

## Devoir n°1

### Problème : base de données en simulation de la cinétique d'un gaz parfait

La théorie cinétique des gaz vise à expliquer le comportement macroscopique d'un gaz à partir des mouvements des particules qui le composent. Depuis la naissance de l'informatique, de nombreuses simulations numériques ont permis de retrouver les lois de comportement de différents modèles de gaz comme celui du gaz parfait. Ce sujet s'intéresse à un gaz parfait monoatomique. Nous considérerons que le gaz étudié est constitué de particules sphériques, toutes identiques, de masse  $m$  et de rayon  $R$ , confinées dans un récipient rigide. Les simulations seront réalisées dans un espace à une, deux ou trois dimensions ; le récipient contenant le gaz sera, suivant le cas, un segment de longueur  $L$ , un carré de côté  $L$  ou un cube d'arête  $L$  avec des coordonnées modélisées de 0 à  $L$ .

Dans le modèle du gaz parfait, les particules ne subissent aucune force (leur poids est négligé) ni aucune autre action à distance. Elle n'interagissent que par l'intermédiaire de chocs, avec une autre particule ou avec la paroi du récipient. Ces chocs sont toujours élastiques, c'est-à-dire que l'énergie cinétique totale est conservée.

À partir d'une situation initiale, où  $N$  particules de rayon  $R$  sont placées aléatoirement à l'intérieur d'un récipient de taille  $L$  dans un espace à  $D$  dimensions, les positions et vitesses des particules vont évoluer au gré du déplacement des particules, des différents chocs entre elles et des rebonds sur les parois. On appelle évènement chaque choc ou rebond.

On suppose que l'on dispose d'une base de données bdd dans laquelle ont été enregistré lors de différentes simulations (effectuées en simulation python), dans lesquelles les particules ne sont pas nécessairement identiques, les données des événements (rebonds ici). On donne la structure de cette base de données dans la figure 1

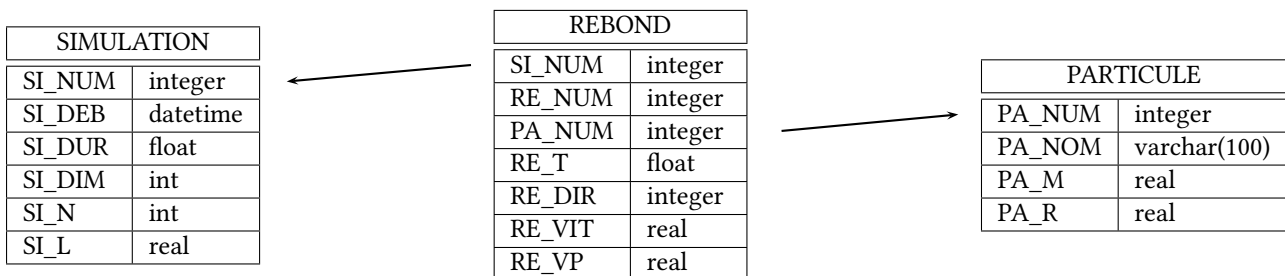


Figure 1: Structure physique de la base de données des résultats des simulations

Cette base comporte les trois tables suivantes :

- la table SIMULATION, donne les caractéristiques de chaque simulation effectuée. Elle contient les colonnes
  - SI\_NUM numéro d'ordre de la simulation
  - SI\_DEB date et heure du lancement du programme de simulation
  - SI\_DUR durée (en secondes) de la simulation (il ne s'agit pas du temps d'exécution du programme, mais du temps simulé)
  - SI\_DIM nombre de dimensions de l'espace de simulation
  - SI\_N nombre de particules pour cette simulation
  - SI\_L (en mètres) taille du récipient utilisé pour la simulation
  
- la table PARTICULE, des types de particules considérées. Elle contient les colonnes
  - PA\_NUM numéro (entier) identifiant le type de particule
  - PA\_NOM nom de ce type de particule
  - PA\_M masse de la particule (en grammes)
  - PA\_R rayon (en mètres) de la particule

– la table REBOND, liste les chocs des particules avec les parois du récipient.

Elle contient les colonnes

- SI\_NUM numéro d'ordre de la simulation ayant généré ce rebond
- RE\_NUM numéro d'ordre du rebond au sein de cette simulation
- PA\_NUM numéro du type de particule concernée par ce rebond
- RE\_T temps de simulation (en secondes) auquel ce rebond est arrivé
- RE\_DIR paroi concernée : entier non nul de l'intervalle  $[-SI\_DIM, SI\_DIM]$  donnant la direction de la normale à la paroi. Ainsi  $-2$  désigne la paroi située en  $y = 0$  alors que  $1$  désigne la paroi située en  $x = L$
- RE\_VIT norme de la vitesse de la particule qui rebondit (en  $m \cdot s^{-1}$ )
- RE\_VP valeur absolue de la composante de la vitesse normale à la paroi (en  $m \cdot s^{-1}$ )

1. Donner pour chaque table SIMULATION, PARTICULE et REBOND une clé primaire.
2. Combien d'attribut possède la table REBOND ?
3. Expliquer le type de l'attribut PA\_NOM.
4. Quel est le domaine de l'attribut SI\_NUM ?
5. Comment désigne t-on l'attribut SI\_NUM de la table REBOND ?
6. Dans cette base de données, combien y-a-t-il d'entités et d'associations ?
7. De quel type est l'association entre les tables SIMULATION et REBOND ? Entre les tables REBOND et PARTICULE ?
8. Écrire une requête qui détermine la masse minimale des particules des simulations.
9. Écrire une requête qui détermine le nombre de simulation de durée supérieure à une minute.
10. Écrire une requête qui détermine le ou les noms des particules qui possèdent la plus grande masse, classé par ordre alphabétique croissant.
11. Écrire une requête SQL qui donne le nombre de simulations effectuées pour chaque nombre de dimensions de l'espace de simulation.
12. Écrire une requête SQL qui donne, pour chaque simulation, le nombre de rebonds enregistrés et la vitesse moyenne des particules qui frappent une paroi.
13. Écrire une requête SQL qui, pour une simulation  $n$  donnée, calcule, pour chaque paroi, la variation de quantité de mouvement due aux chocs des particules sur cette paroi tout au long de la simulation. On se rappellera que lors du rebond d'une particule sur une paroi la composante de sa vitesse normale à la paroi est inversée, ce qui correspond à une variation de quantité de mouvement de  $2m|v_{\perp}|$  où  $m$  désigne la masse de la particule et  $v_{\perp}$  la composante de sa vitesse normale à la paroi.
14. Écrire une requête SQL qui renvoie les simulations et la taille du récipient dont le nombre de rebonds de particules de nom  $nomp$  dépasse 1000.



« Vous ne pouvez pas comprendre la récursivité sans d'abord avoir compris la récursivité. »

« Si vous ne savez toujours pas ce qu'est la récursivité, relisez cette phrase. »