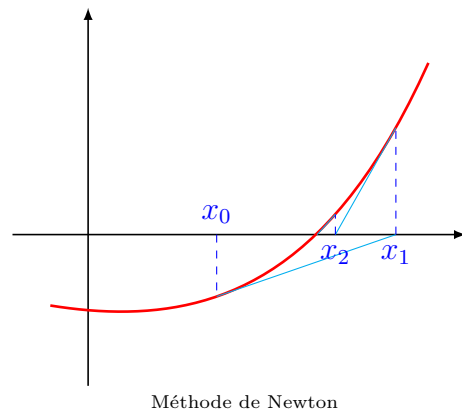
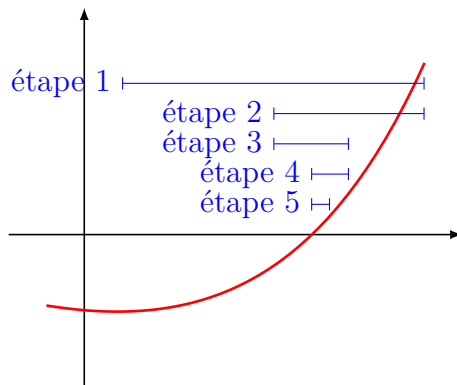


Modèle du gaz de Van der Waals

Ce TD un peu théorique est l'occasion de mettre en œuvre les méthodes de résolution d'une équation à une inconnue. Supposons qu'on veuille résoudre une équation d'inconnue x ; en passant tous les termes du même côté, on peut écrire cette équation sous la forme $f(x) = 0$. Résoudre l'équation revient donc à trouver les racines de la fonction f (c'est-à-dire les valeurs qui annulent la fonction).

Il existe plusieurs méthodes numériques ; les principales sont :

- la **méthode de dichotomie** est la meilleure, elle nécessite d'avoir repéré un intervalle $[g; d]$ dans lequel on est sûr que la fonction f a *une racine et une seule* ; autrement dit, f change une seule fois de signe sur cet intervalle. On va alors découper cet intervalle en deux : on calcule $m = \frac{g+d}{2}$ et on calcule $f(m)$; s'il est de signe opposé à $f(g)$ alors la racine est située dans $[g; m]$, sinon elle est dans $[m; d]$. En répétant cette action, on divise l'intervalle et on repère rapidement un encadrement précis de la racine.
- la **méthode de Newton** est encore plus rapide, mais ne converge pas toujours et nécessite de connaître la dérivée de f . Cette fois, on n'impose pas d'intervalle de recherche, mais on dispose d'une valeur initiale x_0 située pas trop loin de la racine. Alors on trace la tangente à la courbe de f en x_0 , et on note x_1 le point où elle coupe l'axe des abscisses, puis on recommence. On crée ainsi une suite récurrente $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ qui converge vers la racine...ou pas.



La première méthode, que vous devez savoir implémenter, est sûre, mais ne marche que pour les équations à une inconnue ; la seconde, moins sûre, se généralise à des systèmes de plusieurs équations à plusieurs inconnues.

Dans ce TD, on va s'intéresser à un gaz réel modélisé par les équations de Van der Waals :

$$\left(P + a \frac{n^2}{V^2}\right) (V - nb) = nRT \quad (1a)$$

$$U(T, V) = \frac{5}{2}nRT - a \frac{n^2}{V} \quad (1b)$$

avec a et b des constantes caractéristiques du gaz. Pour modéliser l'air, les valeurs données dans les tables sont $a = 135,8 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{m}^6 \cdot \text{mol}^{-2}$ et $b = 36,4 \times 10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$. On rappelle que $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$.

1. Créez une fonction `pressionGP(n,T,V)` qui renvoie la pression d'un gaz parfait (en Pascal) en fonction de n , V et T .

Créez une fonction `pressionGVdW(n,T,V)` qui renvoie la pression du gaz de Van der Waals (en Pascal) en fonction de n , V et T .

Tracez alors les courbes $P(V)$ pour les deux modèles, pour 1 mol à la température $T = 300$ K, le volume variant entre 1 L et 50 L. Les deux modèles sont-ils proches pour des pressions de quelques bars ?

2. Tracez maintenant la même courbe entre 0,05 L et 1 L. Commentez.
3. Tracez la courbe $P(V)$ entre 0,05 L et 1 L pour $T = 100$ K. Commentez.
4. Créez une fonction `volumeGP(n,P,T)` qui renvoie le volume d'un gaz parfait (en m^3) en fonction de n , P et T .

Est-ce facile de créer la même fonction pour un gaz de Van der Waals ?

5. On va créer la fonction `volumeGVdW(n,P,T)` renvoyant le volume du gaz de Van der Waals en fonction de n , P et T . Pour cela, dans cette fonction, on va procéder en plusieurs étapes :
 - définissez une fonction `f(V)` qui renvoie la différence entre les deux termes de l'équation (1a)
 - stockez dans une variable V_{GP} le volume du gaz dans le modèle du gaz parfait
 - initialisez g à $\frac{1}{10}V_{GP}$ et d à $10 * V_{GP}$; on admettra que la racine recherchée se trouve dans cet intervalle dans les cas qui nous intéressent
 - choisissez une précision de recherche du volume, par exemple $\varepsilon = 1 \times 10^{-5}V_{GP}$
 - lancez la boucle de dichotomie :

```

tant que  $d - g > \varepsilon$  faire
  |  $m \leftarrow \frac{g+d}{2}$ 
  | si  $f(m) \times f(g) < 0$  alors
  | |  $d \leftarrow m$ 
  | sinon
  | |  $g \leftarrow m$ 
  | fin si
fin tq

```

- renvoyez alors g ou d , peu importe.
6. Calculez pour les deux modèles le volume occupé par 1 mole d'air à 300 K sous 1 bar. Faites de même sous 100 bar ; commentez.
 7. Écrivez une fonction `volumeGVdW2(n,P,T)` qui fait la même chose, mais au lieu d'implémenter à la main la dichotomie, vous utiliserez la fonction `scipy.optimize.bisect` (documentation à chercher).
 8. Dans la détente de Joule-Gay Lussac, la pression du gaz diminue tandis que son énergie interne est constante. On va montrer que, pour un gaz de Van der Waals, cela se traduit par une diminution de la température.
 Pour cela, commencez par calculer l'énergie interne U de 1 mole d'air à 300 K occupant 5 L ; on la notera U_0 .
 Ensuite, créez un tableau de valeurs de V entre 5 L et 25 L ; calculez le tableau des températures correspondantes, si on laisse U constant à la valeur U_0 . Tracez la courbe $T(V)$ et commentez.