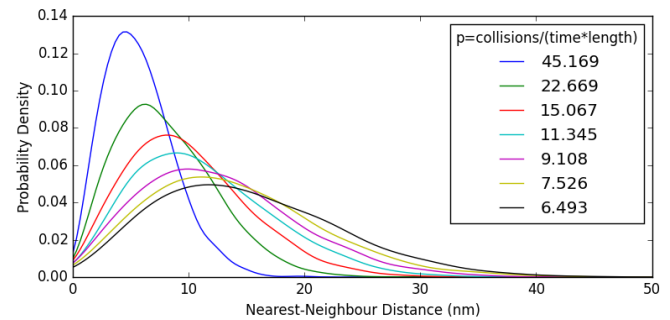


Fig. 6. NN-Verteilungen bei unterschiedlichem Druck (herbeigeführt durch Änderung des Volumens).

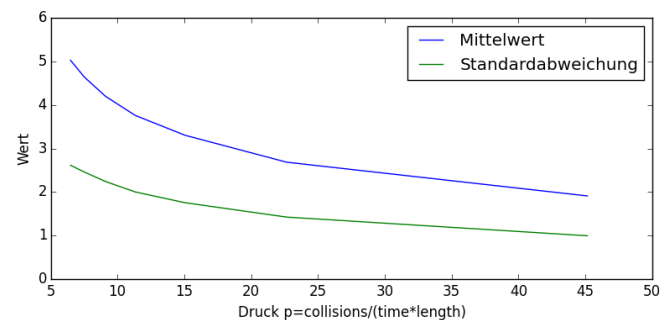


Fig. 7. Mittelwert und Standardabweichungen für die obigen Daten

**Analyse:** Die durchschnittliche Distanz zwischen den Teilchen verhält sich hier invers proportional zum Druck. Interessant zu beobachten ist auch, wie die Streuung der Verteilung mit Erhöhung des Drucks mehr und mehr sinkt.

#### V. ERWEITERUNG: TEILCHEN-TEILCHEN INTERAKTIONEN

Zuletzt wurden elastische Kollisionen zwischen Teilchen hinzugefügt (Gleicher Radius, gleiche Masse für alle Teilchen). Interessant zu beobachten war, dass sich trotz gleicher Ausgangsgeschwindigkeiten eine sehr unterschiedliche Verteilung der Teilchengeschwindigkeiten ergab. (siehe Fig. 2). Durch Hinzufügen anziehender/abstoßender Kräfte könnte das Modell in Richtung eines van-der-Waals Gases erweitert werden.

#### VI. ZUSAMMENFASSUNG

Die Experimente ergaben, dass sich die mittlere Nearest-Neighbour Distanz direkt proportional zur Temperatur (bei  $p = \text{const.}$ ), invers proportional zum Druck (bei  $T = \text{const.}$ ) verhält. Eine Änderung von  $T$  bei  $V = \text{const}$  hatte keinen Einfluss auf die Verteilung der Teilchen.