

## PROJET MASTER 1

Simulation de la cinétique d'un  
modèle de gaz bidimensionnel

BEN BELKACEM Ahcene  
HELOU Cédric

UNIVERSITE PAUL SABATIER

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Fondements de la physique statistique</b>	<b>4</b>
1.1	Introduction . . . . .	4
1.1.1	Intérêt de l'étude statistique . . . . .	4
1.1.2	Evolution de la physique statistique . . . . .	4
1.2	Postulats . . . . .	5
1.2.1	Micro-états et hypothèse ergodique . . . . .	5
1.2.2	Postulat fondamental . . . . .	6
1.2.3	Entropie statistique . . . . .	6
1.3	Distribution de Boltzmann . . . . .	6
1.3.1	Loi de Boltzmann . . . . .	6
1.3.2	Fonction de partition . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Théorie cinétique du gaz parfait et simulation bidimensionnelle</b>	<b>8</b>
2.1	Hypothèses générales . . . . .	8
2.2	Distribution de Boltzmann dans le cas du gaz parfait . . . . .	9
2.2.1	Calcul de la fonction de partition . . . . .	9
2.2.2	Bilan d'énergie pour le calcul du nombre de micro-états accessibles . . . . .	10
2.2.3	Distribution des vitesses . . . . .	10
2.3	Vitesses caractéristiques . . . . .	11
2.3.1	Vitesse la plus probable . . . . .	12
2.3.2	Vitesse moyenne . . . . .	12
2.3.3	Vitesse quadratique et énergie cinétique . . . . .	12
2.4	Notion de pression en cinétique . . . . .	13
2.5	Modélisation bidimensionnelle du gaz parfait . . . . .	14
2.5.1	Principe . . . . .	14
2.5.2	Passage du 3D au 2D . . . . .	15
2.5.3	Collisions entre particules . . . . .	15
2.5.4	Collisions avec les parois . . . . .	16
2.6	Validation des hypothèses et exploitation de la simulation . . . . .	17
2.6.1	Validation de l'hypothèse ergodique . . . . .	17
2.6.2	Obtention de la distribution de Boltzmann . . . . .	18

2.6.3	Loi des gaz parfaits à partir de la simulation . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Phénomène de diffusion</b>	<b>21</b>
3.1	Libre parcours moyen . . . . .	21
3.2	Diffusion à partir d'un centre . . . . .	22
3.3	Explosion . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Modélisation du gaz de Van der Waals</b>	<b>25</b>
4.1	Potentiel de Lennard-Jones et force d'interaction . . . . .	25
4.2	Implémentation dans le simulateur . . . . .	26

# Introduction

Le projet mis en oeuvre a pour visée l'implémentation d'un simulateur de gaz bidimensionnel permettant de modéliser la cinétique d'un gaz sans avoir à résoudre exactement le mouvement de chaque particule.

En effet, cette résolution exacte est impossible pour un nombre réaliste de particules dans un gaz (de l'ordre de  $10^{23}$  particules par mole).

On représente le milieu microscopique par des champs continus (vitesses des particules, densité ...) sur lequel on effectue un moyennage.

Les propriétés microscopiques des particules établies par la physique statistique et la modélisation des collisions/interactions entre elles permettent de retrouver les lois macroscopiques de la thermodynamique.

Nous exposerons d'abord l'intérêt de l'étude statistique du gaz et les postulats généraux relatifs à ce domaine.

La simulation bidimensionnelle du gaz parfait qui a été mise en place sera ensuite présentée et reliée à la théorie cinétique (distribution de Boltzmann, vitesses caractéristiques) afin de retrouver notamment la loi des gaz parfaits.

Le simulateur permet également de visualiser la diffusion moléculaire et d'interpréter les résultats liés à ce phénomène.

Une approche d'un gaz réel sera finalement implémentée dans la simulation par le modèle des interactions de Van der Waals.

# Chapitre 1

## Fondements de la physique statistique

### 1.1 Introduction

#### 1.1.1 Intérêt de l'étude statistique

Le projet proposé consiste en la modélisation d'un gaz en 2 dimensions et repose entièrement sur les principes de la physique statistique dont il est important de définir les fondements. En effet, l'approche statistique microscopique permet d'expliquer le comportement macroscopique.

Cette étude prévoit les principes thermodynamiques du gaz sans avoir recours à l'expérience mais en se basant uniquement sur des propriétés statistiques.

Il est nécessaire de noter que les concepts d'irréversibilité, d'entropie, de température, de pression, de potentiel chimique proviennent de l'étude statistique.

On considère un système isolé et fermé contenant  $N$  molécules (une boîte cubique fermée en 3 dimensions). La résolution d'une approche newtonienne du problème est coûteuse car nécessiterait un super-calculateur (on aurait en effet  $3N$  équations de Newton à résoudre en 3 dimensions en temps réel).

Le traitement statistique apparaît comme une nécessité.

#### 1.1.2 Evolution de la physique statistique

La physique statistique s'est développée principalement au XIXème siècle. Nous présentons ici quelques dates des découvertes dans ce domaine.

- 1859 : Maxwell propose une loi de distribution des vitesses d'un gaz.
- 1866 : Boltzmann soutient sa thèse sur la théorie cinétique des gaz.
- 1872 : Boltzmann présente une interprétation statistique de l'irréversibilité et de l'atteinte de l'équilibre.
- 1908 : Perrin trouve la valeur de la constante de Boltzmann :

$$k_B = \frac{R}{N} = 1,38.10^{-23} J.K^{-1}$$

## 1.2 Postulats

### 1.2.1 Micro-états et hypothèse ergodique

Un micro-état  $\Psi_l$  est la spécification détaillée d'une configuration microscopique d'un système d'un point de vue quantique, où  $l$  est le nombre de degré de liberté du système.

On appelle micro-état accessible un micro-état compatible avec les contraintes macroscopiques.

Deux types de probabilité peuvent être définies sur le système :

- une probabilité temporelle  $P_l$  :

$$P_l = \lim_{\Delta t \rightarrow +\infty} \frac{\Delta t_l}{\Delta t}$$

où  $\Delta t_l$  est la durée pendant laquelle le système s'est trouvé dans l'état  $\Psi_l$  sur l'intervalle de mesure  $\Delta t$ .

- une probabilité statistique  $P'_l$  :

$$P'_l = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{N_l}{N}$$

où  $N$  est le nombre de systèmes identiques au niveau macroscopique parmi lesquels on a au niveau microscopique  $N_l$  systèmes dans le micro-état  $\Psi_l$  à un instant donné. Il s'agit d'une moyenne d'ensemble

**L'hypothèse ergodique stipule que ces deux moyennes sont équivalentes.** Nous exposerons dans le chapitre 2 que la simulation du gaz mis en place la vérifie.

### 1.2.2 Postulat fondamental

Les perturbations extérieures microscopiques dans un système isolé font passer très rapidement le système d'un état  $\Psi_{l_1}$  vers un état  $\Psi_{l_2}$ .

Par conséquent, le système explore tous les micro-états accessibles avec la même fréquence car la transition  $l_1 \rightarrow l_2$  est aussi probable que la transition  $l_2 \rightarrow l_1$ , soit :

$$P_l = C^{te}, \forall \Psi_l$$

En supposant connu le nombre de micro-états accessibles  $\Omega$  que nous ne développerons pas ici, et comme  $\sum P_l = 1$  :

$$P_l = \frac{1}{\Omega}$$

**C'est le postulat fondamental : tous les micro-états accessibles d'un système macroscopiquement isolé sont explorés avec cette même probabilité.**

### 1.2.3 Entropie statistique

Boltzmann définit l'entropie statistique  $S$  par :

$$S = -k_b \sum_l P_l \ln P_l$$

où  $k_b$  est la constante de Boltzmann.

$S$  est une mesure du manque d'information et ne dépend que de la distribution des micro-états. L'entropie statistique correspond à l'entropie thermodynamique quand  $N \rightarrow \infty$  en posant  $k_B = \frac{R}{N} = 1,38.10^{-23} J.K^{-1}$ .

Par le postulat fondamental, cette définition devient :

$$S = k_b \ln \Omega$$

## 1.3 Distribution de Boltzmann

### 1.3.1 Loi de Boltzmann

La définition de la température donne  $\frac{1}{T} \equiv \frac{\partial}{\partial E} k_b \ln \Omega$  où  $E$  est l'énergie interne du système.

La loi de distribution de Boltzmann en énergie s'écrit d'un point de vue probabiliste :

$$P_E = C^{te} \Omega e^{-\frac{E}{k_b T}}$$

La probabilité  $P_l$  de trouver le système dans le micro-état  $\Psi_l$  d'énergie  $E_l$  est par conséquent :

$$P_l = \frac{P_E}{\Omega} = C^{te} e^{-\frac{E_l}{k_b T}}$$

### 1.3.2 Fonction de partition

On a  $\sum_l P_l = 1$  soit  $\sum_l C^{te} e^{-\frac{E_l}{k_b T}} = 1$ .

La fonction de partition  $z$  est définie de la sorte :

$$z = \sum_l e^{-\frac{E_l}{k_b T}}$$

ce qui implique :

$$P_l = \frac{1}{z} e^{-\frac{E_l}{k_b T}}$$

Les définitions présentées ici seront développées dans le chapitre 2 dans le cas du gaz parfait monoatomique.



## Chapitre 2

# Théorie cinétique du gaz parfait et simulation bidimensionnelle

Le simulateur de gaz bidimensionnel a été implémenté en premier lieu dans le cas du gaz parfait.

Nous verrons comment les résultats obtenus après simulation permettent de valider les hypothèses et les lois relatives au gaz parfait d'un point de vue thermodynamique.

### 2.1 Hypothèses générales

Si on considère un gaz parfait en équilibre constitué de  $N$  particules à température  $T$  dans un volume  $V$ , les hypothèses suivantes ont été posées :

- $T$  est suffisamment élevée pour négliger les effets quantiques.
- l'énergie potentielle est nulle ; l'énergie cinétique est égale à  $\frac{1}{2}mv^2$  où  $v$  est la vitesse des particules.
- le système est homogène :  $\frac{\Delta N}{\Delta V} = C^{te}$ .
- les composantes de vitesse sont indépendantes.
- la distribution est isotrope ; aucune direction n'est privilégiée.
- la distribution est uniforme.

— l'hypothèse ergodique doit être respectée :

$$\frac{1}{T} \int_0^T v(u) du \xrightarrow{T \rightarrow \infty} E[v(t)]$$

où  $E$  est l'espérance statistique.

## 2.2 Distribution de Boltzmann dans le cas du gaz parfait

Pour déterminer la distribution des vitesses selon une forme de Boltzmann dans un gaz parfait, on cherche à calculer la fonction de partition pour un gaz parfait puis avec un bilan d'énergie, on obtient le nombre de micro-états accessibles.

Ces deux résultats permettent d'aboutir à la formule de distribution des vitesses des particules dans le gaz parfait.

### 2.2.1 Calcul de la fonction de partition

Soit une particule de masse  $m$  dans un cube d'arête  $a$ .

L'énergie cinétique des particules obéit à la loi :

$$E_l = \varepsilon_0(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \text{ avec } \varepsilon_0 = \frac{h^2}{8ma^2}$$

où  $h$  est la constante de Planck et  $(n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{N}^{*3}$  les niveaux d'énergie quantiques.

La fonction de partition correspond à un produit de trois sommes, si on considère  $n_x \simeq n_y \simeq n_z \simeq n$  :

$$z = \left( \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_0 n^2}{k_b T}} \right)^3$$

On peut approcher  $z$  par une intégrale soit :

$$z \simeq \int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_0 x^2}{k_b T}} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi k_b T}{\varepsilon_0}} = \sqrt{2\pi m k_b T} \frac{a}{h}$$

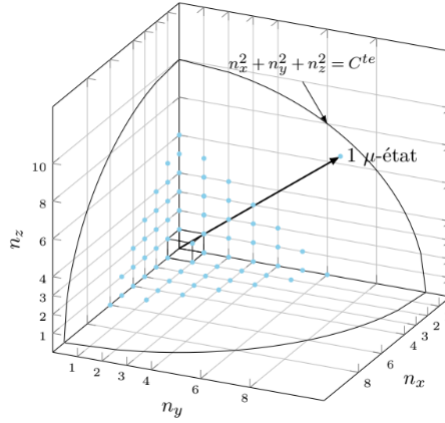
En posant  $V = a^3$ , on obtient finalement la fonction de partition des particules dans un gaz parfait :

$$z = \frac{V}{h^3} (2\pi m k_b T)^{3/2}$$

### 2.2.2 Bilan d'énergie pour le calcul du nombre de micro-états accessibles

On note  $\Phi$  le nombre de micro-états vérifiant la propriété  $E_l \leq E$  c'est-à-dire  $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq \frac{E}{\varepsilon_0}$ . On note  $R = \sqrt{\frac{E}{\varepsilon_0}}$ .

$\Phi$  correspond au nombre de nœuds d'un réseau cubique d'arête  $a = 1$  compris dans un huitième de sphère de rayon  $R$ , comme présenté dans la figure ci-dessous :



On obtient donc :

$$\Phi = \frac{1}{8} \frac{4/3\pi R^3}{a^3} = \frac{1}{6}\pi \left(\frac{E}{\varepsilon_0}\right)^{3/2} = \frac{4}{3}\pi \frac{V(2mE)^{3/2}}{h^3}$$

Le nombre de micro-états dont l'énergie est comprise entre  $E$  et  $E + dE$  peut s'approximer comme :

$$\Omega \simeq \frac{\partial \Phi}{\partial E} dE = \frac{V}{h^3} 4\pi m \sqrt{2mE} dE$$

On note pour la suite  $\rho_E = \frac{V}{h^3} 4\pi m \sqrt{2mE}$  la densité d'état en énergie telle que  $\Omega = \rho_E dE$ .

### 2.2.3 Distribution des vitesses

La loi de Boltzmann donne la probabilité de trouver une particule avec une énergie  $E$  :

$$dP(E) = \frac{e^{-\frac{E}{k_b T}}}{z} \rho_E dE \text{ où } z = \frac{V}{h^3} (2\pi m k_b T)^{3/2}$$

Comme  $E = \frac{1}{2}mv^2$ , on a  $dE = mv dv$ .

Par l'expression de  $\rho_E$  établie en 2.2.2, on a la probabilité de trouver une particule à la vitesse  $v$  :

$$dP(v) = \left( \frac{m}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} e^{-\frac{1/2mv^2}{k_b T}} 4\pi v^2 dv$$

On peut identifier  $4\pi v^2 dv$  à un élément de volume  $d\tau$ .

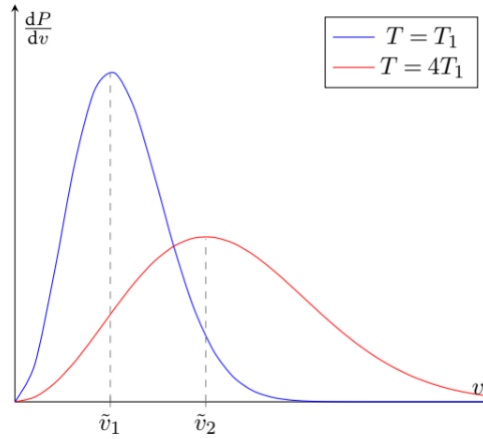
La probabilité  $dP(\vec{v})$  qu'une molécule ait une vitesse  $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$  à  $d\vec{v} = (dv_x, dv_y, dv_z)$  près vérifie la relation d'isotropie :

$$\frac{dP(\vec{v})}{dP(v)} = \frac{d^3\tau}{d\tau}$$

On a finalement :

$$dP(\vec{v}) = \left( \frac{m}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} e^{-\frac{1/2mv^2}{k_b T}} dv_x dv_y dv_z$$

C'est la loi de Maxwell-Boltzmann sur la répartition des vitesses.



## 2.3 Vitesses caractéristiques

Trois types de vitesse seront définies dans le gaz : la vitesse la plus probable, la vitesse moyenne et la vitesse quadratique.

### 2.3.1 Vitesse la plus probable

La vitesse la plus probable  $\tilde{v}$  correspond au maximum de densité de probabilité  $\frac{dP}{dv}$ , soit :

$$\frac{d}{dv} \left( v^2 e^{-\frac{1/2mv^2}{k_b T}} \right) = \left( 2v - \frac{mv^3}{k_b T} \right) e^{-\frac{1/2mv^2}{k_b T}} = 0$$

$$\text{d'où } \tilde{v} = \sqrt{\frac{2k_b T}{m}}$$

### 2.3.2 Vitesse moyenne

La vitesse moyenne  $\bar{v}$  correspond à la moyenne de la norme de  $\vec{v}$  :

$$\bar{v} = \int_0^\infty v dP(v) = \int_0^\infty \left( \frac{m}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} e^{-\frac{1/2mv^2}{k_b T}} 4\pi v^3 dv$$

ce qui donne après le calcul intégral :

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi m}}$$

### 2.3.3 Vitesse quadratique et énergie cinétique

La vitesse quadratique  $v_q$  est l'écart type du vecteur vitesse soit la racine de la moyenne du carré (*root mean square*) :

$$v_q^2 = \overline{v^2} = \int_0^\infty v^2 dP(v) = \int_0^\infty \left( \frac{m}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} e^{-\frac{1/2mv^2}{k_b T}} 4\pi v^4 dv$$

ce qui donne après le calcul intégral :

$$v_q^2 = \frac{3k_b T}{m}$$

$$\text{donc } v_q = \sqrt{\frac{3k_b T}{m}}$$

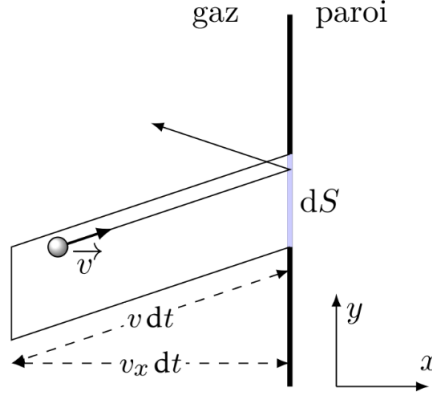
Cette dernière formulation de la vitesse sera celle utilisée dans la modélisation.

On remarque notamment que  $\tilde{v} \leq \bar{v} \leq v_q$ .

L'énergie cinétique d'une particule est donnée par  $E_C = \overline{1/2mv^2} = \frac{3}{2}k_b T$ .

## 2.4 Notion de pression en cinétique

La pression au point de vue microscopique correspond aux chocs des particules du gaz sur les parois, soit une force par unité de surface dirigée vers l'extérieur.



On note  $dN$  le nombre de particules qui frappent  $dS$  pendant  $dt$  d'où le volume de mesure est  $v_x dt dS$ .

La concentration de particules dans ce volume de mesure ayant une vitesse comprise entre  $\vec{v}$  et  $\vec{v} + d\vec{v}$  est  $\frac{N}{V} dP(\vec{v})$

$$\text{donc } dN = v_x dt dS \frac{N}{V} dP(\vec{v})$$

La quantité de mouvement donnée par chaque molécule à la paroi est  $2mv_x$ . Le principe fondamental de la dynamique donne alors :

$$dF_x = \frac{2mv_x dN}{dt} = \frac{2mN}{V} dS v_x^2 dP(\vec{v})$$

La force moyenne sur la paroi peut s'écrire :

$$\overline{F_x} = \frac{2mN}{V} dS \int_{v_x} \int_{v_y} \int_{v_z} v_x^2 dP(\vec{v}) = \frac{mN}{V} dS \overline{v_x^2}$$

L'hypothèse d'isotropie implique que  $\overline{v_x^2} = \frac{1}{3} \overline{v^2}$

soit

$$\overline{F_x} = \frac{2N}{3V} dS \overline{\frac{1}{2} m v^2}$$

donc l'expression de la pression cinétique résulte de cette force moyenne par unité de surface :

$$p_c = \frac{2N}{3V} \overline{\frac{1}{2}mv^2}$$

En prenant l'expression de l'énergie cinétique définie en 2.3.3, on retrouve l'identité thermodynamique :

$$p_c V = N k_b T$$

**La pression cinétique s'assimile à la pression du gaz parfait.**

Cette pression cinétique a été évaluée dans le cadre de la simulation.

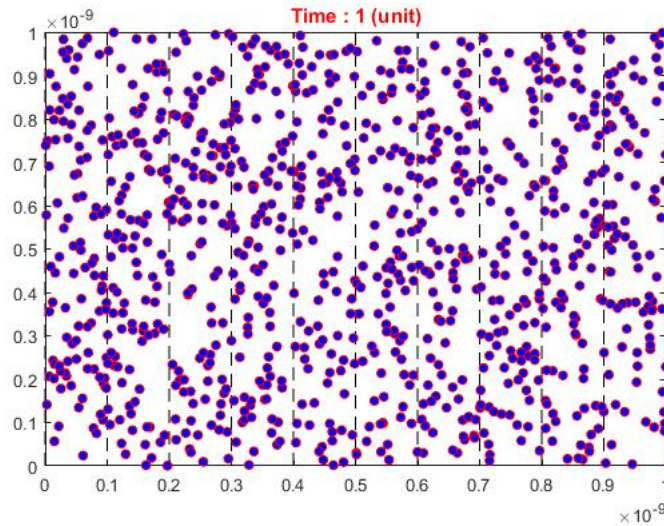
## 2.5 Modélisation bidimensionnelle du gaz parfait

### 2.5.1 Principe

Dans la simulation, les particules sont réparties aléatoirement sur le domaine 2D fermé par 4 murs ; leur vitesse initiale est posée comme  $\sqrt{\frac{3k_b T}{m}}$ .

La dynamique des collisions entre particules et des collisions avec les parois assure le mouvement des particules.

Les équations de balistique permettent l'évolution temporelle du système. On peut choisir d'appliquer ou non la gravité à la simulation.



### 2.5.2 Passage du 3D au 2D

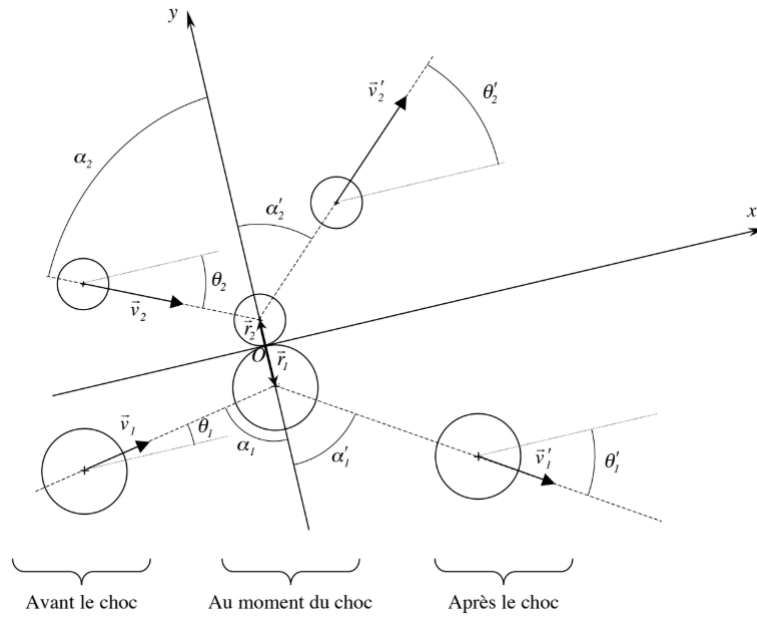
La modélisation du gaz proposée sur MATLAB a été réalisée en 2 dimensions. Certaines grandeurs définies dans ce chapitre ont des expressions valables en 3D ; il est donc nécessaire de retrouver leur équivalence en 2D.

Par exemple, la pression cinétique ne va pas être utilisée comme une force moyenne par unité de surface mais une force par unité de longueur (tension superficielle  $\tau$ ) puisque la paroi dans la modélisation bidimensionnelle est une grandeur à une dimension.

La loi des gaz parfait devient par conséquent  $\tau A = Nk_b T$  où  $A$  est l'aire du domaine 2D.

### 2.5.3 Collisions entre particules

Dans un gaz parfait, le modèle de collisions élastiques entre sphères dures est envisagé. Nous présentons ici les résultats d'un choc entre 2 particules en bidimensionnel dont les vitesses avant le choc sont connues.



Le problème proposé consiste en la résolution du système d'équations suivant provenant des différents principes de conservation (moment cinétique, quantité de mouvement et énergie mécanique) :



$$\begin{cases} m_1 r_1 v_1 \cos \theta_1 + m_2 r_2 v_2 \cos \theta_2 = m_1 r_1 v'_1 \cos \theta'_1 + m_2 r_2 v'_2 \cos \theta'_2 \\ m_1 v_1 \cos \theta_1 + m_2 v_2 \cos \theta_2 = m_1 v'_1 \cos \theta'_1 + m_2 v'_2 \cos \theta'_2 \\ m_1 v_1 \sin \theta_1 + m_2 v_2 \sin \theta_2 = m_1 v'_1 \sin \theta'_1 + m_2 v'_2 \sin \theta'_2 \\ m_1 v_1^2 + m_2 v_2^2 = m_1 v'^2_1 + m_2 v'^2_2 \end{cases}$$

Les angles  $\theta'_1$  et  $\theta'_2$  et les vitesses  $v'_1$  et  $v'_2$  des particules après le choc sont données par :

$$\theta'_1 = \arctan\left(\frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \tan \theta_1 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \frac{v_2 \sin \theta_2}{v_1 \cos \theta_1}\right)$$

$$v'_1 = \sqrt{\left(\frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} v_1 \sin \theta_1 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} v_2 \sin \theta_2\right)^2 + (v_1 \cos \theta_1)^2}$$

$$\theta'_2 = \arctan\left(\frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2} \tan \theta_2 + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{v_1 \sin \theta_1}{v_2 \cos \theta_2}\right)$$

$$v'_2 = \sqrt{\left(\frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2} v_2 \sin \theta_2 + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} v_1 \sin \theta_1\right)^2 + (v_2 \cos \theta_2)^2}$$

Les collisions entre particules ont été implémentées de cette manière dans la simulation du gaz si la distance entre 2 particules est inférieure à leur diamètre.

#### 2.5.4 Collisions avec les parois

Si  $L_x$  et  $L_y$  sont les dimensions du domaine carré 2D où se trouve les particules, (x,y) la position d'une particule et  $u, v$  leurs composantes de vitesse, on a les conditions suivantes pour réaliser les collisions avec les parois :

```
si x<0 et u<0 (paroi gauche)
u=-u
x=-x
```

```
si x>Lx et u>0 (paroi droite)
u=-u
x=Lx-(x-Lx)
```

```

si y<0 et v<0 (paroi basse)
v=-v
y=-y

si y>Ly et v>0 (paroi haute)
v=-v
y=Ly-(y-Ly)

```

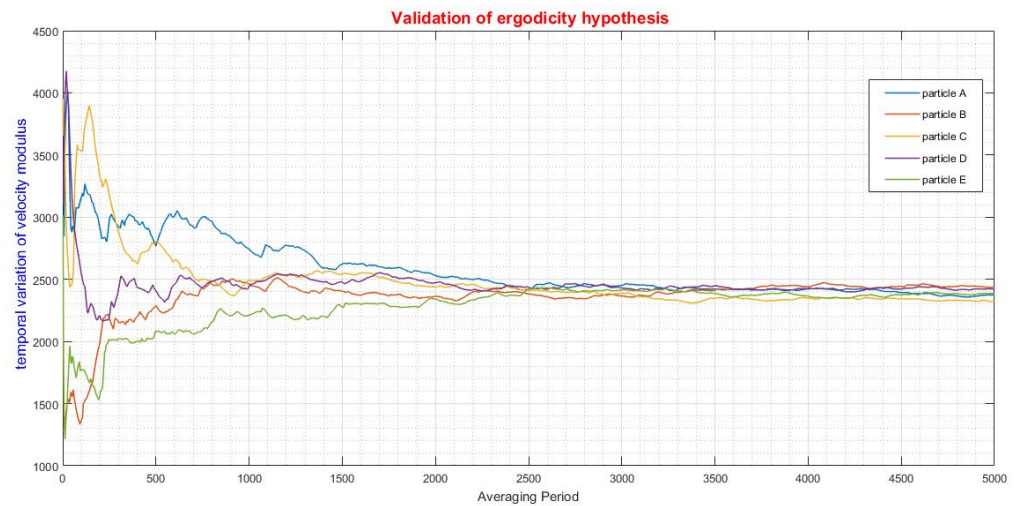
## 2.6 Validation des hypothèses et exploitation de la simulation

### 2.6.1 Validation de l'hypothèse ergodique

On cherche à retrouver l'hypothèse ergodique sur les vitesses à savoir :

$$\frac{1}{T} \int_0^T v(u) du \xrightarrow{T \rightarrow \infty} E[v(t)]$$

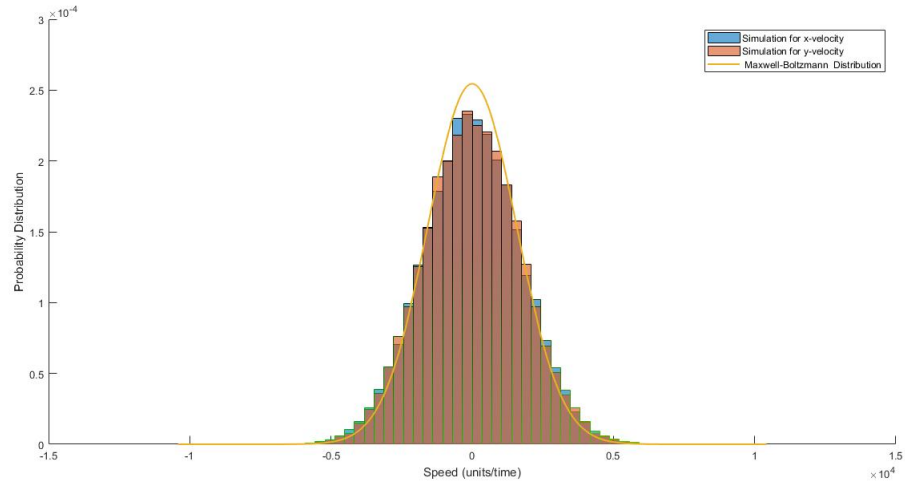
Pour 5 particules prises au hasard dans le système, on observe que la moyenne temporelle du module des vitesses converge vers une moyenne statistique.



L'ergodicité de la simulation est vérifiée.

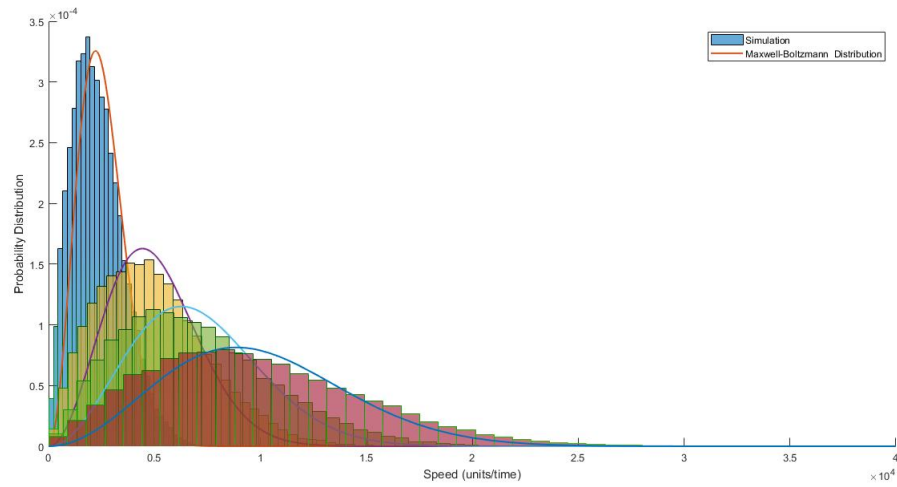
### 2.6.2 Obtention de la distribution de Boltzmann

Nous avons pu tracer en premier lieu les composantes de vitesse  $v_x$  et  $v_y$  à  $T = 25^\circ C$  issue de la simulation pour la comparer à la solution théorique de la distribution des vitesses établie en 2.2.3 :



**La loi de distribution de Boltzmann sur les vitesses relative au gaz parfait est retrouvée par la simulation.**

Nous avons ensuite représenté le module des vitesses pour des températures différentes  $T1 = 25^\circ C$  (bleu),  $T2 = 4T1$  (jaune),  $T3 = 8T1$  (vert) et  $T4 = 16T1$  (rouge) avec les distributions de Boltzmann théoriques associées :

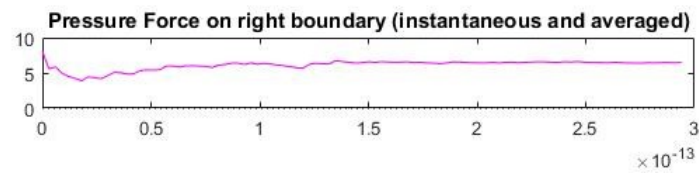


Le maximum de densité de probabilité décroît quand la température augmente.

La vitesse la plus probable a une valeur de plus en plus élevée quand la température augmente.

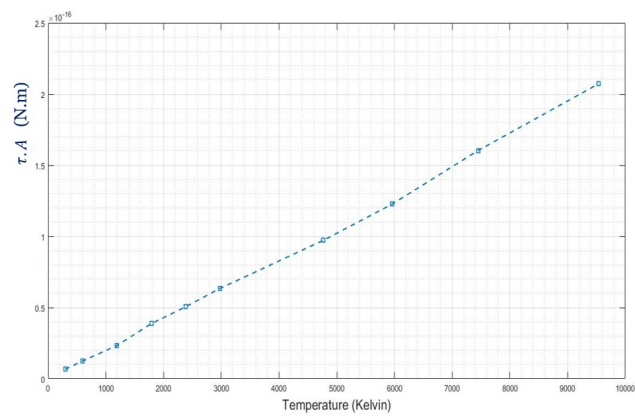
### 2.6.3 Loi des gaz parfaits à partir de la simulation

La pression a pu être estimée en considérant la force moyenne des particules par unité de longueur sur les parois.



La pression sur l'ensemble du gaz est bien quasiment constante comme le système est fermé et isolé à l'équilibre.

La loi des gaz parfait  $PV = nRT = Nk_bT$  a également pu être vérifiée ou plutôt son équivalent en 2D :  $\tau A = Nk_bT$



La tension superficielle est proportionnelle à la température.

## Chapitre 3

# Phénomène de diffusion

Le phénomène de diffusion moléculaire dans les fluides peut être observé dans la simulation de façon notable si l'on place un groupe de particules au centre du domaine 2D dans lequel un autre groupe de particules a été réparti aléatoirement.

La température du groupe mis au centre est plus élevée que celle du second groupe afin d'observer la diffusion du premier groupe dans le second du centre vers l'extérieur.

L'étude se porte ici sur la diffusion à l'échelle microscopique. On rappelle quand même la loi phénoménologique de Fick à l'échelle macroscopique qui stipule que le courant de matière qui diffuse est proportionnel au gradient de la concentration  $c$  à savoir :

$$\vec{j}_n = -D \overrightarrow{\text{grad}}(c)$$

où  $D$  est le coefficient de diffusion.

### 3.1 Libre parcours moyen

On définit le libre parcours moyen  $l$  comme étant la distance moyenne entre deux collisions successives de particules de rayon  $r$ .

On peut alors montrer que, dans un gaz parfait,  $l$  est de l'ordre de

$$l = \frac{k_b T}{\sqrt{2} \sigma p}$$

où  $\sigma = 4\pi r^2$  est la section efficace de collision.

Si  $\tau$  est la durée entre 2 collisions, le coefficient de diffusion  $D$  peut s'écrire de façon qualitative :

$$D \equiv \frac{l^2}{\tau} = l\bar{v}$$

On retiendra

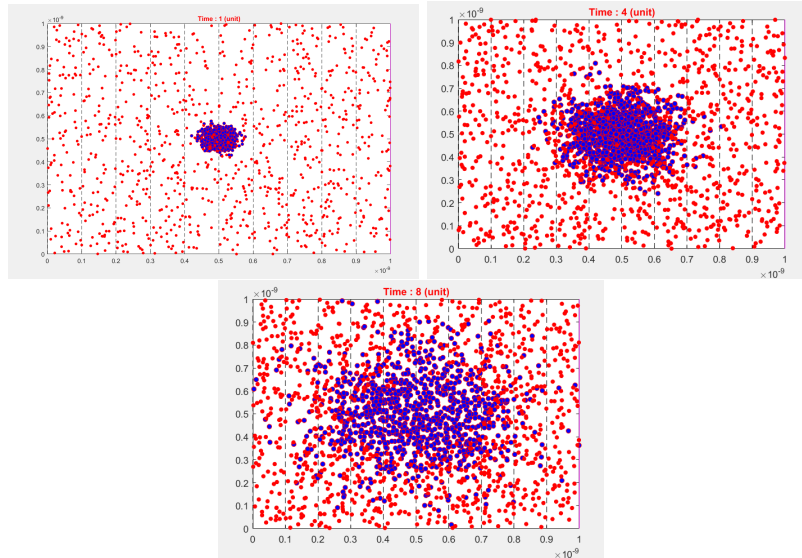
— En 2D :

$$D = \frac{1}{4} \frac{l^2}{\tau}$$

— En 3D :

$$D = \frac{1}{6} \frac{l^2}{\tau}$$

### 3.2 Diffusion à partir d'un centre



L'isotropie du phénomène de diffusion permet d'établir que le rayon d'étalement des particules  $R(t)$  évolue en  $\sqrt{t}$ .

Plus exactement, on a  $R(t) = \frac{l^2}{\tau}t$  d'où à partir des expressions du coefficient de diffusion en 3.1 :

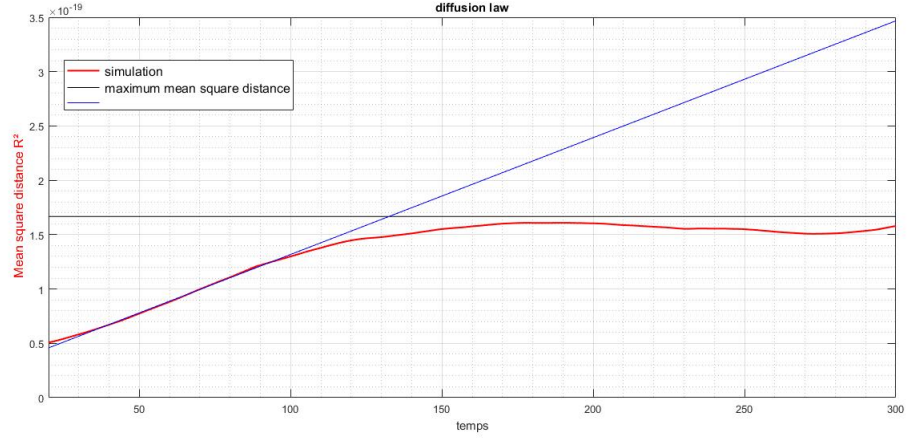
— En 2D :

$$R(t) = \sqrt{4Dt}$$

— En 3D :

$$R(t) = \sqrt{6Dt}$$

Dans le cadre de notre simulation, on place les particules au centre du carré fermé. La moyenne du carré de  $R(t)$  a été tracée :



La courbe observée montre que  $R^2$  est proportionnel au temps dans les premiers instants soit une loi d'expansion en  $\sqrt{t}$ .

Comme les particules ne peuvent pas quitter le cadre, on observe une limite de la diffusion qui correspond aux "effets de bord". Nous pouvons calculer cette valeur maximale  $R_{max}^2$ .

On note  $L_x = L_y = L$  les dimensions du domaine carré. Si toutes les positions sont équiprobables, la probabilité d'être en  $(x, y)$  à  $(dx, dy)$  près est  $dP = \frac{1}{L^2} dx dy$  d'où

$$\overline{x^2} = \int x^2 dP = \frac{1}{L^2} \int x^2 dx dy = \frac{L^2}{12}$$

Le même calcul peut être effectué sur la dimension verticale  $y$ . On obtient finalement :

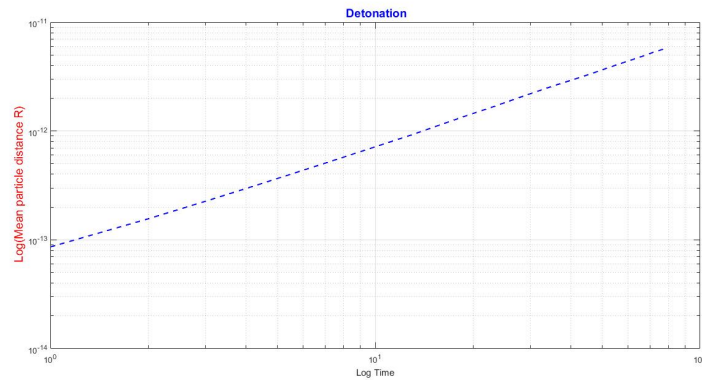
$$R_{max}^2 = \overline{x^2} + \overline{y^2} = \frac{L^2}{6}$$



### 3.3 Explosion

Si on augmente les vitesses du groupe au centre (ce qui revient à augmenter la température du groupe), le rayon d'étalement des particules devient proportionnel à  $t$  et non à  $\sqrt{t}$ .

On parle de phénomène d'explosion ou d'onde de choc.



Ici, le rayon d'étalement  $R = \sqrt{\bar{x}^2 + \bar{y}^2}$

**On a une relation de proportionnalité de pente 1 entre  $R$  et le temps.**

## Chapitre 4

# Modélisation du gaz de Van der Waals

L'équation d'état du gaz de Van der Waals est une équation d'état approchée du gaz réel.

$$\left(P + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

où  $a$  est le terme de cohésion et  $b$  le covolume molaire (constantes).

Nous avons cherché à simuler ce gaz réel dans le simulateur.

### 4.1 Potentiel de Lennard-Jones et force d'interaction

On définit le potentiel de Lennard-Jones entre 2 particules situées à une distance  $r$  l'une de l'autre comme suit :

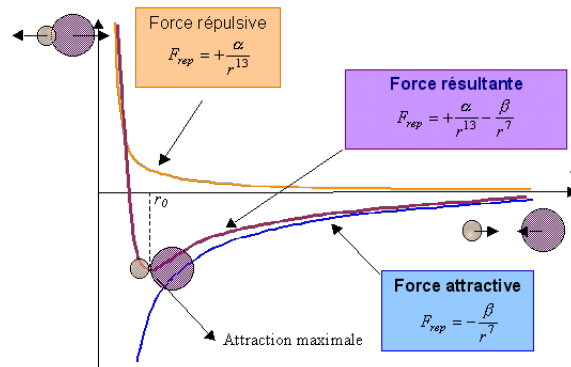
$$U(r) = 4\epsilon \left( \frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma^6}{r^6} \right)$$

$\sigma$  est la distance à laquelle le potentiel est nul et  $\epsilon$  la profondeur du potentiel (minimum de l'énergie).

Comme  $\vec{f} = -\overrightarrow{grad}(U(r))$ , on obtient l'expression résultante de la force d'interaction comme somme d'une force répulsive et d'une force attractive :

$$\boxed{\vec{f} = \vec{f}_{rep} + \vec{f}_{att} = \frac{24\epsilon}{r} \left( 2\frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma^6}{r^6} \right) \cdot \vec{n}}$$

où  $\vec{n}$  est la normalisation du vecteur distance entre 2 particules.



Quand les particules sont situées à une distance inférieure à  $r_0$ , la force d'interaction est répulsive ; sinon celle-ci est attractive comme présenté dans le graphe ci-dessus.

Ce modèle permet d'avoir une simulation plus réaliste des collisions entre particules que les collisions élastiques entre sphères dures dans le gaz parfait.

## 4.2 Implémentation dans le simulateur

Chaque particule dans le gaz subit une force attractive ou répulsive exercée par chaque autre particule. Ainsi, il est nécessaire d'effectuer en plus de la boucle temporelle, une double boucle sur les particules pour évaluer les interactions.

```

boucle sur t
  pour i de 1 à Nparticules
    pour j de i+1 à Nparticules

      stockage des distances entre particules
      calcul de la norme de la force
      calcul de la force suivant x
      calcul de la force suivant y
      calcul du potentiel

    fin de boucle sur j
  fin de boucle sur i
fin de boucle sur t

```

Deux algorithmes de discrétisation permettent de calculer vitesse et position aux temps suivants : les méthodes d'Euler et de Verlet

Euler suivant x

$$\begin{aligned}X(i,t+1) &= X(i,t) + V(i,t)*dt; \\V(i,t+1) &= V(i,t) + (\text{sum}(f\_x)/m(i))*dt;\end{aligned}$$

Euler suivant y

$$\begin{aligned}U(i,t+1) &= U(i,t) + (\text{sum}(f\_y)/m(i))*dt; \\Y(i,t+1) &= Y(i,t) + U(i,t)*dt;\end{aligned}$$

Verlet suivant x

$$\begin{aligned}X(i,t+1) &= -X(i,t-1) + 2*X(i,t) + \text{sum}(f\_x)/m(i)*dt^2; \\V(i,t) &= (X(i,t-1) - X(i,t+1))/(2*dt);\end{aligned}$$

Verlet suivant y

$$\begin{aligned}Y(i,t+1) &= -Y(i,t-1) + 2*Y(i,t) + \text{sum}(f\_y)/m(i)*dt^2; \\U(i,t) &= (Y(i,t-1) - Y(i,t+1))/(2*dt);\end{aligned}$$

La méthode de Verlet apparaît plus efficace pour éviter la divergence de la simulation. Des pas de temps  $dt$  très petits ont été utilisés à cette fin également.

# Conclusion

Le simulateur de gaz bidimensionnel qui a été implémenté permet non seulement de visualiser des phénomènes physiques tels que la diffusion mais aussi de retrouver des résultats de la thermodynamique.

Les différentes études statistiques proposées montrent l'intérêt de considérer l'échelle microscopique dans l'explication de l'évolution des grandeurs macroscopiques.

La cohérence des résultats obtenus avec la théorie montre la puissance de la modélisation par rapport à une résolution exacte d'équations.

# Bibliographie

G. GALLAVOTTI, *Ergodicity, Ensembles, Irreversibility in Boltzmann and Beyond*

J.ROUSSEL, *Introduction à la physique statistique*, Cours

P.REBETEZ, *Choc élastique en 2 dimensions*

Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Indonesia, *Partition function of 1-, 2-, and 3-D monatomic ideal gas : A simple and comprehensive review*

B.MONASSE, F.BOUSSINOT, *Détermination des forces à partir d'un potentiel en dynamique moléculaire (note)*