

CR PROGRAMMATION

Étude de la loi de distribution des vitesses de Maxwell-Boltzmann

1. Introduction

Notre projet a pour but de mettre en évidence la loi de distribution des vitesses de Maxwell-Boltzmann. Pour cela, on étudie un ensemble de billes confinées dans une enceinte rectangulaire en faisant varier la température des murs latéraux ainsi que la géométrie du problème (ajout d'une paroi mobile). On utilise le modèle des sphères dures, les chocs entre particules sont élastiques.

Une précaution a été prise par rapport au placement initial des particules : deux particules ne peuvent pas se superposer, on évite donc le problème d'énergie infinie du système à $t=0$.

On a pallié aux problèmes de précision numérique en introduisant des markers, ainsi une particule ayant tapé la paroi au temps t ne peut pas la retaper au temps $t+1$.

Fonctions introduites :

`compute_paro_collision_time()` : calcul le temps jusqu'à collision entre une particule donnée et la paroi mobile.

Fonctions modifiées :

`compute_min_time()` : calcul du temps pour le prochain événement, modifiée pour interdire les chocs répétitifs entre une particule et la paroi.

`new_speed()` : mise à jour des vitesses après collision, lors d'un choc avec la paroi, les vitesses selon x sont échangées et celles selon y sont conservées.

`wall_bounce()` : adapté pour inclure le confinement de la paroi.

`initparticles()` : place les particules aléatoirement de part et d'autre de la paroi sans que 2 particules se superposent initialement.

2. Étude d'une enceinte fermée simple

2.1. Absence d'un gradient de température

C'est le cas de figure le plus simple, les billes ne subissent aucune accélération ou décélération. On a un système isolé sans flux.

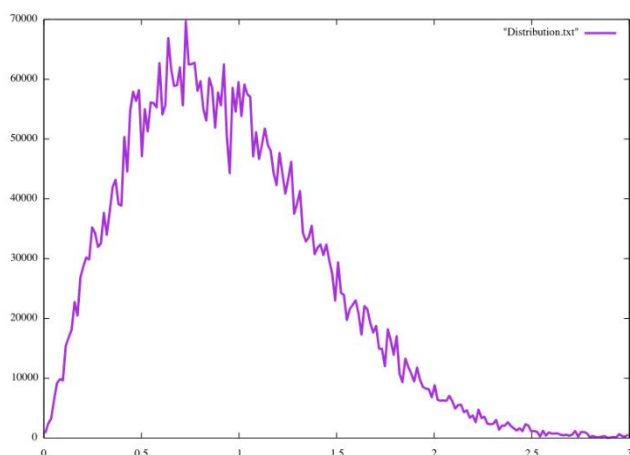


Figure 1 : nombre de chocs en fonction de la norme des vitesses sans gradient

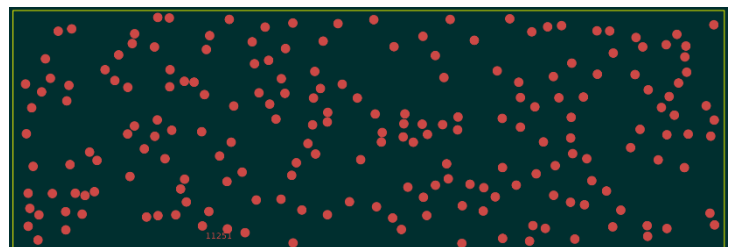


Figure 2 : capture d'écran de l'enceinte sans gradient

On observe bien une répartition de type Maxwell-Boltzmann.

2.2. Présence d'un gradient de température

On considère les murs de droite et de gauche comme étant des thermostats en équilibre thermique avec notre chambre de particules. Lorsque la particule touche un de ces murs, elle obtient une nouvelle vitesse selon une distribution de Maxwell-Boltzmann. Pour simplifier, on modélise cette distribution par une loi de probabilité uniforme où la particule peut obtenir une vitesse comprise entre 0 et *norme_max* (ou *norme_min*).

Avant chaque choc avec un mur, on normalise la vitesse de la particule puis on multiplie par une fraction (entre 0 et 1) de la norme minimale (mur de droite) ou maximale (mur de gauche). De cette façon, la nouvelle norme de la vitesse change mais l'angle par rapport à la normale du mur est conservé.

$$v_x' = -\frac{v_x}{|v|} * \alpha * norme_m \text{ avec } \alpha \in [0,1]$$

$$v_y' = \frac{v_y}{|v|} * \alpha * norme_m \text{ avec } \alpha \in [0,1]$$

On prendra pour T1, T2 et T3 on prendra systématiquement les *norme_max* 2, 8 et 25. La *norme_min* est fixée à 0,3.

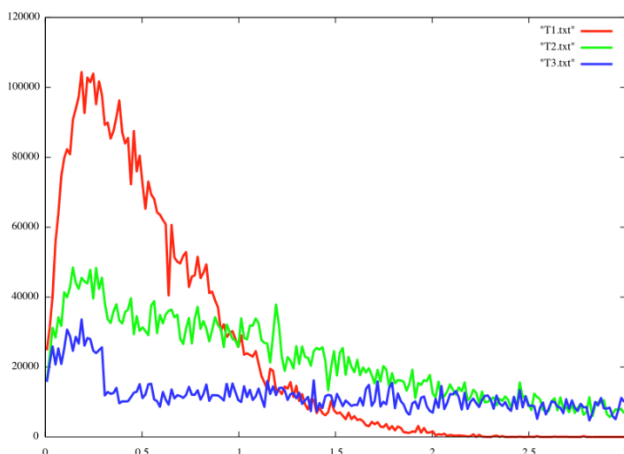


Figure 3 : nombre de chocs en fonction de la norme des vitesses avec gradient

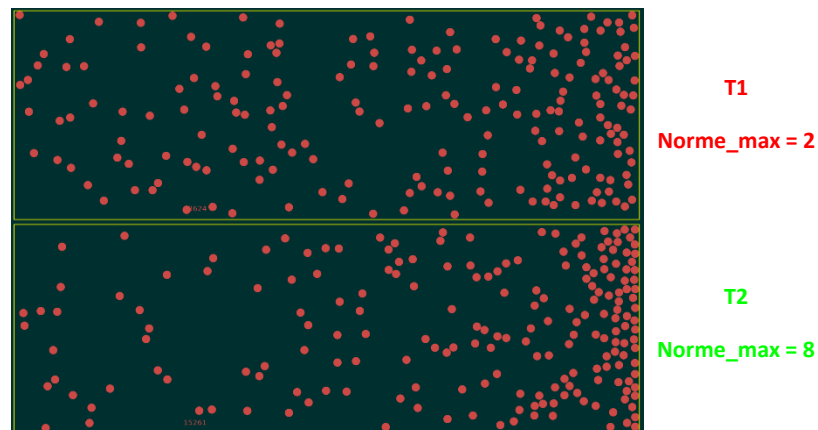


Figure 4 : capture d'écran de l'enceinte avec 2 gradients différents

On observe bien une densité de particules plus importante du côté du mur « froid » lorsque le gradient est plus fort (température du mur « chaud » augmente). Les particules sont ralenties à droite et ont donc plus de mal à sortir de cette région alors qu'à gauche elles sont accélérées et peuvent donc facilement s'échapper.

3. Étude d'une enceinte fermée avec paroi mobile

Pour la suite de notre projet, nous avons placé une paroi mobile qui sépare notre enceinte en deux parties et on se propose d'étudier à nouveau la répartition des vitesses des particules mais également la position de la paroi au cours du temps.

La paroi est codée comme étant la N_p+1 ème particule. Elle possède des dimensions rectangulaires et peut se déplacer uniquement selon l'axe x. Chaque choc avec une particule est élastique, la paroi se déplace alors de gauche à droite et de droite à gauche au gré des collisions (uniquement selon l'axe x).

3.1. Absence d'un gradient de température

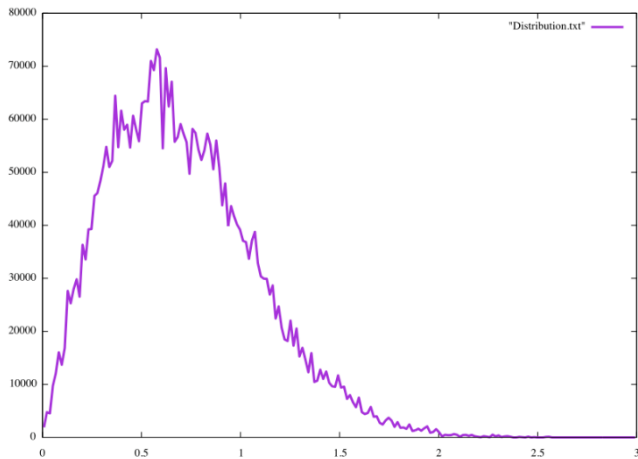


Figure 5 : nombre de chocs en fonction de la norme des vitesses sans gradient mais avec paroi

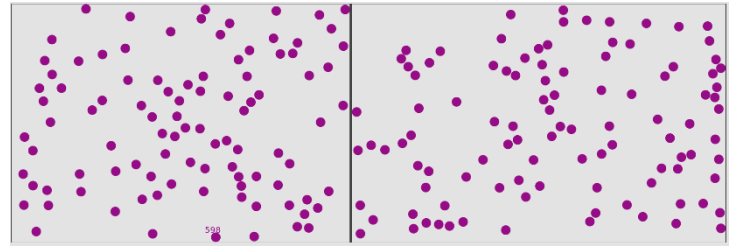


Figure 6 : capture d'écran de l'enceinte avec paroi et sans gradient

On retrouve à nouveau une distribution de Maxwell-Boltzmann toutefois ici, la distribution tend plus rapidement vers 0 que pour la Figure 1. Il existe moins de particules ayant une grande vitesse à un instant t que lors de l'expérience sans paroi.

3.2. Présence d'un gradient de température

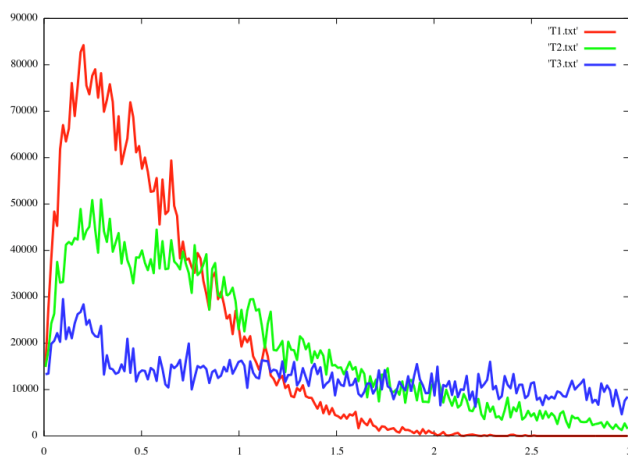


Figure 7 : nombre de chocs en fonction de la norme des vitesses avec gradient et paroi mobile

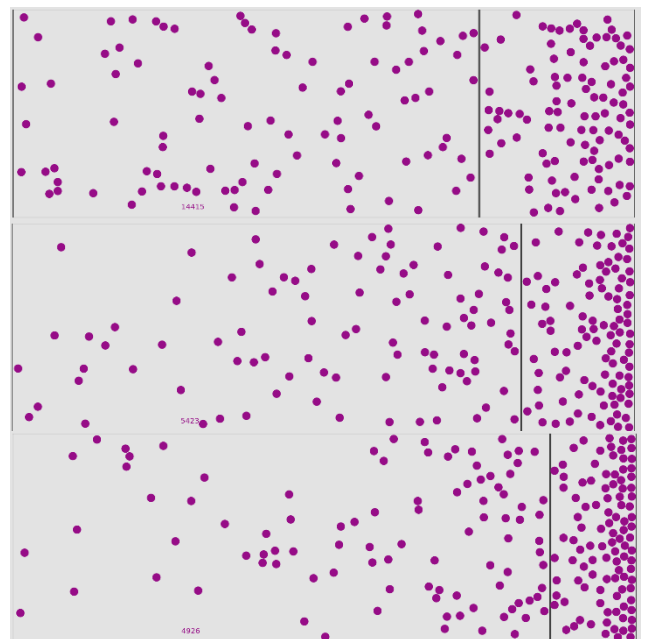


Figure 8 : capture d'écran de l'enceinte avec paroi et avec 3 gradients

Lorsque `norme_max` augmente, la vitesse des particules de gauche augmente et elles viennent ainsi plus souvent taper la paroi, ce qui a pour effet de la déplacer vers la droite et de confiner les particules qui sont de ce côté-là.

La distribution de Maxwell-Boltzmann s'aplatie lorsque le gradient de température augmente. Quand `norme_max` est très grand, on s'approche d'une distribution uniforme.

3.3. Position de la paroi en fonction du gradient de température

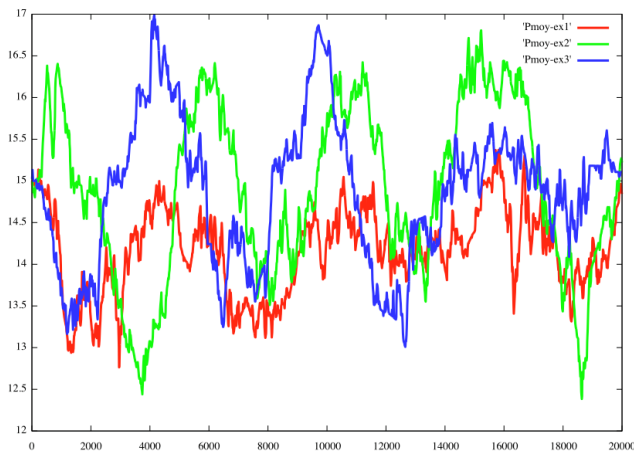


Figure 9 : abscisse de la paroi mobile en fonction du temps en absence d'un gradient

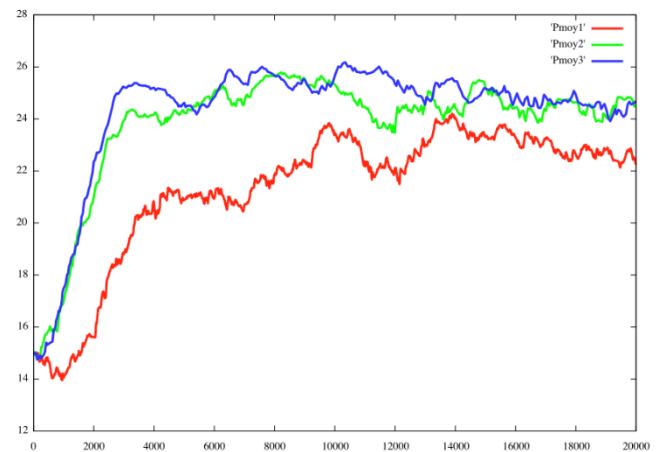


Figure 10 : abscisse de la paroi mobile en fonction du temps en présence d'un gradient

Après s'être intéressé aux particules, nous étudions maintenant le déplacement de la paroi en fonction du temps. Initialement, la paroi se situe à $x = 15$, ce qui correspond à la moitié de la longueur de l'enceinte.

En absence de gradient, l'abscisse de la paroi oscille autour de sa valeur initiale. On remarque que la période d'oscillation reste relativement constante. Nous avons calculé la moyenne pour 3 mesures différentes et obtenues les résultats suivants : 14,8 ; 14,9 ; 15,1. Aucun côté n'est privilégié et la paroi reste au milieu.

En présence d'un gradient, la paroi se déplace vers la droite (x augmente) jusqu'à se stabiliser jusqu'à une certaine valeur (moyenne). Cette valeur est propre à chaque norme_max et est d'autant plus grande que norme_max est grande (on l'observe bien sur la Figure 8). Elle semble toutefois converger vers une valeur maximale, au-delà de laquelle on ne peut plus confiner les particules de droite.

4. Conclusion

Le langage C, par sa gestion efficace de la mémoire, permet de modéliser de nombreux phénomènes physiques tels que la dynamique moléculaire. Nous avons ainsi essayé de retrouver des résultats connus de la thermodynamique, en faisant certaines approximations et simplifications de notre système. Nous avons notamment omis les frottements lors des chocs. Malgré cette approximation, les résultats obtenus semblent concluants et rendent bien compte des phénomènes physiques que l'on peut retrouver dans ce type de système.

Pour rendre le modèle encore plus réaliste on pourrait ainsi introduire des frottements et également un modèle de chocs inélastiques, en considérant le rayon d'une particule comme un ressort.