Université Paris Diderot
Physique L2
2014-2015

Projet : Gaz dans un champ gravitationnel [1]

Objectifs : Étudier la variation de la pression avec l'altitude dans l'atmosphère terrestre par simulation de la dynamique des molécules d'un gaz parfait.

Introduction

En 1686 l'astronome anglais Edmund Halley détermina pour la première fois que la pression de l'atmosphère terrestre décroit exponentiellement avec l'altitude z selon la loi

$$p(z) = p_0 \exp\left(-\frac{z}{H}\right) , \tag{1}$$

où p_0 est la pression au sol ($z = 0$) et la constante H, dans l'hypothèse où la température ne dépend pas de l'altitude, est donnée par

$$H = \frac{k_B T}{mg} , \tag{2}$$

avec $k_B = 1.38 \times 10^{-23}\,\mathrm{JK}^{-1}$ la constante de Boltzmann, T la température absolue, m la masse des molécules qui composent l'atmosphère et g l'accélération de gravité. Dans ce projet, on se propose de simuler le comportement d'un gaz idéal sous l'influence du champ de pesanteur et de retrouver numériquement la formule barométrique.

Théorie

La formule barométrique (1)–(2) peut être dérivée élémentairement de la façon suivante. L'équation d'état d'un gaz parfait à l'équilibre thermodynamique est

$$pV = Nk_B T , \tag{3}$$

où N est le nombre de molécules, qui occupent le volume V. En introduisant la masse volumique $\rho = Nm/V$ du gaz, on peut réécrire l'équation (3) sous la forme

$$\rho = p\frac{m}{k_B T} . \tag{4}$$

Or, en conditions statiques, la pression $p(z)$ n'est rien d'autre que le poids, par unité de surface, de la colonne d'air au dessus de la hauteur z :

$$p(z) = g \int_z^\infty \rho(z)\, dz . \tag{5}$$

En dérivant cette relation par rapport à z et en utilisant la relation (4), on obtient alors l'équation différentielle

$$\frac{dp}{dz} = -\frac{mg}{k_B T}\, p(z) , \tag{6}$$

dont la solution, pour $T = \mathrm{cte}$, est la formule barométrique cherchée

$$p(z) = p(0) \exp\left(-\frac{mgz}{k_B T}\right) . \tag{7}$$

1. Référent : paolo.galatola@univ-paris-diderot.fr

Modèle

Ce projet à pour but de simuler la dynamique de N molécules identiques, soumises à la pesanteur et interagissant entre elles et avec le sol $z = 0$ par des collisions élastiques, afin de retrouver la formule barométrique.
Par simplicité, nous allons utiliser une approximation unidimensionnelle, de telle façon que la position de chaque molécule $i = 1, 2, \dots N$, schématisée comme un point matériel de masse m, est donnée simplement par sa hauteur z au dessus du sol. Toutefois, pour garantir l'*ergodicité*[2] du système, nous allons considérer que la vitesse de chaque molécule est un vecteur à trois dimensions : on peut imaginer que cette condition équivaut à supposer que le système est spatialement trois dimensionnel, mais avec des coordonnées transversales x et y périodiques[3], la périodicité étant infiniment petite.

– Pendant deux collisions, les particules sont en chute libre sous l'action de la gravité. L'équation de mouvement de chaque molécule i est donc

$$z_i(t) = z_i(0) + v_{iz}(0)t - \frac{1}{2}gt^2 \,, \tag{8}$$
$$v_{iz}(t) = v_{iz}(0) - gt \,, \tag{9}$$
$$v_{ix}(t) = v_{ix}(0) \,, \tag{10}$$
$$v_{iy}(t) = v_{iy}(0) \,, \tag{11}$$

où le temps t est mesuré à partir de l'instant $t = 0$ de la dernière collision entre deux particules où une particule et le sol.

– Deux particules i et j se heurtent à l'instant t_0 quand leurs coordonnées z sont égales :

$$z_i(t_0) = z_j(t_0) \,. \tag{12}$$

– On appelle $\boldsymbol{v}_i$ et $\boldsymbol{v}_j$ les vitesses des deux particules avant le choc et $\boldsymbol{v}'_i$ et $\boldsymbol{v}'_j$ après le choc. Nous représentons la collision dans le centre de masse du système, qui se déplace à la vitesse

$$\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{v}_i + \boldsymbol{v}_j}{2} \,. \tag{13}$$

Les vitesses des deux particules relatives au centre de masse avant le choc sont alors

$$\boldsymbol{u}_i = \boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j}{2} \,, \tag{14}$$
$$\boldsymbol{u}_j = \boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_i}{2} = -\boldsymbol{u}_i \,. \tag{15}$$

Le choc étant supposé élastique, l'énergie et la quantité de mouvement doivent être conservés. Dans le repère du centre de masse, qui n'est pas affecté par le choc

$$\boldsymbol{v}' = \boldsymbol{v} \,, \tag{16}$$

ces conditions s'expriment simplement comme $|\boldsymbol{u}'_i| = |\boldsymbol{u}_i|$, $\boldsymbol{u}'_j = -\boldsymbol{u}'_i$. Elles ne sont pas suffisantes pour déterminer complètement les vitesses après le choc : en effet, dans notre modèle unidimensionnel, nous avons perdu l'information sur le décalage latéral entre les deux particules. Pour déterminer les conditions manquantes, nous allons représenter la vitesse $\boldsymbol{u}'_i$ après le choc en coordonnées sphériques autour de l'axe z

$$u'_{ix} = u_i \sin\theta' \cos\phi' \,, \tag{17}$$
$$u'_{iy} = u_i \sin\theta' \sin\phi' \,, \tag{18}$$
$$u'_{iz} = u_i \cos\theta' \,, \tag{19}$$

2. Essentiellement, que l'état d'équilibre du système ne dépende pas des conditions initiales, comme observé expérimentalement.
3. Ce qui revient à supposer que la taille transversale du système est finie.

avec $u_i = |\boldsymbol{u}_i|$, $\theta' \in [0, \pi]$, $\phi' \in [0, 2\pi]$. Le problème est donc de déterminer les angles θ' et ϕ' après le choc. Puisque le système est invariant par rotation autour de z, tous les angles ϕ' sont équiprobables. Nous allons donc prendre pour ϕ'

$$\phi' = \text{nombre aléatoire distribué uniformément dans l'intervalle } [0, 2\pi]\,. \tag{20}$$

Pour choisir l'angle θ', nous observons que, afin que deux particules se choquent, il faut que la composante w_z de leur vitesse relative soit non nulle : le nombre moyen de chocs par unité de temps ν que subit une particule à la hauteur z est égal à la somme des flux des particules qui vont vers le haut et vers le bas

$$\begin{aligned}\nu &= \int_{-\infty}^{\infty} dw_x \int_{-\infty}^{\infty} dw_y \int_{-\infty}^{\infty} dw_z f_z(w)|w_z| = \int f_z(w)|w_z| w^2 dw \sin\theta d\theta d\phi \\ &= 4\pi \int_0^{\infty} f_z(w) w^3 dw \int_0^{\pi/2} \cos\theta \sin\theta \, d\theta\,,\end{aligned}$$

où $f_z(w) dw_x dw_y dw_z dz$ est le nombre de particules, comprises entre z et $z + dz$, qui ont une vitesse relative comprise entre $\boldsymbol{w}$ et $\boldsymbol{w} + d\boldsymbol{w}$ [4]. Le nombre moyen de chocs $d\nu$ par unité de temps avec orientation θ de la vitesse relative dans l'intervalle $[\theta, \theta + d\theta]$ vaut alors, pour $\theta \in [0, \pi/2]$,

$$d\nu = 4\pi \int_0^{\infty} f_z(u)|u_z| u^3 \, du \times \cos\theta \sin\theta \, d\theta = \text{cte} \times \cos\theta \sin\theta \, d\theta\,.$$

La probabilité $dP = P(\theta) d\theta$ d'observer un choc avec un angle $\theta \in [0, \pi/2]$ par rapport à l'axe z de la vitesse relative dans l'intervalle $[\theta, \theta + d\theta]$ est proportionnelle à $d\nu$

$$dP = P(\theta) d\theta \propto \cos\theta \sin\theta \, d\theta\,.$$

Avec la condition de normalisation [5].

$$\int_0^{\pi/2} P(\theta) d\theta = 1\,,$$

on obtient alors

$$P(\theta) = 2 \sin\theta \cos\theta = \sin(2\theta)\,. \tag{21}$$

Pour deux particules i et j les vitesses relatives à leur centre de masse sont égales à la moitié des vitesses de l'une relative à l'autre : l'orientation θ dans l'équation (21) coïncide avec l'orientation de $\boldsymbol{u}_i$ (ou $\boldsymbol{u_j}$, selon laquelle des deux a composante z positive) avant le choc. À l'équilibre, après un choc, la distribution des angles θ' doit évidemment satisfaire à la même condition (21). Nous allons donc choisir pour θ' un nombre aléatoire compris dans l'intervalle $[0, \pi/2]$ avec densité de probabilité $P(\theta') = \sin(2\theta')$. Pour cela, nous allons nous servir d'une variable aléatoire $a \in [0, 1]$ uniformément distribuée, $P(a) = 1$, et nous allons chercher une fonction $\theta' = \theta'(a)$ telle que $P(\theta') = \sin(2\theta')$. Pour la conservation des probabilités, nous avons

$$P(\theta')|d\theta'| = P(a) da = da \Rightarrow \left| \frac{da}{d\theta} \right| = \sin(2\theta)\,.$$

La solution de cette équation, avec la condition que $a \in [0, 1]$ pour $\theta \in [0, \pi/2]$ est $a = \cos^2\theta'$, soit

$$\theta' = \arccos\sqrt{a} \qquad a \text{ nombre aléatoire distribué uniformément dans l'intervalle } [0, 1]\,. \tag{22}$$

4. Pour l'isotropie du système f_z dépend seulement du module w de la vitesse relative.
5. Des deux vitesses relatives, opposées, de deux particules, on peut toujours choisir celle dont la composante z est positive : on peut alors supposer que $\theta \in [0, \pi/2]$.

Simulation

Nous avons maintenant tous les éléments pour effectuer notre simulation, qui procède de la façon suivante.

1. On initialise les vitesses $\boldsymbol{v}_i(0)$ et les positions $z_i(0)$ des N particules. On ordonne les particules selon leur hauteur, de telle façon que $z_1(0) < z_2(0) < \ldots < z_N(0)$.

2. On détermine pour chaque paire de particules voisines i et $i-1$ le temps t_i de leur prochaine collision. Selon les équations (8) et (12),

$$t_i = \frac{z_i(0) - z_{i-1}(0)}{v_{i-1,z}(0) - v_{i,z}(0)} \,. \tag{23}$$

La particule 1 est spéciale, car son voisinage est en réalité le sol $z = 0$. Cette particule touche le sol au temps

$$t_1 = \frac{v_{1z}(0) + \sqrt{v_{1z}^2(0) + 2gz_1(0)}}{g} \,. \tag{24}$$

3. On détermine le temps le plus court $t_{\min}$ parmi les $t_i > 0$ et on sauve l'indice i.

4. On met à jours les coordonnées et les vitesses de *toutes les particules* au temps $t_{\min}$, selon les relations (8)–(11).

5. On effectue la collision entre les particules i et $i-1$ selon les relations (13)–(20) et (22). On veillera à attribuer l'angle (22) à la particule i (vitesse relative dirigée vers le haut), de façon à garder l'ordonnancement des particules. Si $i = 1$, c'est la particule 1 qui a touché le sol : on changera alors simplement le signe de la composante z de la vitesse ($v_{1z} \to -v_{1z}$).

6. On répète les étapes (2)–(5).

Analyse des données

- Distribuer un nombre suffisamment grand ($N \simeq 50$) de particules uniformément entre le sol et une hauteur donnée h. On pourra choisir des vitesses initiales nulles.
- Faire évoluer le système suffisamment longtemps pour atteindre un état d'équilibre (pour 50 particules, de l'ordre de 5×10^4 collisions).
- Tracer le profil de densité $n(z)/n(0)$ en moyennant le nombre de particules qui se trouvent dans une tranche de hauteur Δz centrée autour de la hauteur z. toutes les $M \simeq N$ collisions pendant un temps suffisamment long (pour 50 particules, de l'ordre de 10^7 collisions).
- Vérifier le nombre de collision nécessaire afin que le système atteigne l'état d'équilibre.
- Vérifier la formule barométrique (7)–(4) et en déduire les valeurs de H et k_BT/m [cf. Éqs. (1) et (2)]. On pourra aussi déterminer la pression p selon la relation (5).
- Un calcul statistique montre que l'énergie totale E (cinétique plus potentielle) du système est reliée à la température par la relation $E = \frac{5}{2}Nk_BT$. Vérifier numériquement cette relation.
- Tracer les histogrammes qui donnent les probabilités que une particule donnée se trouve à une hauteur donnée z (dans une tranche de hauteur Δz). Vérifier en particulier ce qui se passe pour les particules près du sol et plus en haut.