Concours Blanc — Informatique

Simulation de la cinétique d'un gaz parfait (centrale 2018)

La théorie cinétique des gaz vise à expliquer le comportement macroscopique d'un gaz à partir des mouvements des particules qui le composent. Depuis la naissance de l'informatique, de nombreuses simulations numériques ont permis de retrouver les lois de comportement de différents modèles de gaz comme celui du gaz parfait.

Ce sujet s'intéresse à un gaz parfait monoatomique. Nous considérerons que le gaz étudié est constitué de N particules sphériques, toutes identiques, de masse m et de rayon R, confinées dans un récipient rigide. Les simulations seront réalisées dans un espace à une, deux ou trois dimensions ; le récipient contenant le gaz sera, suivant le cas, un segment de longueur L, un carré de côté L ou un cube d'arête L.

Dans le modèle du gaz parfait, les particules ne subissent aucune force (leur poids est négligé) ni aucune autre action à distance. Elle n'interagissent que par l'intermédiaire de chocs, avec une autre particule ou avec la paroi du récipient. Ces chocs sont toujours élastiques, c'est-à-dire que l'énergie cinétique totale est conservée.

Les seuls langages de programmation autorisés dans cette épreuve sont Python et SQL. Pour répondre à une question il est possible de faire appel aux fonctions définies dans les questions précédentes. Dans tout le sujet on suppose que les bibliothèques math et random ont été importées grâce aux instructions

```
import math
import random
```

Si les candidats font appel à des fonctions d'autres bibliothèques ils doivent préciser les instructions d'importation correspondantes.

Ce sujet utilise la syntaxe des annotations pour préciser le types des arguments et du résultat des fonctions à écrire. Ainsi

```
def maFonction(n:int, x:float, 1:[str]) -> (int, [int]):
```

signifie que la fonction maFonction prend trois arguments, le premier est un entier, le deuxième un nombre à virgule flottante et le troisième une liste de chaines de caractères et qu'elle renvoie un couple dont le premier élément est un entier et le deuxième une liste d'entiers. Il n'est pas demandé aux candidats de recopier les entêtes avec annotations telles qu'elles sont fournies dans ce sujet, ils peuvent utiliser des entêtes classiques. Ils veilleront cependant à décrire précisément le rôle des fonctions qu'ils définiraient eux-mêmes.

Une liste de fonctions utiles est donnée à la fin du sujet.

Représentation en Python

Chaque particule est représentée par une liste de deux éléments, le premier correspond à la position de son centre, la deuxième à sa vitesse. Chacun de ces éléments (position et vitesse) est représenté par une liste dont le nombre de composantes correspond à la dimension de l'espace de simulation.

Les positions et vitesses sont exprimées sous forme de coordonnées cartésiennes dans un repère orthonormé dont l'origine est placée dans un coin du récipient contenant le gaz et dont les axes sont parallèles aux côtés du récipient issus de ce coin de façon à ce que tout point situé à l'intérieur du récipient ait ses coordonnées comprises entre 0 et L.

Les positions sont exprimées en mètres et les vitesses en $m \cdot s^{-1}$. La figure 1 propose des exemples de particules dans des espaces de diverses dimensions.

```
p1 = [[5.3], [412.3]] # 1D

p2 = [[3.1, 4.8], [241, -91.4]] # 2D

p3 = [[5.2, 3.2, 2.3], [-130.1, 320, 260.2]] # 3D
```

Figure 1—Exemples de particules

1 Initialisation

Pour pouvoir réaliser une simulation, il convient de disposer d'une situation initiale, c'est-à-dire d'un ensemble de particules réparties dans le récipient et dotées d'une vitesse initiale connue. Cette partie s'intéresse au positionnement aléatoire d'un ensemble de particules. L'attribution de vitesses initiales à ces particules ne sera pas abordé ici.

1.1 Placement en dimension 1

Nous cherchons d'abord comment placer N particules (sphères de rayon R) le long d'un segment de longueur L sans qu'elles se chevauchent ni qu'elles sortent du segment. La figure 2 montre quelques exemples de placements possibles avec N=5, R=0, 5 et L=10.

2017–2018 page 1/7

Figure 2-Exemples de placement de 5 particules sur un segment de longueur 10.

La fonction placement1D construit aléatoirement, à partir des paramètres géométriques du problème (nombre et rayon des particules, taille du récipient), une liste de coordonnées correspondant à la position initiale du centre de chaque particule.

```
def placement1D(N:int, R:float, L:float) -> [float]:
2
3
        def possible(c):
            if c < R or c > L - R: return False
4
5
            for p in res:
6
                 if abs(c - p) < 2*R: return False
7
            return True
8
9
        res=[]
        while len(res) < N:
10
            p = L * random.random()
11
            if possible(p): res.append(p)
12
13
       return res
```

- Q 1. Détailler l'action de la ligne 11.
- Q 2. Quelle est la signification du paramètre c de la fonction possible (ligne 3)?
- **Q 3.** Expliquer le rôle de la ligne 4.
- **Q 4.** Expliquer le rôle des lignes 5 et 6.
- Q 5. Donner en une phrase le rôle de la fonction possible.
- **Q 6.** Proposer une nouvelle version de la ligne 11 permettant d'éviter certains rejets (ceux de la ligne 4) de la part de la fonction possible.
- Q 7. On considère l'appel placement1D(4, 0.5, 5) et on suppose que les trois premières particules ont été placées aux points d'abscisses 1, 2,5 et 4 (figure 3). Quelle sera la suite du déroulement de la fonction placement1D?



Figure 3

- Q 8. Quelle est la complexité temporelle de la fonction placement 1D dans le cas où $N \ll N_{\text{max}}$, nombre maximal de particules de rayon R pouvant être placées sur un segment de longueur L?
- Q 9. Pour remédier de manière simple (mais non optimale) à la situation de la question 7, on décide de recommencer à zéro le placement des particules dès qu'une particule est rejetée par la fonction possible. Réécrire les lignes 9 à 13 de la fonction placement 1D pour mettre en œuvre cette décision.

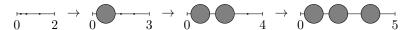
1.2 Optimisation du placement en dimension 1

Pour placer aléatoirement N particules le long d'un segment, nous envisageons une approche plus efficace que celle étudiée dans la sous-partie 1.1.

L'idée est de calculer l'espace laissé libre sur le segment cible par N particules puis de répartir aléatoirement cet espace libre entre les particules. Afin de conserver une répartition uniforme des particules dans tout le segment, nous utilisons l'algorithme suivant :

- 1. déterminer ℓ , espace laissé libre par les N particules dans le segment [0, L[;
- 2. placer aléatoirement dans le segment $[0, \ell[$, N particules virtuelles ponctuelles (R = 0); à cette étape, deux particules peuvent parfaitement occuper la même abscisse : il n'y a pas de conflit;
- 3. remplacer chaque particule virtuelle par une particule réelle de rayon R en la décalant ainsi que toutes les particules (réelles et virtuelles) situées plus à droite de façon à conserver l'espace entre les particules.

Par exemple si l'on veut placer 3 particules de rayon R=0.5 sur un segment de longueur 5, chaque particule occupe une longueur 1 et l'espace laissé libre vaut 2. L'algorithme se produira de la façon indiquée ci-dessous :



Q 10. Écrire la fonction d'entête

```
def placement1Drapide(N:int, R:float, L:float) -> [float]:
```

qui implante cet algorithme et renvoie la liste des coordonnées des centres de N particules de rayon R réparties aléatoirement le long d'un segment situé entre les abscisses 0 et L. On précise que l'ordre de la liste résultat n'est pas important.

Q 11. Quelle est la complexité de la fonction placement1Drapide? Commenter.

1.3 Dimension quelconque

L'algorithme optimisé pour un segment, n'est pas utilisable pour des espaces de dimensions supérieures. Nous allons donc généraliser la fonction placement 1D pour la transformer en une fonction utilisable dans un espace de dimension 1, 2 ou 3.

Q 12. En s'inspirant de la fonction placement 1D, écrire la fonction d'entête

```
def placement(D:int, N:int, R:float, L:float) -> [[float]]:
```

qui renvoie la liste des coordonnées des centres de N particules sphériques de rayon R placées aléatoirement dans un récipient de côté L dans un espace à D dimensions. Les modifications prévues aux questions 6 et 9 seront prises en compte dans cette fonction.

2 Mouvement des particules

On suppose que l'on dispose désormais d'une fonction d'entête

```
def situationInitiale(D:int, N:int, R:float, L:float) -> [[[float], [float]]]:
```

qui renvoie une liste de N particules de rayon R, représentées chacune par une liste à deux éléments (position et vitesse, cf. figure 1), placées aléatoirement à l'intérieur d'un récipient de taille L dans un espace à D dimensions. A partir de cette situation initiale, les positions et vitesses des particules vont évoluer au gré du déplacement des particules, des différents chocs entre elles et des rebonds sur les parois. On appelle événement chaque choc ou rebond.

2.1 Analyse physique

Q 13. Comment évolue une particule entre deux événements?

Plaçons-nous dans un **espace à une dimension** et considérons deux particules de masses m_1 et m_2 qui entrent en collision avec les vitesses initiales $\vec{v_1}$ et $\vec{v_2}$. Les vitesses $\vec{v_1}'$ et $\vec{v_2}'$ des deux particules après le choc sont données par

$$\begin{cases} \vec{v_1}' = \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \vec{v_1} + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \vec{v_2} \\ \vec{v_2}' = \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \vec{v_1} + \frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2} \vec{v_2} \end{cases}$$

- **Q 14.** Que deviennent ces formules lorsque $m_1 = m_2$? Commenter.
- **Q 15.** Que deviennent ces formules lorsque $m_1 \ll m_2$? A quelle situation ce cas correspond-t-il dans le problème qui nous préoccupe?

2.2 Evolution des particules

Q 16. Écrire la fonction d'entête

```
def vol(p:[[float], [float]], t:float) -> None:
```

qui met à jour l'état de la particule p (position et vitesse dans un espace de dimension quelconque) au bout d'un vol de t secondes sans choc ni rebond.

Q 17. Écrire la fonction d'entête

```
def rebond(p:[[float], [float]], d:int) -> None:
```

qui met à jour la vitesse de la particule p suite à un rebond sur une paroi perpendiculaire à la dimension d'indice d, c'està-dire l'axe des abscisses si d vaut 0, l'axe des ordonnées si d vaut 1 et l'axe des cotes si d vaut 2.

Par généralisation du résultat obtenu dans un espace à une dimension, on supposera que le rebond d'une particule sur une paroi ne modifie pas la composante de la vitesse parallèle à la paroi et change le signe de sa composante normale à la paroi (rebond parfait). La fonction rebond n'est pas chargée de vérifier que la particule se trouve au contact d'une paroi.

Q 18. On revient dans un **espace à une dimension**. Écrire la fonction d'entête

2017–2018 page 3/7

```
def choc(p1:[[float], [float]], p2:[[float], [float]]) -> None:
```

qui modifie les vitesses des deux particules, p1 et p2, suite au choc de l'une contre l'autre. La fonction choc n'est pas chargée de vérifier que les deux particules sont en contact.

3 Inventaire des événements

Chaque événement sera représenté par une liste de cinq éléments avec la signification suivante :

- 0. un booléen indiquant si l'événement est valide ou pas;
- 1. un flottant donnant le nombre de secondes, à partir de l'instant courant, au bout duquel l'événement aura lieu;
- 2. un entier compris entre 0 et N-1 donnant l'indice dans la liste des N particules de la première (ou seule) particule concernée par l'événement;
- 3. un entier compris entre 0 et N-1 donnant l'indice de la deuxième particule concernée par l'événement ou None s'il n'y a pas de deuxième particule concernée (l'événement est un rebond sur une paroi);
- 4. un entier compris entre 0 et D-1 donnant l'indice de la dimension perpendiculaire à la paroi concernée par l'événement ou None s'il n'y a pas de paroi concernée (l'événement est un choc entre deux particules).

On supposera, sans avoir besoin de le vérifier, qu'on a toujours une et une seule valeur None parmi les deux derniers éléments de tout événement.

Ainsi [True, 0.4, 34, 57, None] désigne le choc entre les particules d'indice 34 et 57 qui aura lieu dans 0,4 s. Et [True, 1.7, 34, None, 1] désigne le rebond de la particule d'indice 34 sur une paroi perpendiculaire à la dimension d'indice 1 (axe des ordonnées) qui aura lieu dans 1,7 s.

3.1 Prochains événements dans un espace à une dimension

Q 19. Écrire, pour un espace à une dimension, la fonction d'entête

```
def tr(p:[[float],[float]],R:float,L:float) -> None or (float,int):
```

qui détermine dans combien de temps la particule p, de rayon R, rencontrera une paroi du récipient de taille L, en faisant abstraction de toute autre particule qui pourrait se trouver sur son chemin. Cette fonction renvoie None si la particule ne rencontre jamais de paroi, sinon elle renvoie un couple dont le premier élément est la durée (en secondes) avant le rebond et le deuxième la direction de la paroi désignée par l'indice de sa dimension perpendiculaire.

Q 20. Toujours dans un espace à une dimension, écrire la fonction d'entête

```
def tc(p1:[[float],[float]], p2:[[float],[float]], R:float) -> None or float:
```

qui détermine si les deux particules p1 et p2, de rayon R, vont se rencontrer, en faisant abstraction de la présence des autres particules et des parois, autrement dit en considérant que ces deux particules sont seules dans un espace infini. Cette fonction renvoie None si les deux particules ne se rencontrent jamais, sinon elle renvoie le temps (en secondes) au bout duquel les particules entrent en collision.

On supposera dans la toute la suite que l'on dispose d'une version des fonctions tr et tc également opérationnelles dans un espace à deux et trois dimensions.

3.2 Catalogue d'événements

Afin d'alimenter l'algorithme de la partie suivante, on souhaite construire un catalogue des événements qui pourraient se produire prochainement. Ce catalogue sera représenté par une liste dans laquelle les événements, représentés par la liste de cinq éléments décrite au début de cette partie, sont ordonnés par date décroissante : le plus lointain en début de liste, le plus proche en fin de liste.

Q 21. Écrire la fonction d'entête

```
def ajoutEv(catalogue:[[bool, float, int, int or None, int or None]],
    e:[bool, float, int, int or None, int or None]) -> None:
```

qui ajoute au bon endroit dans la liste catalogue l'événement e. La liste catalogue contient des événements ordonnés par temps décroissant.

Q 22. Écrire la fonction d'entête

2017–2018 page 4/7

qui ajoute, dans la liste ordonnée d'événements catalogue, les prochains événements potentiels concernant la particule d'indice i de la liste particules qui contient toutes les particules présentes dans le récipient. Le paramètre R donne le rayon d'une particule et L la taille du récipient. Les événements à prendre en compte sont le prochain rebond contre une paroi et le prochain choc avec chacune des autres particules (cf 3.1). Les prochains événements seront supposés valides et la fonction veillera à maintenir ordonnée la liste catalogue.

Q 23. Écrire la fonction d'entête

qui utilise la fonction ajout1p et qui renvoie la liste, ordonnée par temps décroissant, des prochains événements potentiels concernant une liste de particules particules de rayon R dans un récipient de taille L.

- Q 24. Expliquer pourquoi la liste renvoyée par la fonction initCat contient certains éléments qui correspondent en fait au même événement.
- **Q 25.** Pour optimiser la fonction initCat, il faut en priorité optimiser la fonction ajoutEv. Quel algorithme classique pourraiton utiliser pour insérer un élément à sa place dans une liste triée?

4 Simulation

Nous disposons désormais des éléments de base pour simuler l'évolution d'un ensemble de particules identiques enfermées dans un récipient. En partant d'une situation initiale, nous pouvons déterminer les prochains événements possibles, le plus proche de ces événements va forcément avoir lieu. Nous pouvons alors établir un nouvel état de l'ensemble des particules juste après cet événement, puis déterminer une nouvelle liste des prochains événements possibles à partir de cette nouvelle situation. En répétant ce traitement, il est théoriquement possible de déterminer la position et la vitesse de chacune des particules à un instant quelconque dans le futur.

Q 26. Montrer que la liste des prochains événements possibles ne peut jamais être vide, sauf si toutes les particules sont initialement à l'arrêt

Dans toute la suite, nous considèrerons qu'au moins une particule est en mouvement.

Q 27. Écrire la fonction d'entête

```
def etape(particules:[[[float], [float]]],
        e:[bool, float, int, int or None, int or None]) -> None:
```

qui, partant d'une liste de particules particules représentant la situation à l'instant courant, modifie l'état de chaque particule pour refléter la situation des particules juste après l'événement e (supposé valide), en supposant qu'aucun autre événement n'arrive avant celui-ci.

Disposant de la fonction etape, il suffirait de la combiner avec la fonction initCat pour implanter l'algorithme de simulation décrit plus haut. Cependant, étant donné la complexité de initCat, il semble intéressant d'optimiser cette phase de l'algorithme. Pour cela, remarquons que les événements qui ne concernent par les particules impliquées dans l'événement traité par la fonction etape restent valides, à un décalage temporel près. Les seuls nouveaux prochains événements possibles concernent les particules impliquées dans l'événement traité.

Q 28. Écrire la fonction d'entête

```
def majCat(catalogue:[[bool, float, int, int or None, int or None]],
    particules:[[[float], [float]]],
    e:[bool, float, int, int or None, int or None], R:float, L:float) -> None:
```

qui met à jour son paramètre catalogue, liste ordonnée des prochains événements potentiels, en supposant que particules représente la situation juste après l'événement e, supposé valide et déjà retiré de catalogue. Les paramètres R et L désignent respectivement le rayon d'une particule et la taille du récipient. Afin de limiter les manipulations de listes, les événements qui n'ont plus cours seront conservés dans le catalogue et simplement marqués non valides.

On dispose de la fonction d'entête

qui enregistre dans la base de données bdd des informations à propos de l'événement e survenu au temps t de la simulation. Le temps de la simulation est exprimé en secondes, le début de la simulation étant pris comme origine. Le paramètre particules donne la situation (position, vitesse) des particules au temps t considéré, juste après la survenue de l'événement e.

Q 29. Écrire la fonction d'entête

2017–2018 page 5/7

```
def simulation(bdd, D:int, N:int, R:float, L:float, T:float) -> int:
```

qui simule l'évolution de N particules identiques de rayon R dans un récipient de côté L dans un espace à D dimensions pendant la durée T (exprimée en secondes). Cette fonction utilise une situation initiale générée aléatoirement par l'intermédiaire de la fonction situationInitiale (partie 2) et renvoie le nombre d'événements ayant eu lieu pendant toute la simulation. D'autre part, elle enregistre chaque événement dans la base de données bdd.

Q 30. Comment sont gérés les doublons repérés à la question 24?

5 Explotation des résultats

On dispose d'une version plus générale de la fonction simulation pour laquelle toutes les particules ne sont plus nécessairement identiques. Cette fonction enregistre ses résultats dans une base de données dont la structure est donnée figure 4.

SIMULATION	
SI_NUM	integer
SI_DEB	datetime
SI_DUR	float
SI_DIM	integer
SI_N	integer
SI_L	float

REBOND	
SI_NUM	integer
RE_NUM	integer
PA_NUM	integer
RE_T	float
RE_DIR	integer
RE_VIT	float
RE_VP	float

PARTICULE	
integer	
varchar(100)	
float	
float	

Figure 4 Structure physique de la base de données des résultats de simulation

Cette base comporte les trois tables suivantes :

- la table SIMULATION donne les caractéristiques de chaque simulation effectuée. Elle contient les colonnes
 - SI_NUM numéro d'ordre de la simulation (clef primaire)
 - SI_DEB date et heure du lancement du programme de simulation
 - SI_DUR durée (en secondes) de la simulation (il ne s'agit pas du temps d'exécution du programme, mais du temps simulé)
 - SI_DIM nombre de dimensions de l'espace de simulation
 - SI_N nombre de particules pour cette simulation
 - SI_L (en mètres) taille du récipient utilisé pour la simulation
- la table PARTICULE des types de particules considérées. Elle contient les colonnes
 - PA_NUM numéro (entier) identifiant le type de particule (clef primaire)
 - PA_NOM nom de ce type de particule
 - PA_M masse de la particule (en grammes)
 - PA_R rayon (en mètres) de la particule
- la table REBOND, de clef primaire (SI_NUM, RE_NUM), liste les chocs des particules avec les parois du récipient. Elle contient les colonnes
 - SI_NUM numéro d'ordre de la simulation ayant généré ce rebond
 - RE NUM numéro d'ordre du rebond au sein de cette simulation
 - PA_NUM numéro du type de particule concernée par ce rebond
 - RE_T temps de simulation (en secondes) auquel ce rebond est arrivé
 - donnant la direction de la normale à la paroi. Ainsi -2 désigne la paroi située en y=0 alors que 1 désigne la paroi située en x=L
 - RE_VIT norme de la vitesse de la particule qui rebondit (en m/s)
 - RE_VP valeur absolue de la composante de la vitesse normale à la paroi (en m/s)
- Q 31. Écrire une requête SQL qui donne les simulations dont la durée est supérieure à 10 s;
- **Q 32.** Écrire une requête SQL qui donne le nombre de simulations effectuées pour chaque nombre de dimensions de l'espace de simulation.
- **Q 33.** Écrire une requête SQL qui donne, pour chaque simulation, le nombre de rebonds enregistrés et la vitesse moyenne des particules qui frappent une paroi.
- Q 34. Écrire une requête SQL qui, pour une simulation n donnée, calcule, pour chaque paroi, la variation de quantité de mouvement due aux chocs des particules sur cette paroi tout au long de la simulation. On se rappellera que lors du rebond d'une particule sur une paroi la composante de sa vitesse normale à la paroi est inversée, ce qui correspond à une variation de quantité de mouvement de $2m|v_{\perp}|$ où m désigne la masse de la particule et v_{\perp} la composante de sa vitesse normale à la paroi.

2017–2018 page 6/7

Opérations et fonctions Python disponibles

Fonctions

- range(n) renvoie la séquence des n premiers entiers $(0 \rightarrow n-1)$
- list(range(n)) renvoie une liste contenant les n premiers entiers dans l'ordre croissant : list(range(5)) \rightarrow [0, 1, 2, 3, 4]
- random.random() renvoie un nombre flottant tiré aléatoirement dans [0, 1] suivant une distribution uniforme
- random.randrange (a, b) renvoie un entier aléatoire compris entre a et b−1 inclus (a et b entiers)
- random.sample(u, n) renvoie une liste de n éléments distincts de la liste u choisis aléatoirement, si n > len(u), déclenche l'exception ValueError
- math.sqrt(x) calcule la racine carrée du nombre x
- math.ceil(x) renvoie le plus petit entier supérieur ou égal à x
- math.floor(x) renvoie le plus grand entier inférieur ou égal à x
- sorted(u) renvoie une nouvelle liste contenant les éléments de la liste u triés dans l'ordre "naturele de ses éléments (si les éléments de u sont des listes ou des tuples, l'ordre utilisé est l'ordre lexicographique)

Opérations sur les listes

- len(u) donne le nombre d'éléments de la liste u:len([1, 2, 3]) \rightarrow 3;len([[1,2], [3,4]]) \rightarrow 2
- u + v construit une liste constituée de la concaténation des listes u et v : [1, 2] + [3, 4, 5] \rightarrow [1,2,3,4,5]
- n * u construit une liste constituée de la liste u concaténée n fois avec elle-même : 3 * [1, 2] \rightarrow [1,2,1,2,1,2]
- e in u et e not in u déterminent si l'objet e figure dans la liste u 2 in [1, 2, 3] \rightarrow True; 2 not in [1, 2, 3] \rightarrow False
- u.append(e) ajoute l'élément e à la fin de la liste u (similaire à u = u + [e])
- u.pop() renvoie le dernier élément de la liste u (u[-1]) et le supprime (del u[-1])
- del u[i:j] supprime de la liste u tous ses éléments dont les indices sont compris dans l'intervalle [i, j[
- del u[i] supprime de la liste u son élément d'indice i
- u.remove(e) supprime de la liste u le premier élément qui a pour valeur e, déclenche l'exception ValueError si e ne figure pas dans u
- u.insert(i, e) insère l'élément e à la position d'indice i dans la liste u (en décalant les éléments suivants);
 si i >= len(u), e est ajouté en fin de liste
- u[i], u[j] = u[j], u[i] permute les éléments d'indice i et j dans la liste u
- u.sort() trie la liste u en place, dans l'ordre "naturel" de ses éléments (si les éléments de u sont des listes ou des tuples, l'ordre utilisé est l'ordre lexicographique)

2017–2018 page 7/7