

# 1 Simulation d'un gaz dans un champ gravitationnel

On considère des particules classiques dans un potentiel (gravitationnel)  $V(x) = mgx$  pour un cas simplifié à une dimension ;  $m$  est la masse de la particule (on prendra  $m = 1$  dans la simulation numérique) et  $g$  est l'accélération de la pesanteur. L'état microscopique d'une particule individuelle est caractérisé par sa vitesse  $v$  et sa position  $x \geq 0$ . En  $x = 0$ , le sol réfléchit parfaitement les particules. On suppose que l'interaction entre les particules est faible mais néanmoins suffisamment forte pour permettre des échanges d'énergie tels que la description statistique par l'ensemble canonique soit valable. À température  $T$  la distribution statistique de la vitesse  $v$  et de la position  $x$  est donnée par la distribution de Boltzmann

$$P(v, x) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta E(v, x)] \quad , \quad E(v, x) = \frac{1}{2} m v^2 + mgx \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (1)$$

avec la fonction de partition

$$Z(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_0^{\infty} dx \exp[-\beta E(v, x)]. \quad (2)$$

Ici  $E(v, x)$  est l'énergie classique de la particule (somme de l'énergie cinétique  $\frac{1}{2}mv^2$  et l'énergie potentielle  $mgx$ ).

**Exercice 1** (*analytique*) Calculer les deux intégrales :

$$Z_1 \equiv \int_0^{\infty} dx e^{-\beta mgx} \quad , \quad Z_2 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-\beta mv^2/2} .$$

En déduire que (pour  $m = 1$ ) la fonction de partition  $Z(\beta)$  et la moyenne de l'énergie  $\langle E \rangle$  sont données par

$$Z = \frac{\sqrt{2\pi}}{g} \beta^{-3/2} \quad , \quad \langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_0^{\infty} dx E(v, x) P(v, x) = \frac{3}{2\beta} = \frac{3T}{2} \quad (3)$$

(la dernière égalité si on choisit  $k_B = 1$ ). **Indication :** pour la moyenne  $\langle E \rangle$  il n'est pas nécessaire de recalculer des intégrales (un peu plus compliquées) mais on peut utiliser une formule/ruse efficace du cours et TD une fois la fonction  $Z(\beta)$  est connue. Pour  $Z_2$  on pourra

utiliser que  $\int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} = \sqrt{\pi}$ .

Desormais on appellera

$$p_{1,th}(x) = \frac{1}{Z_1} e^{-\beta mgx} \quad , \quad p_{2,th}(v) = \frac{1}{Z_2} e^{-\beta mv^2/2} \quad (4)$$

les distributions marginales de  $x$  et  $v$ . D'ailleurs on peut aussi les obtenir de  $P(v, x)$  par

$$p_{1,th}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dv P(v, x) \quad , \quad p_{2,th}(v) = \int_0^{\infty} dx P(v, x)$$

et on peut facilement vérifier qu'elles sont correctement normalisées (c'est évident par la définition des constantes  $Z_1$  et  $Z_2$ ).

## Exercice 2 (numérique)

Calculez numériquement les distributions  $p_{1,num}(x)$ ,  $p_{2,num}(v)$ . Pour cela considérez un gaz avec  $np=100-200$  particules (masse  $m = 1$ ), caractérisées par les équations du mouvement

$$\frac{d}{dt}x_j(t) = v_j(t) \quad , \quad \frac{d}{dt}v_j(t) = -g \quad , \quad j = 1, \dots, np. \quad (5)$$

Dans le programme `python`, on choisit d'abord des conditions initiales aléatoires :  $x_j(0) \in [0, x_{\max}]$ ,  $v_j(0) \in [-v_{\max}, v_{\max}]$  et ensuite on peut résoudre (5) selon

$$v_j(t + dt) = v_j(t) - g dt \quad , \quad (6)$$

$$x_j(t + dt) = x_j(t) + v_j(t) dt \quad . \quad (7)$$

Ici  $dt$  représente un petit pas d'intégration, par exemple  $dt = 0.1$ . Dans la ligne pour  $x_j(t + dt)$  on utilisera déjà la valeur de la vitesse modifiée  $v_j(t + dt)$ . **Attention** : dans le code `python` on a  $x_j(t) = x[j]$  et  $v_j(t) = v[j]$  peu importe la valeur de  $t$  ( $t$  ou  $t + dt$ ). (Dans le code `python` on choisira  $m = 1$ ,  $g = 1$  et aussi  $k_B = 1$ .)

Si  $x_j(t + dt) < 0$ , on applique

$$x_j(t + dt) \leftarrow -x_j(t + dt) \quad , \quad v_j(t + dt) \leftarrow -v_j(t + dt) \quad (8)$$

pour tenir compte de la réflexion au sol. Cette dynamique est encore très simple (on peut la résoudre facilement sans ordinateur) et l'énergie par particule est conservée (du moins avant la discrétisation). Pour modéliser les effets de l'interaction (qui n'est pas contenue dans le modèle!) on permet régulièrement (après un nombre donné d'itérations, noté `ntherm`) des échanges d'énergie aléatoires selon

$$v_j \leftarrow v_j + \Delta v_j \quad , \quad (9)$$

avec  $\Delta v_j \in [-dv, dv]$  aléatoire. Ensuite il faut appliquer un facteur de normalisation (remplacer  $v_j \leftarrow \alpha v_j$  avec la "bonne" valeur de  $\alpha$ ) pour conserver l'énergie cinétique de toutes les particules :  $E_{\text{cin.}} = \sum_j \frac{1}{2} v_j^2$ , c'est-à-dire déterminer  $\alpha$  tel que  $E_{\text{cin.}}$  ait la même valeur avant les échanges et après les échanges (plus l'application du facteur  $\alpha$ ).

Afficher les distributions numériques (histogrammes)  $p_{1,num}(x)$ ,  $p_{2,num}(v)$  et comparez avec les distributions théoriques  $p_{1,th}(x)$ ,  $p_{2,th}(v)$  (voir exercice 1 et équation (1)). Dans ce but, il faut connaître la température  $T = 1/\beta$ , qui est déterminée par l'énergie moyenne (par particule), selon l'équation (3).

Tracez aussi la température en fonction du temps. Pourquoi n'est-elle pas exactement constante ?

### Indications, conseils techniques pour le code python :

- Vous pouvez utiliser le fichier `gaz_aide.py` disponible dans l'interface test pour commencer. Ce fichier contient les entêtes usuelles (pour charger les bibliothèques), quelques propositions de paramètres et la fonction `faire_plot(...)` (voir le fichier pour des détails sur cette fonction) qui sert à afficher deux histogrammes et deux courbes théoriques sur une figure (pendant 0.1 secondes).
- Il faut commencer de créer/remplir deux listes/tableaux `x[j]`, `v[j]` avec la condition initiale et initialiser `t=0` pour le temps d'itération.
- Ensuite il faut faire trois boucles :
  1. Boucle extérieure (longueur `niter`, par exemple avec valeur de 20) pour le nombre de plots et échanges aléatoires de vitesse.

2. Boucle au milieu (longueur `ntherm`, par exemple avec valeur 40) pour chaque pas d'intégration  $t \rightarrow t + dt$  pour toutes les particules.
  3. La boucle intérieure est simplement pour effectuer les équations de simulation (6), (7) et (8) pour toutes les particules (donc longueur de la boucle `=np`). Quand la boucle intérieure est terminée on remplace `t=t+dt`.
  4. Après la boucle au milieu (mais dans la boucle extérieure) il faut : appliquer une fois les échanges aléatoires des vitesses (selon l'éq. (9) et la procédure avec le facteur  $\alpha$ ). Ensuite il faut calculer la température  $T$  (ou la valeur de  $\beta = 1/T$ ) des particules. Pour cela simplement calculer l'énergie moyenne de particules (somme des énergies divisée par le nombre de particules) et ensuite calculer  $\beta$  par l'éq. (3).  
Après créer des tableaux techniques `xarg`, `varg` pour des valeurs équidistantes de positions et vitesses et des tableaux `pxth`, `pvth` pour les valeurs théoriques des distributions de  $x$  et  $v$  pour préparer les plots des distributions théoriques. Ces fonctions nécessitent la valeur de  $\beta$  qu'on vient de calculer avant. Ensuite utiliser la fonction `faire_plot(...)` pour afficher une figure.
- Une fois la simulation terminée (après la boucle extérieure). Faire une autre figure pour la température  $T$  en fonction de  $t$ . Pour cela il faut ajouter/stoquer (après le calcul de  $\beta$ ; voir point 4 ci-dessus) les valeurs de temps  $t$  et de la température  $T = 1/\beta$  dans des tableaux `tt` et `TT` qu'on utilisera à la fin pour le dernier graphe.
  - On conseille de créer et d'utiliser de fonctions python pour les différentes tâches, par exemple deux fonctions de type `px(x,beta)`, `pv(v,beta)` pour les distributions théoriques, une fonction pour faire des échanges aléatoires des vitesses, une fonction pour faire un pas  $t \rightarrow t + dt$  (donc qui remplace la boucle intérieure), etc.

**Exercice 3** On simule maintenant un modèle de sol chaud en supposant que ce dernier bouge avec une vitesse `v_sol` aléatoire (et différente pour chaque  $t$ ) dans l'intervalle  $[-v\_sol\_max, v\_sol\_max]$  (`v_sol_max=1`). Comment faut-il modifier (8) pour tenir compte de cette vitesse du sol ?

Tracez la température en fonction du temps et essayez de trouver une explication physique microscopique à son évolution.

**Exercice 4** Ajoutez dans le programme de l'exercice 3 un terme de friction dans l'équation de mouvement pour  $v_j$  :

$$\frac{d}{dt}x_j(t) = v_j(t) \quad , \quad \frac{d}{dt}v_j(t) = -g - \gamma v_j(t) \quad . \quad (10)$$

Formulez les équations discrètes et modifiez le programme `python`. Tracez la température en fonction du temps pour plusieurs valeurs du coefficient de friction ( $\gamma = 0.1, 0.5, 1.0$ ).

**Exercice 5 Simulation "exacte" :** (*optionnel*) On revient à la situation de l'exercice 2 (pas de sol chaud ni friction). L'itération selon les équations (6), (7) et (8) n'est pas exacte et seulement approximative et il faut que  $dt$  soit petit.

On peut aussi faire une simulation exacte selon :

$$v_j(t + dt/2) = v_j(t) - g dt/2 \quad , \quad (11)$$

$$x_j(t + dt) = x_j(t) + v_j(t + dt/2) dt \quad , \quad (12)$$

$$v_j(t + dt) = v_j(t + dt/2) - g dt/2 \quad . \quad (13)$$

Donc on fait un demi pas pour la vitesse, le pas pour la position et ensuite l'autre demi pas pour la vitesse. Comme ça l'itération sera exacte (car  $\dot{v}(t) = -g = \text{const.}$  dans le temps ; d'ailleurs on parle aussi de la méthode de *Verlet*).

Ensuite pour la reflexion au sol chaud si  $x_j(t + dt) < 0$ , on applique

$$x_j(t + dt) \leftarrow \tilde{x}_j \quad , \quad v_j(t + dt) \leftarrow \tilde{v}_j \tag{14}$$

où  $\tilde{x}_j \equiv 0$  (position du sol) et  $\tilde{v}_j > 0$  est une vitesse (positive) choisie telle que l'énergie avant la reflexion de la particule (donc avec  $(x_j(t), v_j(t))$ ) est identique après la reflexion (donc avec  $(\tilde{x}_j, \tilde{v}_j)$ ). Trouver l'expression de  $\tilde{v}_j$  en fonction de  $x_j(t)$  et  $v_j(t)$  et l'utiliser dans le code.

Avec ces deux modifications on devrait observer que la température est (numériquement) constante dans le temps.