

# 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

From:

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



Permanent link:

[https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:vdemery\\_espci?rev=1505355325](https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:vdemery_espci?rev=1505355325)

Last update: **2017/09/14 04:15**