

Compte Rendu Simulation Numérique

Augustin Deboës et Elie Vandoolaeghe 139e

13 novembre 2021

Ce compte rendu est accompagné des codes `ParticleClass.py` ; `event_code_classMonomer.py` et `event_code_classDimer.py`.



1 Erreur de Précision

Expliquez pourquoi la fonction `Dimer_pair_time` devrait contenir la ligne :

```
c = np.minimum(0, del_x**2 + del_y**2 - self.bond_length**2)
```

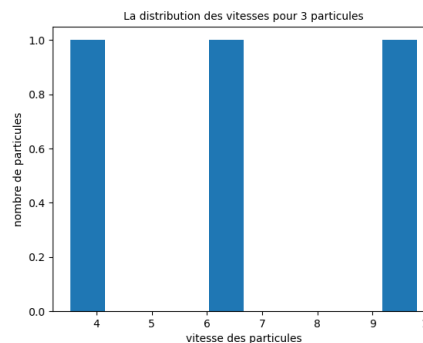
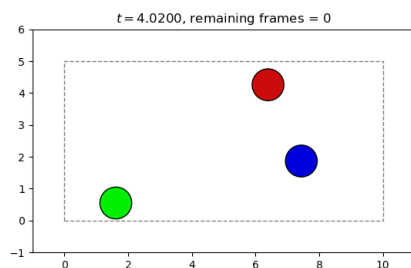
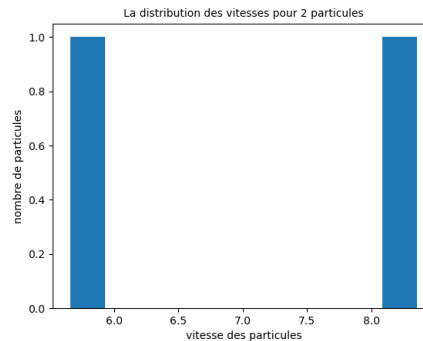
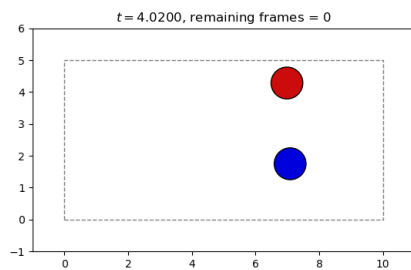
Décrivez en détail l'erreur de précision que cette ligne permet d'éviter.

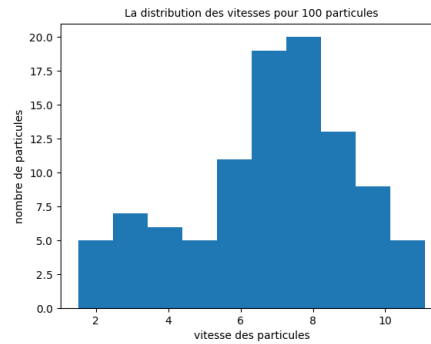
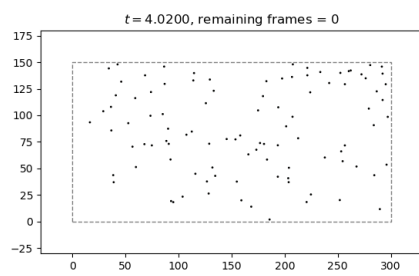
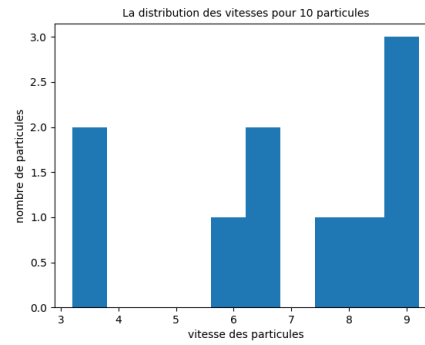
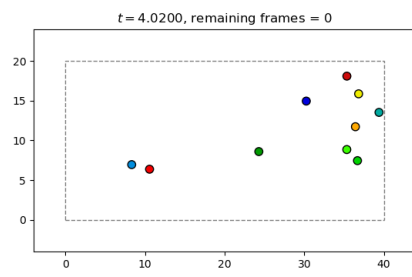
L'utilisation de la fonction `np.minimum` a deux effets : premièrement elle permet de s'assurer que le paramètre `c` sera toujours compté comme négatif, et deuxièmement elle permet de ne pas commettre d'erreur de précision. Tout d'abord, on tient à s'assurer que la liste des temps calculés ne contiendra aucun cas où `c` est positif. En effet un `c` positif signifie que la liaison entre les deux monomères qui constituent le dimère a été rompue, car la distance entre les centres est devenue supérieure à la longueur de liaison. Prendre le minimum de `c` et 0 est donc un bon moyen de ne conserver que les `c` négatifs. De plus il existe une erreur de l'ordre de 10^{-15} en python sur tous les calculs. Ainsi, si `c` est calculé positif avec un écart inférieur à 10^{-15} de 0, au calcul suivant la fonction `minimum` permettra de rectifier en choisissant les bons évènements. Cependant elle ne permet pas de rectifier directement l'erreur de précision puisqu'elle repose aussi sur une comparaison avec la même marge d'erreur.

2 Statistique de Boltzmann

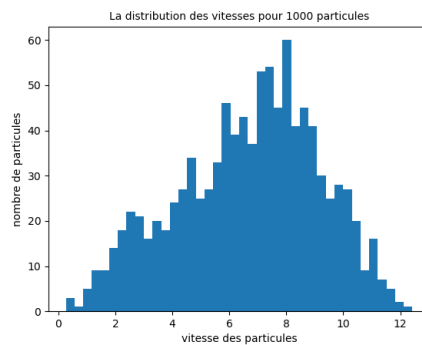
Dans le système de monomères, mesurez la distribution de Maxwell-Boltzmann pour 2, 3, 10 et 100 monomères et décrivez votre observation.

On trace l'histogramme de la distribution des vitesses pour les différents cas :





Pour plus se rendre compte de la forme obtenue, nous avons aussi réalisé l'histogramme pour 1000 monomères :



On remarque donc que la distribution de Maxwell-Boltzmann des vitesses tend vers une gaussienne centrée. Cela peut s'expliquer par le fait qu'une infime portion des monomères présente des vitesses faibles car ces particules concèdent un grand nombre de chocs avec les autres et les parois, et une majorité des monomères reste dans la partie "libre" de la boîte, ce qui est logique vu l'aire qu'elle représente.