

Licence Sciences et Technologies – Mention Chimie – L3
Algorithmique et Programmation – Examen de Travaux Pratiques

Durée : 1 heure.

Remarques : il est recommandé de respecter les notations imposées dans le texte. Toutes les fonctions devront comporter des paramètres. Aucun document écrit n'est autorisé.

Isothermes de van der Waals de l'argon : l'équation d'état de van der Waals reproduit le comportement d'un gaz réel en introduisant la pression de cohésion a et le covolume b :

$$\left(p + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT \quad (1)$$

On souhaite réaliser un programme en langage C permettant de tracer des isothermes représentant cette équation sur un diagramme pression-volume dans le cas d'une mole d'argon ($a = 1.355 \text{ bar L}^2 \text{ mol}^{-2}$ et $b = 0.0431 \text{ L mol}^{-1}$).

On souhaite tracer 15 isothermes, écrites sur 15 colonnes consécutives : les 14 premières isothermes sont pour des températures allant de 70 K à 135 K par pas de 5 K, la dernière isotherme est calculée pour la température critique $T_c = \frac{8a}{27bR}$. Chaque ligne contiendra donc les 15 pressions calculées pour un volume donné.

Question 1 : Définir les trois constantes a , b et R . Afin de respecter l'homogénéité des relations, la constante des gaz parfaits utilisée est ici $R = 0.083145 \text{ bar L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

Question 2 : écrire une fonction `vdw` qui renvoie, pour une valeur de volume et une valeur de température données, la valeur de la pression calculée

grâce à l'équation 1. Pour éviter des valeurs trop grandes ou négatives, la pression renvoyée sera 0 si la valeur calculée est négative, et 100 si la valeur calculée est supérieure à 100.

Question 3 : écrire une fonction `saisie` qui permet à l'utilisateur de choisir le volume minimal et le volume maximal de l'intervalle à étudier, ainsi que le pas utilisé pour les calculs.

Question 4 : écrire le programme principal, qui demande à l'utilisateur les valeurs V_{ini} et V_{fin} définissant l'intervalle souhaité ainsi que le pas de progression V_{pas} grâce à la fonction `saisie`. Chaque volume et les 15 valeurs de pression calculées correspondant aux isothermes désirées seront ensuite stockées dans le fichier `data.txt`.

Vous pouvez vérifier votre programme en traçant les courbes obtenues à l'aide de `gnuplot`. Le graphique ci-dessous a été obtenu avec $V_i = 0.05 \text{ L}$ et $V_f = 0.8 \text{ L}$, avec un intervalle de 0.001 L . Pour le tracer, lancez `gnuplot` puis exécutez la commande suivante :
`load '/users/public/public/Goujon/exam_gnuplot.script'`

