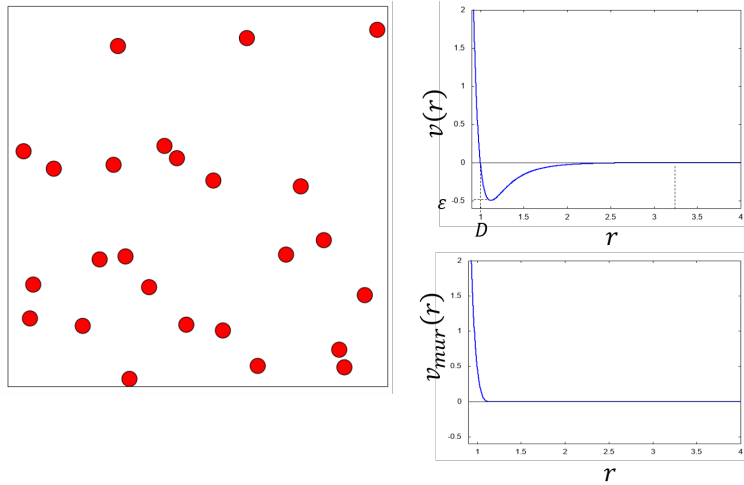


Thermostatistique 2: Modélisation d'un gaz de particules en interaction

On étudiera un modèle de gaz de N particules classiques en interaction, confinées dans une enceinte rectangulaire à deux dimensions. L'intérêt de la simulation est de pouvoir retrouver et tester les lois de la physique statistique et de la thermodynamique qui décrivent un gaz, à partir de la modélisation de la dynamique microscopique.



Les particules de masse m interagissent entre elles, par paire *via* un potentiel de *Lennard-Jones* (Fig. 1 à droite, en haut),

$$v(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{D}{r} \right)^{12} - \left(\frac{D}{r} \right)^6 \right]$$

où r est la distance entre les deux particules. Le premier terme représente la répulsion à très courte portée due à la non-interpénétrabilité des particules et le second terme à l'attraction de van der Waals d'origine électrostatique. ϵ correspond à l'énergie au fond du puit de potentiel, et D à la distance typique en dessous de laquelle les deux particules ne peuvent s'approcher. En pratique, on utilisera un potentiel "coupé" : $v_c(r) = v(r)$ si $r < 3,2D$ et $v_c(r) = 0$ sinon.

Les particules sont confiné dans l'enceinte par un potentiel répulsif à très courte portée; on utilisera par exemple le potentiel suivant pour l'interaction entre une particule et un mur (voir Fig. 1 à droite en bas),

$$v_{\text{mur}}(r) = \begin{cases} v(r) & \text{si } r < 2^{1/6}D \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où r est ici la distance (la plus courte) particule-mur de l'enceinte.

L'évolution dans le temps des positions et vitesses des particules est régit par le principe fondamentale de la dynamique, les forces qui s'exercent sur chaque particule dérivant des énergies potentielles décrites précédemment.

1 Algorithmes d'évolution

Une fois donnée une configuration initiale, c'est à dire une valeur initiale aux vitesses et positions des N particules, les positions et vitesses des particules sont calculées tous les intervalles de temps fixe δt . Pour obtenir, les vitesses et positions à l'instant $t + \delta t$ à partir des vitesses et positions à l'instant t , on utilisera l'algorithme de Verlet.

On note \vec{r}_i le vecteur position de la particule $n^o i$, \vec{v}_i sa vitesse, m_i sa masse et \vec{F}_i la force totale qui s'exerce sur cette particule. Pour chacune des particules:

1. $\vec{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} \frac{\delta t}{2}$ où $\vec{F}_i(t)$ est calculé à partir des positions à l'instant t .
2. $\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) \times \delta t$
3. $\vec{v}_i(t + \delta t) = \vec{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) + \frac{\vec{F}_i(t + \delta t)}{m_i} \frac{\delta t}{2}$ où $\vec{F}_i(t + \delta t)$ est calculé à partir des positions à l'instant $t + \delta t$ (obtenues étape 2).

2 Préalables théoriques

Quelques questions de physique auxquelles il faudra répondre pour écrire le programme. Quelle est la force exercée par une particule j sur une particule i ? Quelle est la force que subit une particule i due à ses interactions de paires avec les $N - 1$ autres? Quelle est la force que subit une particule due à son interaction avec les murs? Quelles sont les équations satisfaites par les $\vec{r}_i(t)$ et $\vec{v}_i(t)$?

3 Études possibles d'intérêt

- **Pression du gaz.** On pourra calculer la pression exercée par le gaz sur les parois de la boîte, étudier l'influence des différents paramètres: N , m , la vitesse initiale des particules, la température T , les dimensions de la boîte, R . On calculera cette pression avec ou sans collision entre particules. On comparera les résultats avec l'équation d'état des gaz parfaits.
- **Distribution des vitesses.** On pourra tracer l'histogramme des vitesses (composantes et norme) pour vérifier qu'après un certain temps la distribution se rapproche de la distribution de Maxwell. On pourra étudier l'influence des divers paramètres et de la condition initiale.
- **Effet d'un potentiel extérieur.** On ajoute une force dérivant d'un potentiel extérieur, par exemple la pesanteur. Après un certain temps d'évolution du gaz, on peut alors tracer les histogrammes des différentes coordonnées de position et vérifier si ils se rapprochent de la distribution prédite par la physique statistique (facteur de Boltzmann).
- **Équipartition de l'énergie.** En partant d'un gaz formé de deux populations de particules (avec vitesses et/ou masse et éventuellement rayon différents), on suivra l'évolution de l'énergie par particule pour chaque type de particule. Là encore, on testera l'influence des divers paramètres et de la condition initiale.
- **Étude des fluctuations.** On étudiera l'influence de la taille du système sur les fluctuations de grandeurs comme la pression instantanée ou la densité de particules dans un sous-volume de la boîte. Pour cela on fera varier N et la taille de la boîte en gardant la densité de particules constante.