

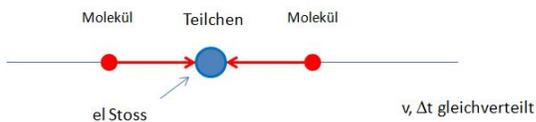
Simulation der Brown'schen Bewegung

Alfred Roulier

Unter Brown'schen Bewegung versteht man die 1827 von Robert Brown im Mikroskop beobachtete zufällige Spur eines in Wasser schwimmenden kleinen Teilchens. Diese Spur kommt dadurch zustande, dass die Wassermoleküle das Teilchen in Zeit und Richtung unregelmässig anstossen. Wegen der enormen Zahl der Wassermoleküle ist eine 1:1 Simulation der Teilchenumgebung in Raum und Zeit ausgeschlossen.

Der physikalisch relevante Prozess, nämlich die Reaktion des Teilchens auf die zufälligen Stösse der Moleküle, lässt sich indessen trotz folgender grosser Vereinfachungen mit vertretbarem Rechenaufwand simulieren :

- 1-dimensionaler Ansatz
- Verzicht auf die Beschreibung der Wechselwirkung der Moleküle untereinander
- Teilchen als Punktmasse
- Die Geschwindigkeiten der stossenden Moleküle und die Intervalle zwischen den Stössen sind zufällig gleichverteilt
- Die Stösse Molekül - Teilchen sind elastisch

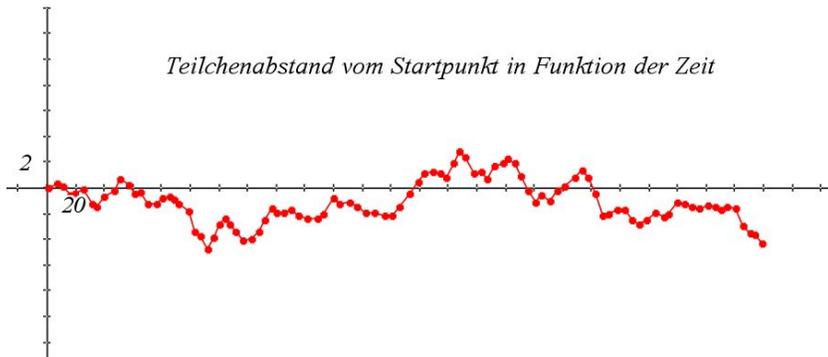
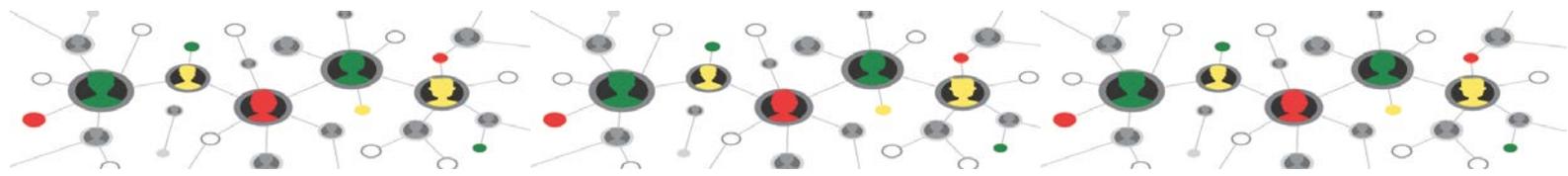


Wir lassen also Moleküle der Masse 1 mit im Intervall $\{-vmol, vmol\}$ zufälliger Geschwindigkeit vm von links und rechts auf ein Punktteilchen der Masse $mteil$ prallen. Das Teilchen erhält nach dem i -ten Stoss gemäss elastischem Stossgesetz die Geschwindigkeit

$$vt_i = \frac{mteil - 1}{mteil + 1} \cdot vt_{i-1} + \frac{2}{mteil + 1} \cdot vm$$

Auch die Zeit dt zwischen zwei Stössen ist zufällig gleichverteilt, und der Standort kt des Teilchens nach dem i -ten Stoss beträgt dann $kt_i = kt_{i-1} + dt \cdot vt_{i-1}$.

Das Programm **brown**($mteil, vm, nstoss, nsim$) in der Datei `idealgas.tns` simuliert diese Stösse in einer Schleife $nstoss$ Mal. Nach jedem Stoss werden Geschwindigkeit und Standort des Teilchens sowie die Geschwindigkeiten der Moleküle in Listen gespeichert. Dieser Vorgang wird $nsim$ Mal wiederholt, um $nsim$ Abstandsquadrate des Teilchens vom Ursprung nach $nstoss$ Stössen in einer Liste festzuhalten.



Das Programm brown(...) liefert die Listen des Teilchenstandorts kt und der kumulierten Zeit $tkum$ vor jedem Stoss. Der Streuplot der Teilchenposition ist aber bei 1000 Stössen besser lesbar, wenn nur jeder 10. Stoss abgebildet wird.

Das Teilchen macht die erwartete Zitterbewegung um den Nullpunkt, und es stellt sich die Frage, wie weit es sich im Mittel nach $nstoss$ Schritten davon entfernt hat.

Trotz der grossen Vereinfachungen können wir mit diesem Modell drei wesentliche physikalische Aussagen überprüfen :

Aussage 1 :

Nach hinreichend viel Stössen ist das Mittel der Teilchenenergie gleich der mittleren Molekülenergie.

Der theoretische Wert der mittleren quadratischen Molekülgeschwindigkeit, gleichverteilt im Intervall $\{-1,1\}$ ist $1/6$. Denn das Integral über die Rechteckfunktion der Gleichverteilung von quadrierten Molekülgeschwindigkeiten mit Norm 1 beträgt

$$0.5 * \int_{-1}^1 v^2 \cdot dv = 1/3$$

und die Energie bei Molekülmasse 1 ist die Hälfte davon, also 0,166...

In der Simulation erhalten wir folgende Werte

```
mteil:=10: ▶ 10: vmol:=1 ▶ 1 :nstoss:=1000 ▶ 1000 :nsim:=1 ▶ 1
```

```
idealgasbrown(mteil,vmol,nstoss,nsim) ▶ Fertig
```

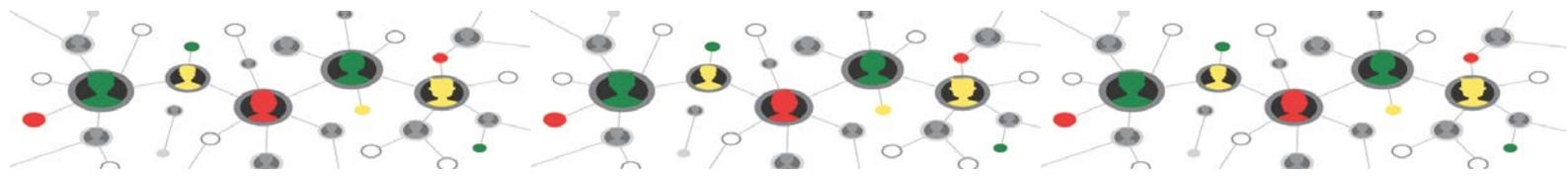
$$\text{mean}\left(\frac{vm^2}{2}\right) \blacktriangleright 0.16236$$

$$\text{mean}\left(\frac{mteil \cdot vt^2}{2}\right) \blacktriangleright 0.159466$$

vm ist die Liste der 1000 Molekülgeschwindigkeiten, vt jene der Teilchengeschwindigkeiten.

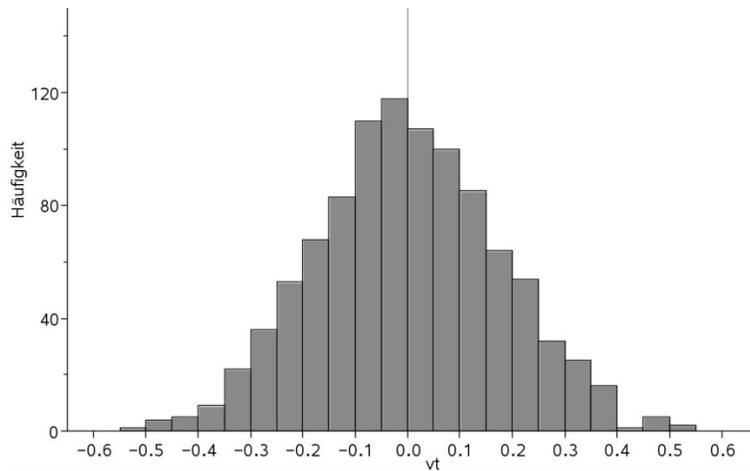
Aussage 1 ist gut bestätigt.

Hätten wir eine Gruppe von Teilchen betrachtet, hätten wir dasselbe Resultat erhalten und wir würden sagen, dass die Temperatur der Teilchen gleich jener der Moleküle ist. Das ist indessen die Aussage des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik. Im thermischen Gleichgewicht gibt es weder eine lokale Temperaturspitze noch eine -senke.



Aussage 2 :

Die Teilchengeschwindigkeiten sind normalverteilt



Von der Liste v_t erstellen wir mit Data + Statistics die Häufigkeitsverteilung der Teilchengeschwindigkeiten.

Die Normalverteilung ist deutlich ausgeprägt.

Dieser Befund ist eine eindruckliche Illustration des zentralen Grenzwertsatzes : "Eine Summe von sehr vielen unabhängigen Zufallsvariablen ist unter der Voraussetzung, dass jede der unabhängigen Zufallsvariablen nur einen geringen Einfluss auf die Summe hat, angenähert normalverteilt", (A.M. Ljapunoff, 1857 - 1918). Der angesprochene "Einfluss" wird in unserem Modell durch das Massenverhältnis Teilchen zu Molekül, 10:1, bestimmt. In der Tat zeigt das Histogramm eine noch bessere Normalverteilung, wenn wir $mteil$ und $nstoss$ grösser wählen.

Aussage 3 :

Das Mittel der quadrierten Abstände des Teilchens vom Startpunkt nach hinreichend viel Stössen ist proportional zur Zeit und zur Temperatur.

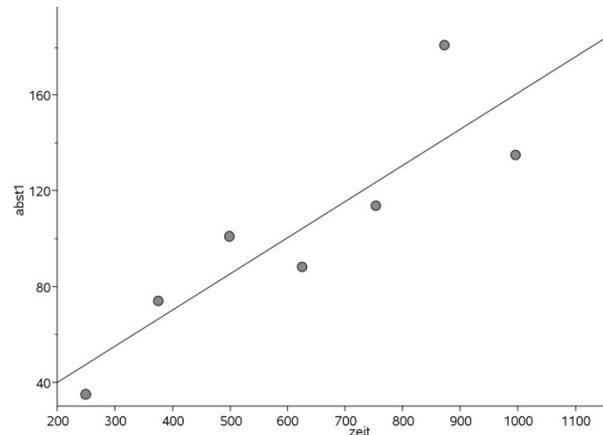
Das ist die "Einstein-Smoluchowski-Beziehung" von 1905/6.

Der mittlere quadratische Abstand des Teilchens vom Ausgangspunkt nach $nstoss$ Stössen ist in unserem Programm die Zahl $kt(nstoss)^2$. Um den funktionalen Zusammenhang mit der Zeit aufzudecken, simulieren wir $nsim$ Mal und werten die vom Programm $brown(...)$ erzeugten Listen mqd der Abstandsquadrate sowie der Zeiten tqd am Ende von $nstoss$ Stössen aus.

Diese Mittel berechnen wir nun für eine wachsende Stosszahl beginnend mit 500 in Schritten von 250 bis 2000, notieren die entsprechenden Werte in einem Spreadsheet und bilden mit Data+Statistics die Regression. ($vmol = 1$, $nsim = 20$).



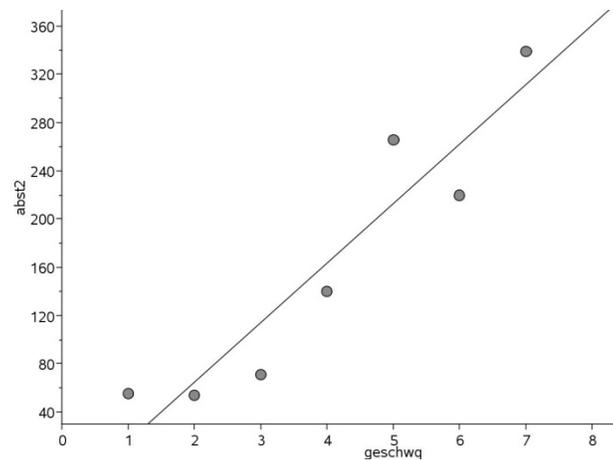
A zeit	B abst1	C
250	35	
376	74	
499	101	
625	88	
753	114	
873	181	
996	135	



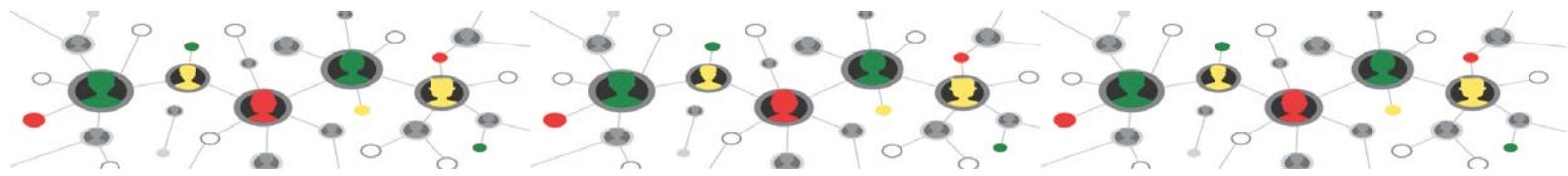
Die Proportionalität zwischen $\langle mqd \rangle$, in der Figur *abst1* bezeichnet, und $\langle tqd \rangle$ (*zeit*) ist augenfällig. Allerdings wachsen die Abweichungen mit grösseren Stosszahlen. Das liegt an der mit 20 zu tiefen Wiederholungszahl. Unter Inkaufnahme längerer Rechenzeiten kann die Schärfe der Regression verbessert werden.

Einstein und Smoluchowski wiesen auch die Proportionalität zwischen $\langle mqd \rangle$ und Molekültemperatur, also vm^2 , nach. Auch diese Aussage können wir prüfen, indem im Spreadsheet eine entsprechende Messreihe festgehalten wird. (*nstoss* = 500, *nsim* = 20)

D geschwq	E geschw	F abst2
1	1	55
2	$\sqrt{2}$	54
3	$\sqrt{3}$	71
4	2	140
5	$\sqrt{5}$	266
6	$\sqrt{6}$	220
7	$\sqrt{7}$	339



Die Proportionalität zwischen dem mittleren quadratischen Abstand $\langle mqd \rangle$, in der Figur *abst2* bezeichnet, und dem Quadrat der Molekülgeschwindigkeit (*geschwq*), d.h. der Temperatur ist gut erkennbar.



Einstein und Smoluchowski gaben im Jahr 1905/6 mit der Beziehung $\langle m q d \rangle \sim T * t$ der statistischen Mechanik, also der molekularen Modellierung von Gasen und Flüssigkeiten, einen enormen Schub. Sie schlugen auch vor, wie man damit die Naturkonstante k (Boltzmannkonstante) messen könnte. Das ist natürlich mit unserem einfachen Modell mit freien Masstäben weder möglich noch sinnvoll. Dennoch ist es erstaunlich, welche grundlegende Aussagen aus dem Bereich der statistischen Mechanik damit nachvollzogen werden können.

Autor : Alfred Roulier, a.roulier@bluewin.ch
Beilagen : TI-nspire Files idealgas.tns , SimBrown.tns



Anhang

Programm brown(...), abgespeichert in idealgas.tns in MyLib

```

brown
Define LibPriv brown(mteil,vmol,nstoss,nsim)=
Prgm
Local i,a,b
a:= $\frac{mteil-1}{mteil+1}$ : b:= $\frac{2}{mteil+1}$ : mqd:=newList{nsim}:tqd:=newList{nsim}
© Schlaufe über nsim Simulationen
For j,1,nsim
vt:=newList{nstoss}: kt:=newList{nstoss} © Listen der Teilchengeschwindigkeiten und -koordinaten
© Erzeugen der Molekülgeschwindigkeiten und Zeitintervalle
vm:=seq{vmol*2*(rand()-0.5),i,1,nstoss}
dt:=seq{rand(),i,1,nstoss}
tkum:=seq{sum{dt,1,i},i,1,nstoss}
© Schlaufe über nstoss Stösse
For i,2,nstoss
© Nachführen der Teilchenkoordinaten, Ausführen der Stösse
kt[i]:=kt[i-1]+dt[i-1]*vt[i-1]
vt[i]:=a*vt[i-1]+b*vm[i-1]
EndFor
© Abstandsquadrat und Zeit bei Simulationssende
mqd[j]:=kt[nstoss]2:tqd[j]:=tkum[nstoss]
EndFor
EndPrgm

```