

DM N°6

Restitution le lundi 19 Avril 2010

Chocs entre molécules – étude d'un modèle de gaz parfait

Ce DM prépare aux colles d'informatique qui auront lieu bientôt.

En informatique on est obligé de discrétiser les problèmes, par exemple résoudre des équations aux différences finies à la place d'équations différentielles.

Aussi, pour éviter toute confusion par la suite, on distinguera l'intervalle de temps infinitésimal dt employé, par exemple, pour écrire des dérivées ($v_x = \frac{dx}{dt}$); et un intervalle de temps petit mais fini δt pouvant être employé en informatique.

Pour simplifier, on s'intéressera à des mouvements à une dimension, le long d'un axe Ox dans un référentiel supposé galiléen, en l'absence de champ de pesanteur.

Gaz constitué d'une seule molécule

Un « gaz » constitué d'une seule molécule ponctuelle de masse m , position et vitesse $(x(t), v(t))$ est enfermé dans un « récipient » constitué de deux parois situées en $x=0$ et $x=L>0$.

Lorsque la particule rencontre une paroi, sa vitesse change instantanément de signe et elle repart d'où elle vient.

- 1 La molécule arrive sur la paroi d'abscisse L avec une vitesse v_0 , on suppose que le choc est élastique, c'est à dire que l'énergie cinétique de la molécule est conservée. Quelle est la vitesse de la molécule après le choc ?

2 Calcul discret de position et vitesse

- 2.1 La molécule évolue la plupart du temps, durant δt , selon les lois $\left(\begin{array}{l} v(t+\delta t) = v(t) \\ x(t+\delta t) = x(t) + v\delta t \end{array} \right)$. Cela n'est valable que en l'absence de choc, c'est à dire si x n'est pas trop proche de 0 ou L : préciser les limites en fonction notamment de v et δt).

- 2.2 Déterminer les lois d'évolution de $x(t)$ et $v(t)$ durant δt lorsqu'il y a un choc soit avec la paroi $x=0$, soit avec la paroi $x=L$.

- 3 Montrer qu'au bout d'une durée T à préciser en fonction notamment de $|v|$, la molécule revient au même endroit avec la même vitesse.

- 4 La période T du mouvement dépend-elle de son « amplitude » (vitesse) ? Quel est le point commun et la différence entre ce système et un pendule (masse accrochée au bout d'un fil dans un champ de pesanteur) ?
- 5 Tracer le portrait de phase du système.

6 « Thermodynamique »

- 6.1 Quelle est, en moyenne, la quantité de mouvement par unité de temps reçue par la paroi située en $x=L$ de la part de la molécule ? On assimilera cette quantité à la force de pression $F = F e_x$ exercée par la molécule sur la paroi. *On pourra considérer le nombre de chocs par unité de temps, et la quantité de mouvement échangée avec la paroi lors de chaque choc.*
- 6.2 On fait varier tout doucement la longueur L du « récipient », la paroi se déplace avec une vitesse $V = \frac{dL}{dt}$ faible. Montrer que $|v|$ n'est pas conservée lorsque la molécule rebondit sur la paroi. *On pourra se placer dans le référentiel lié à la paroi, y examiner le choc, et revenir dans le référentiel d'étude.*
- 6.3 Déterminer la variation d'énergie cinétique dE_c de la molécule pendant dt et comparer cette quantité à $\delta W = -F dL = -FV dt$. Pourquoi nommer « adiabatique » une telle transformation ?

Gaz constitué de deux molécules

Dans le même « récipient » sont enfermées deux molécules M_1, M_2 de masses m_1, m_2 et vitesses, positions $(x_1, v_1), (x_2, v_2)$.

1 Étude des chocs entre molécules

- 1.1 Lors d'un choc entre deux particules, expliquer pourquoi $(m_1 v_1 + m_2 v_2)_{\text{avant}} = (m_1 v_1 + m_2 v_2)_{\text{après}}$.
- 1.2 Le choc est supposé élastique : l'énergie cinétique est conservée. Dans le référentiel barycentrique, montrer que cela n'est possible que si les vitesses changent de signe.
- 1.3 En déduire les lois donnant les vitesses après choc v_1', v_2' en fonction des masses et des vitesses avant choc v_1, v_2 .
- 1.4 Vérifier les relations précédentes en examinant le cas limite où $v_2=0$ et $m_2 \rightarrow \infty$ (seconde molécule assimilable à une paroi immobile).
- 1.5 Que remarque-t-on si $m_1 = m_2$?

2 « Équilibre thermodynamique »

- 2.1 On suppose que au début du mouvement ($t=0$), $x_2 > x_1$. Dessiner qualitativement le graphe représentant les différentes positions (x_1, x_2) lorsque le système évolue au cours du temps, pendant une très longue durée. Que peut-on dire de la partie en-dessous de la droite $x_2 = x_1$? Que peut-on dire de la partie au-dessus de la droite $x_2 = x_1$?
- 2.2 Dessiner le graphe représentant (E_{c1}, E_{c2}) , c'est à dire $(\frac{1}{2} m_1 v_1^2, \frac{1}{2} m_2 v_2^2)$, lorsque le système évolue au cours du temps, pendant une très longue durée. *On pourra employer la conservation de l'énergie cinétique totale.*
- 2.3 En supposant que les points soient uniformément répartis sur la courbe correspondante, que peut-on dire, à priori, des valeurs moyennes $\langle E_{c1} \rangle$ et $\langle E_{c2} \rangle$? Comment se nomme, en thermodynamique, cette propriété ?
- 2.4 Dessiner le graphe représentant (v_1, v_2) lorsque le système évolue au cours du temps, pendant une très longue durée. Expliquer pourquoi ce modèle de « gaz parfait » est limité et ne permet pas, notamment, de retrouver la statistique de Boltzmann.

Mode d'emploi des programmes contenus dans le dossier compressé Bong.zip et qui serviront pour la colle.

Il est possible, sinon vivement conseillé, de faire tourner ces programmes afin de disposer d'exemples et de s'aider pour le DM...

Ces programmes fonctionnent dans une invite de commande (« shell »), à partir des masses, vitesses et positions initiales, ils déterminent l'évolution d'un système pendant une durée donnée, avec un pas de calcul donné. Le résultat disponible en sortie du programme consiste en l'égrenage de la date, positions et vitesses. Le rediriger vers un fichier avec une extension .csv permet de l'ouvrir avec un tableur et, par exemple, de tracer des graphes.

Bong_1 permet de faire évoluer un système de une molécule, et Bong_2 un système constitué de deux molécules.

On saisira (la masse n'intervient pas) :

Bong_1 <dt> <L> <x(0)> <v(0)> <T>

Exemple pour faire évoluer le système durant 100 unités de temps avec un pas de 0.05 unités de

temps, une longueur de une unité, une position initiale de 0.2 unités et une vitesse initiale de 0.3 unités:

```
Bong_1 0.05 1.0 0.2 0.3 100
```

Si l'on veut rediriger les résultats dans un fichier Res.csv ouvrable ensuite avec un tableur (Excel, OpenOffice), on saisira :

```
Bong_1 0.05 1.0 0.2 0.3 100 > Res.csv
```

Chaque ligne de la sortie de Bong_1 comporte le temps puis la position, puis la vitesse.

Pour Bong_2.exe, on saisira :

```
Bong_2 <dt> <L> <x1(0)> <v1(0)> <m1> <x2(0)> <v2(0)> <m2> <T>
```

Là, les masses interviennent. La ligne de sortie comporte le temps, puis x_1 puis v_1 puis x_2 puis enfin v_2 .

Le dossier zippé contient les exécutables compilés sous Windows XP, ainsi que les code-sources pour pouvoir compiler sous un autre système si vous avez Macintosh ou Linux. Dans ce cas, il faut se placer dans le répertoire contenant Gaz.h, Gaz.c, Bong_1.c, Bong_2.c, et saisir :

```
gcc -o Bong_1 Bong_1.c Gaz.c  
gcc -o Bong_2 Bong_2.c Gaz.c
```

Cela suppose de disposer d'un compilateur gcc - contacter le professeur de physique en cas de soucis ou pour en savoir plus.

Le dossier zippé contient en outre deux fichiers de résultats, utilisables par qui n'aurait pas pu faire tourner « Bong » : Res_2.csv et Res_1.csv

```
Res_2.csv a été obtenu en saisissant Bong_2 0.05 1.0 0.2 0.3 1.0 0.5 0.1 2.0 400.0 > Res_2.csv  
Res_1.csv a été obtenu en saisissant Bong_1 0.05 1.0 0.2 0.1 100 > Res_1.csv
```