

# TP (simulation) de thermodynamique

## "équation d'état d'un systèmes de sphères dures"

Source : [TP de thermodynamique](#) Vincent Démery, ESPCI, exercice 1 : Équation d'état

Il s'agit de simulations de sphères dures (3D) montrant la transition gaz-cristal quand la fraction volumique  $\phi$  augmente. On la voit à partir de l'évolution de la pression avec  $\phi$ . Le code est déjà écrit par un spécialiste de ce genre de simulations (Michael Schindler de l'ESPCI). Il n'y a donc qu'à le faire tourner. Les étudiants peuvent alors utiliser python pour récupérer les données générées et calculer les pressions. On peut alors comparer le résultat avec l'équation d'état du viriel (cf. les calculs des coefficients B2 et B3 vus au cours).

Extension : utiliser LAMMPS pour faire des simulations comparables

Références additionnelles :

- [Statistical Mechanics: Algorithms and Computations](#) Werner Krauth, Series : Oxford Master Series in Physics, 13. ISBN-13: 9780198515364

From:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:

[https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:vdemery\\_espci](https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:vdemery_espci)

Last update: **2018/01/28 12:32**

