



# Compressão de Gases



# Compressão de Gases

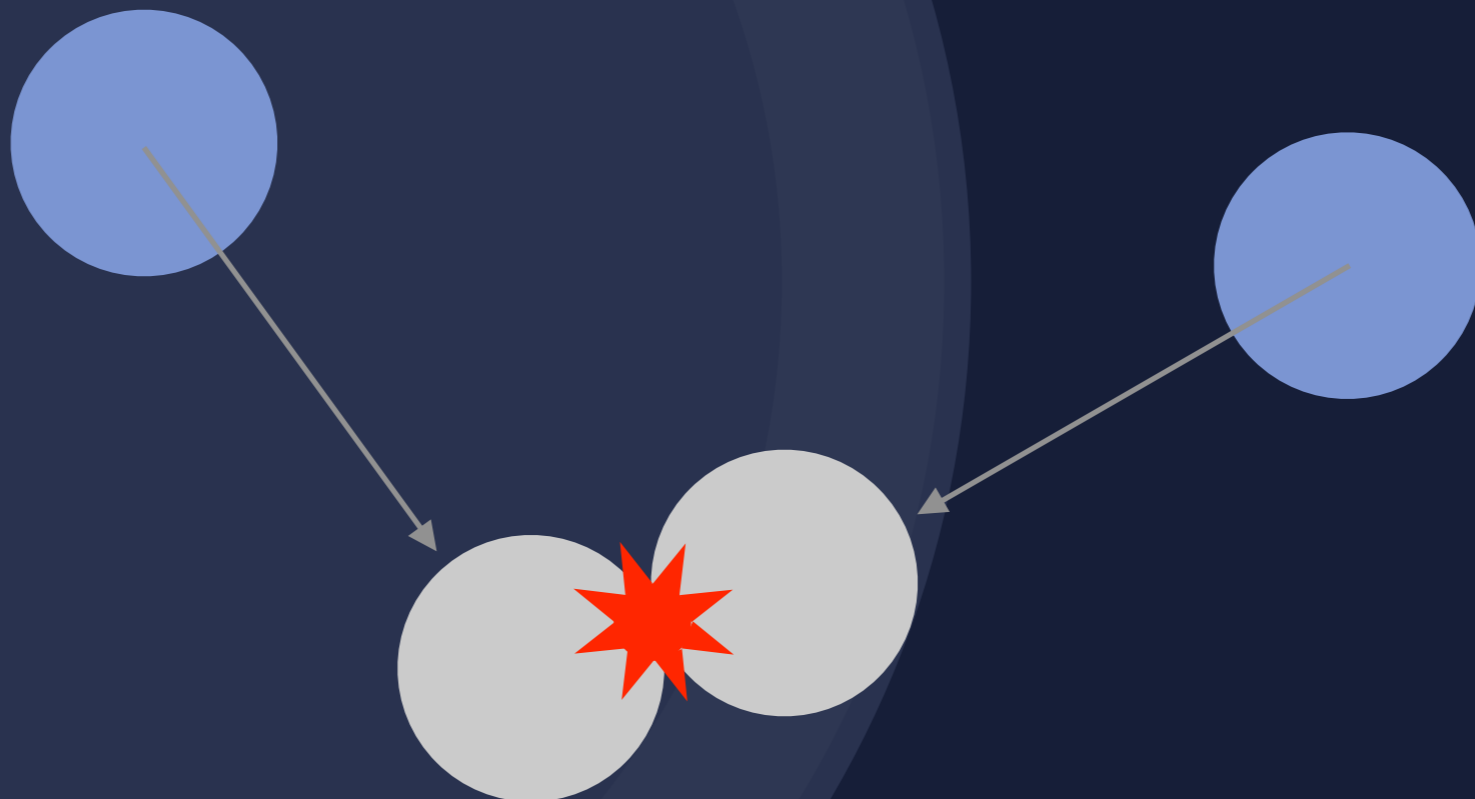
## Estrutura da apresentação

- Modelo utilizado para a simulação de um gás numa caixa
- Métodos da implementação do problema físico
- Resultados obtidos e outras potencialidades

# Compressão de Gases

Modelo das esferas rígidas (*hard spheres*)

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{se } \|\vec{r} - \vec{r}_0\| > R \\ \infty & \text{se } \|\vec{r} - \vec{r}_0\| \leq R \end{cases}$$



# Compressão de Gases

Modelo das esferas rígidas (*hard spheres*)

- Para tal, não existe computacionalmente um método simples que não envolva verificar todos os pares de moléculas e registar o par que colide mais cedo.
- Para implementar o modelo das esferas rígidas, é preciso prever atempadamente a próxima colisão.

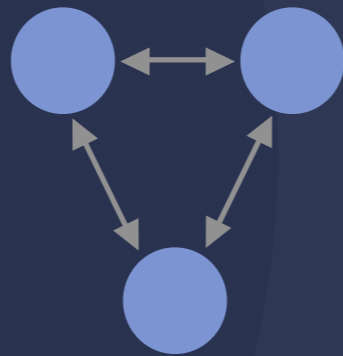
# Compressão de Gases

Modelo das esferas rígidas (*hard spheres*)

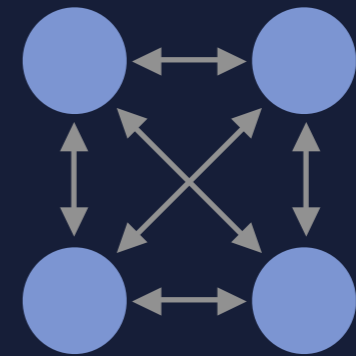
$$O \left( \frac{N(N+1)}{2} \right) \approx O(N^2)$$



Colisões = 1



Colisões = 3

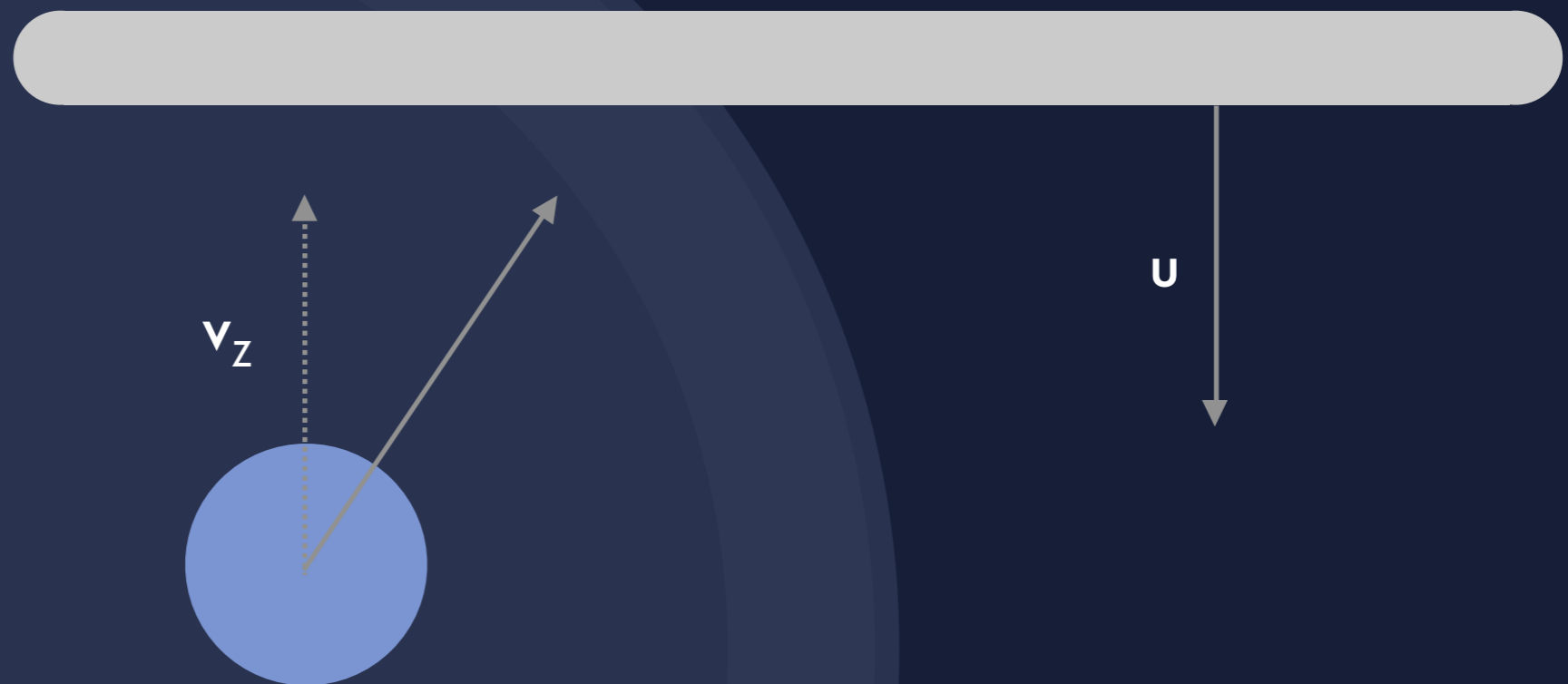


Colisões = 6

# Compressão de Gases

Métodos de implementação do problema físico

Implementação da compressão



● Tempo de colisão diminui

● Velocidade final em  $Z$ :  $v_{\text{Final}Z} = -v_z + 2u$

# Compressão de Gases

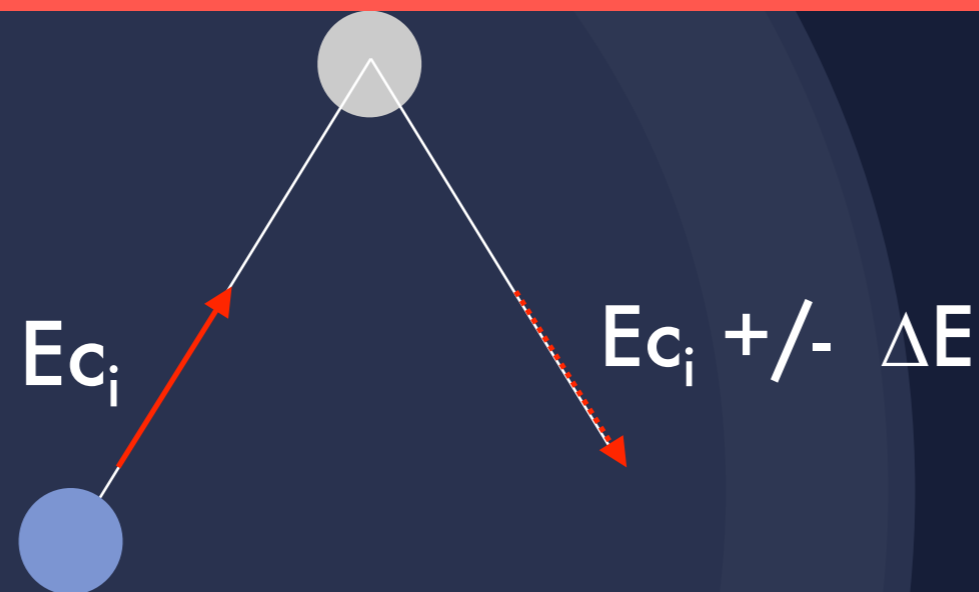
Métodos de implementação do problema físico

Implementação do aquecimento da parede:

Aquecimento simples



Temperatura T



● Reflexão das partículas

●  $\Delta E = |\alpha| \cdot 1/2 K$

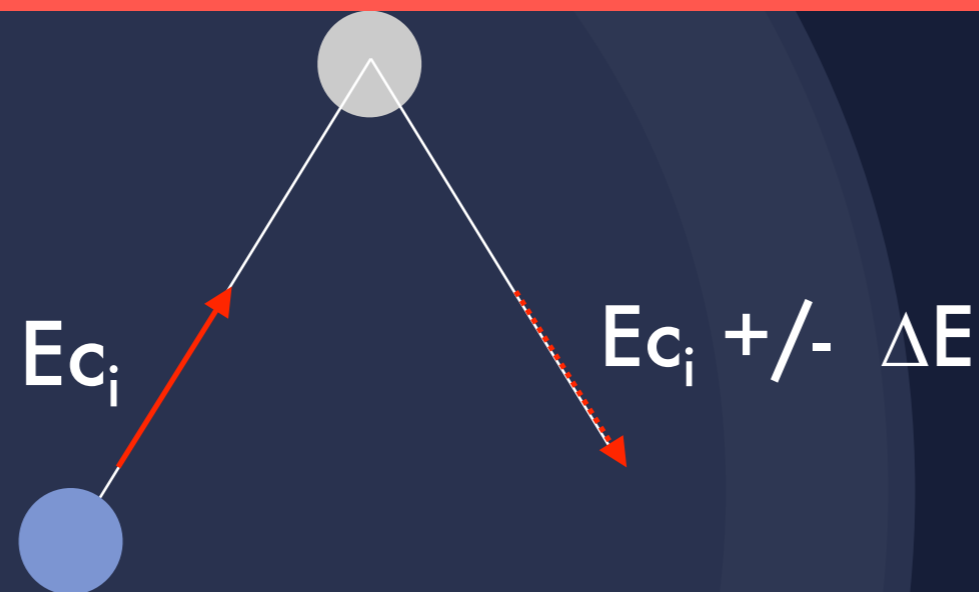
$\alpha$  com valor aleatório entre -1 e 1 inclusivé.

# Compressão de Gases

Métodos de implementação do problema físico

Implementação do aquecimento da parede:

Aquecimento por diferença energética



Temperatura T

● Reflexão das partículas

●  $\Delta E = |\alpha| \cdot (1/2 K.T - E_{c_i})$

$\alpha$  com valor aleatório entre -1 e 1 inclusivé.

# Compressão de Gases

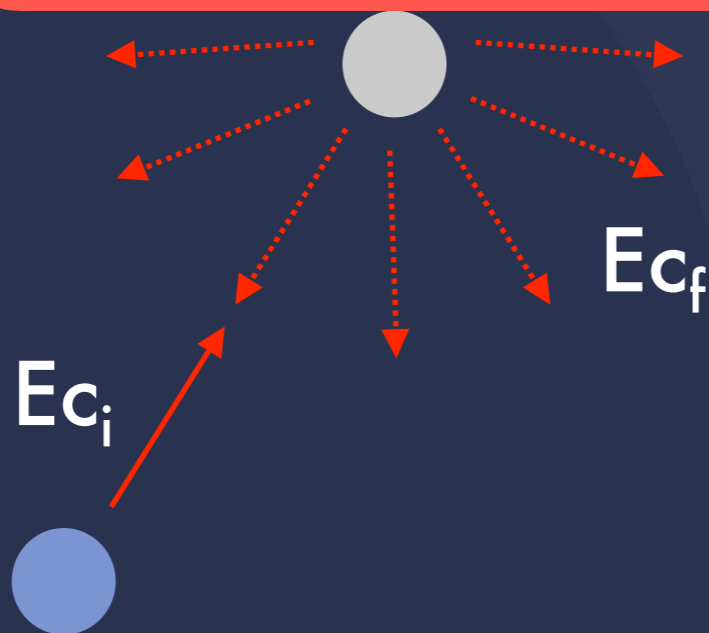
Métodos de implementação do problema físico

Implementação do aquecimento da parede:

*Thermal bath*



Temperatura  $T$



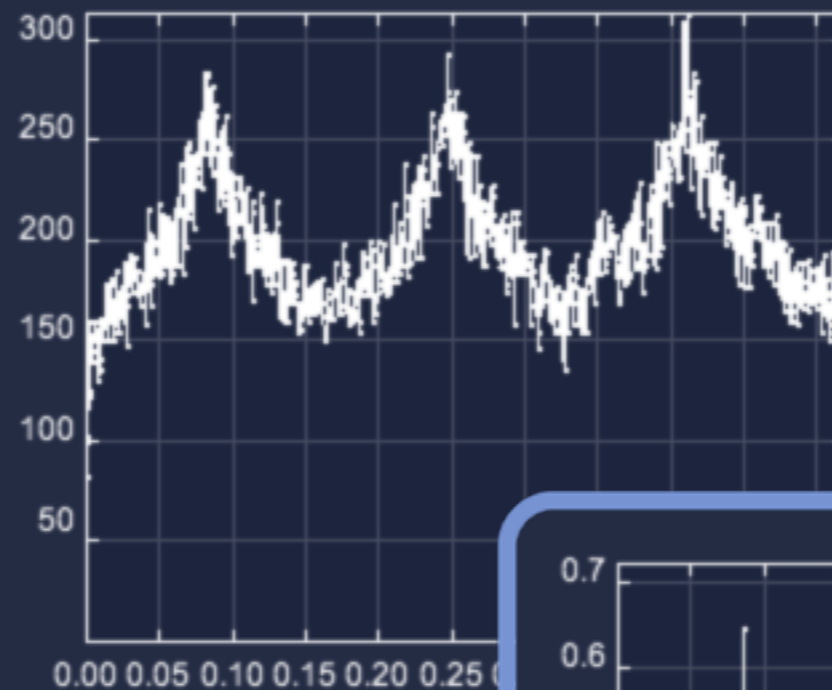
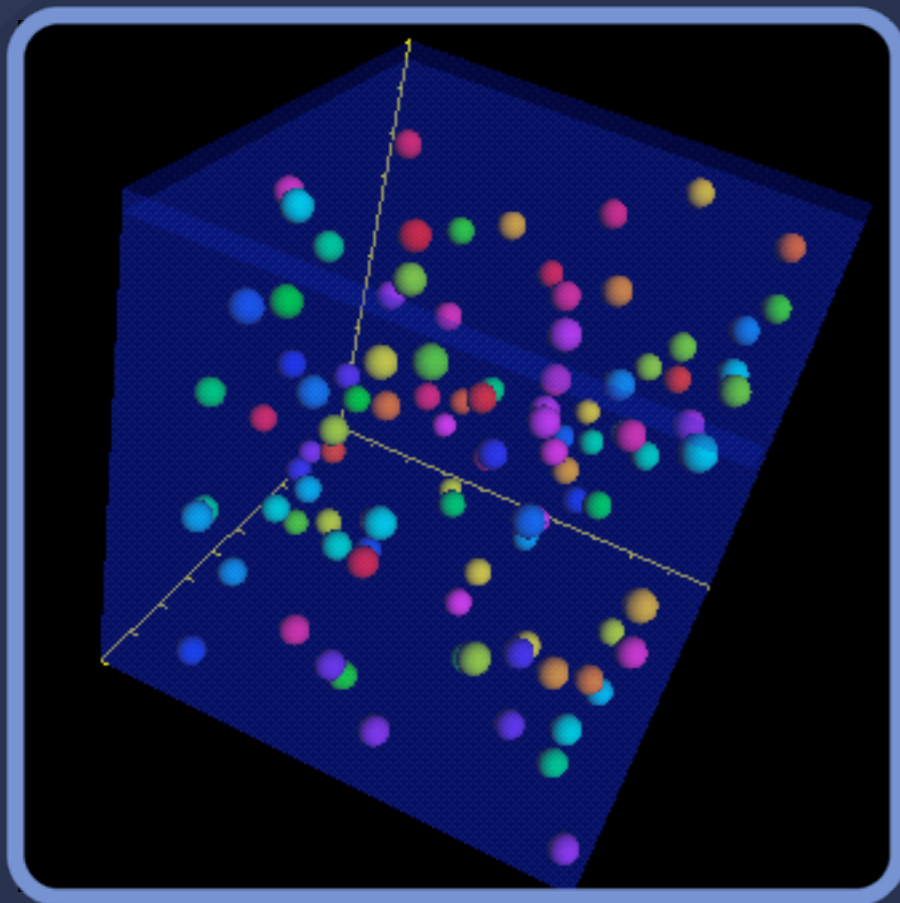
● Direcção final aleatória

●  $E_{c_f} = 1/2 K.T$

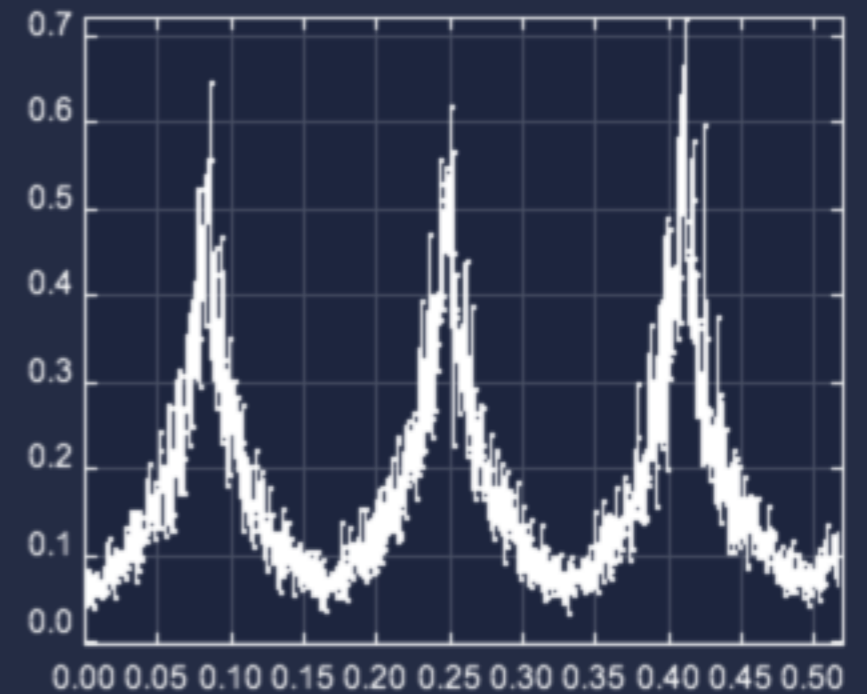
# Compressão de Gases

Resultados obtidos e outras potencialidades

Compressão  
Lenta



Entropia (J)  
Função do Tempo

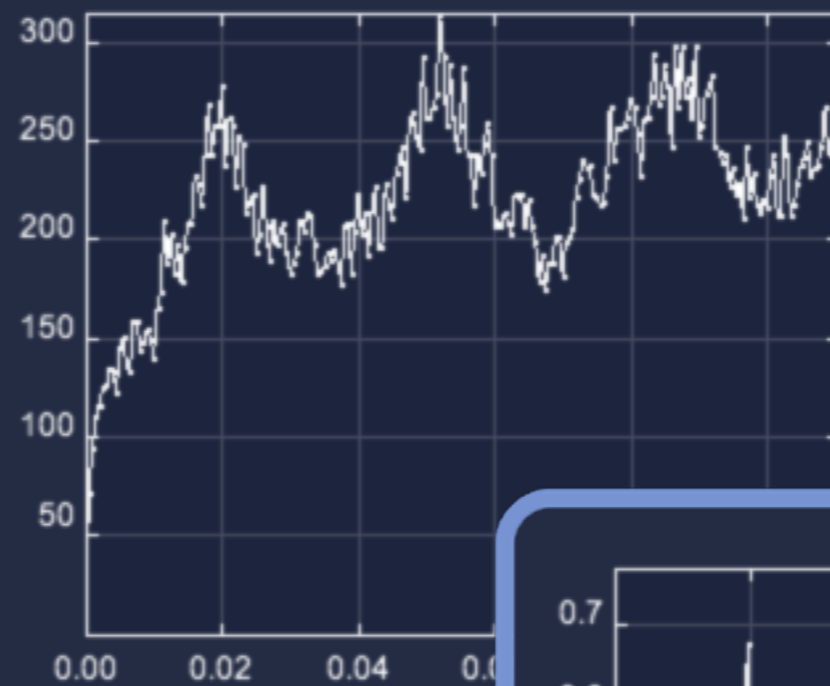
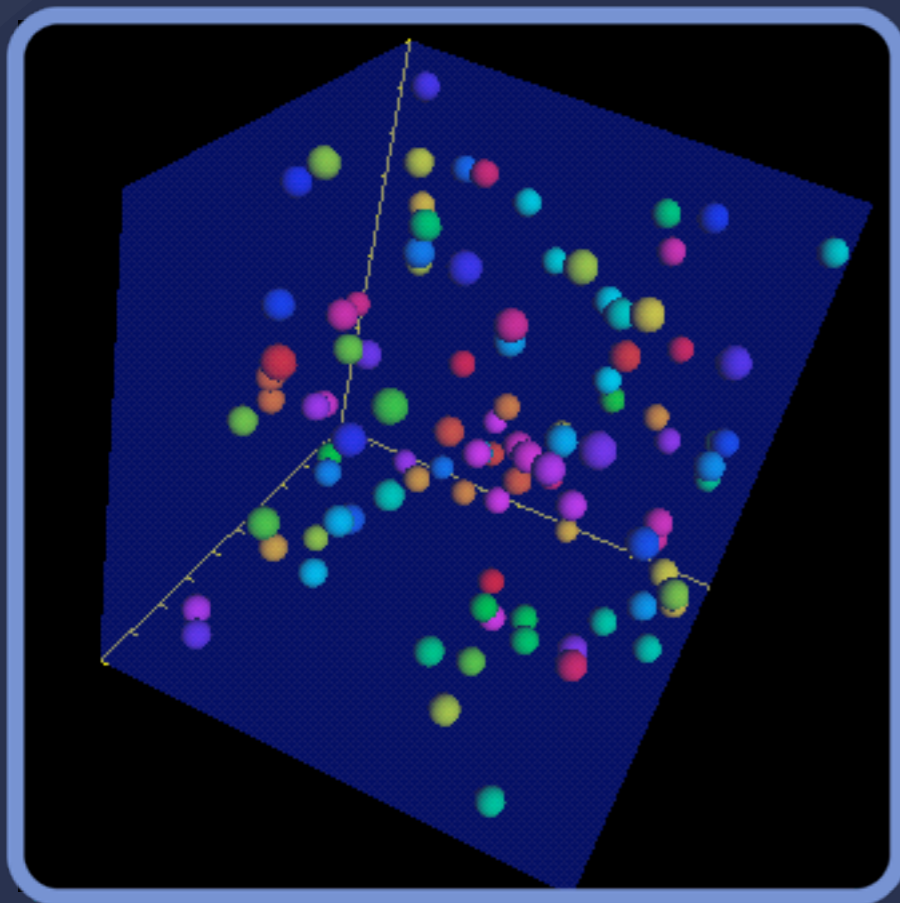


Pressão (Pa) em  
Função do Tempo (10<sup>-10</sup> s)

# Compressão de Gases

Resultados obtidos e outras potencialidades

Compressão  
Rápida



Entropia (J)  
Função do Tempo



Pressão (Pa) em  
Função do Tempo (10<sup>-10</sup> s)

# Compressão de Gases

Resultados obtidos e outras potencialidades

Diferenças entre as compressão / expansão rápida e lenta

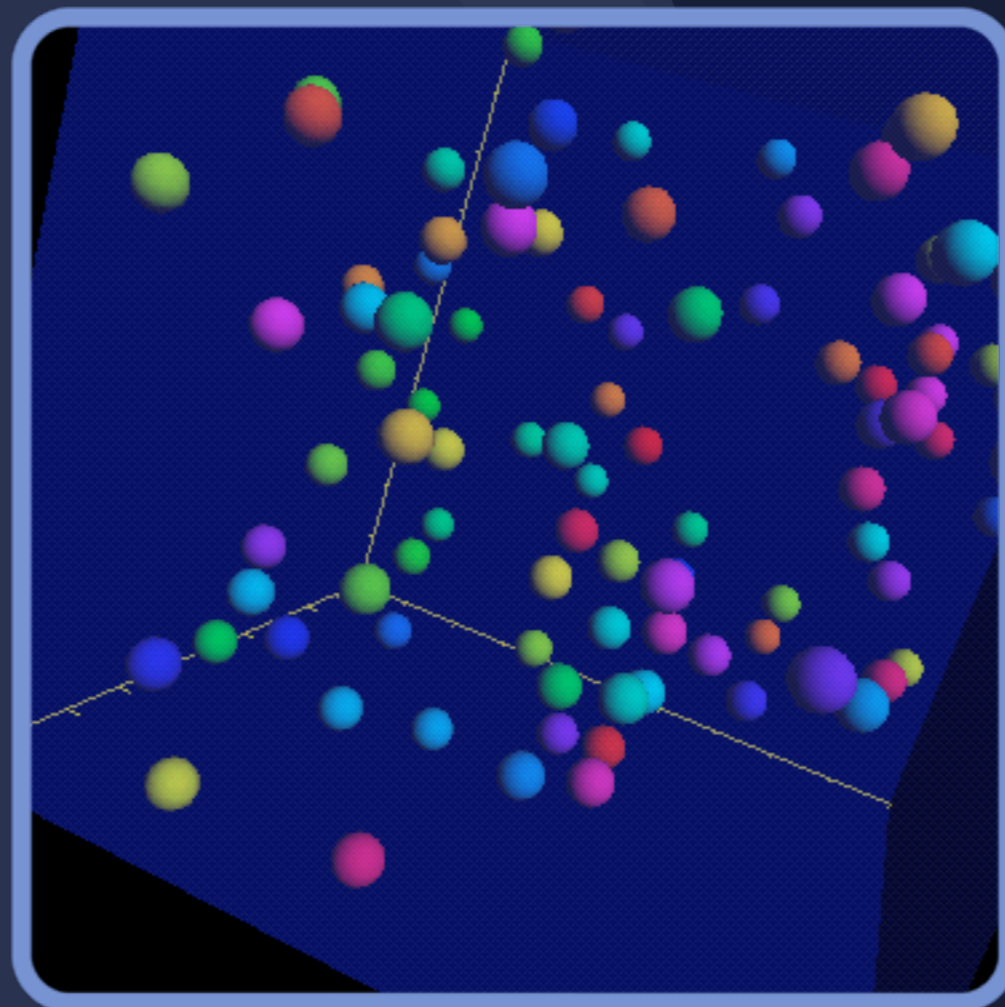
- Verificou-se em ambos os casos um aumento da entropia, temperatura e energia cinética média das partículas para um mesmo volume e por isso a irreversibilidade dos processos acima descritos.
- Pode-se então concluir que o “grau de reversibilidade” da compressão/expansão de um gás depende directamente da velocidade de compressão, atingindo-se o estado de *quasi equilibrium* quando  $v_c$  tende para 0.

# Compressão de Gases

Resultados obtidos e outras potencialidades

Aquecimento externo do sistema

- Observação do fenômeno do aquecimento a nível microscópico e as resultantes mudanças nas grandezas termodinâmicas.



# Compressão de Gases

Resultados obtidos e outras potencialidades

Outros estudos de interesse directamente relacionados

- Observação da influência do raio atómico nas quantidades termodinâmicas.
- Verificação “experimental” do grau de aproximação da lei dos gases ideais  $P.V = n.R.T.$
- Simulação de sistemas complexos com aquecimento e compressões/expansões em simultâneo ( $Q$  e  $W$  diferentes de 0).

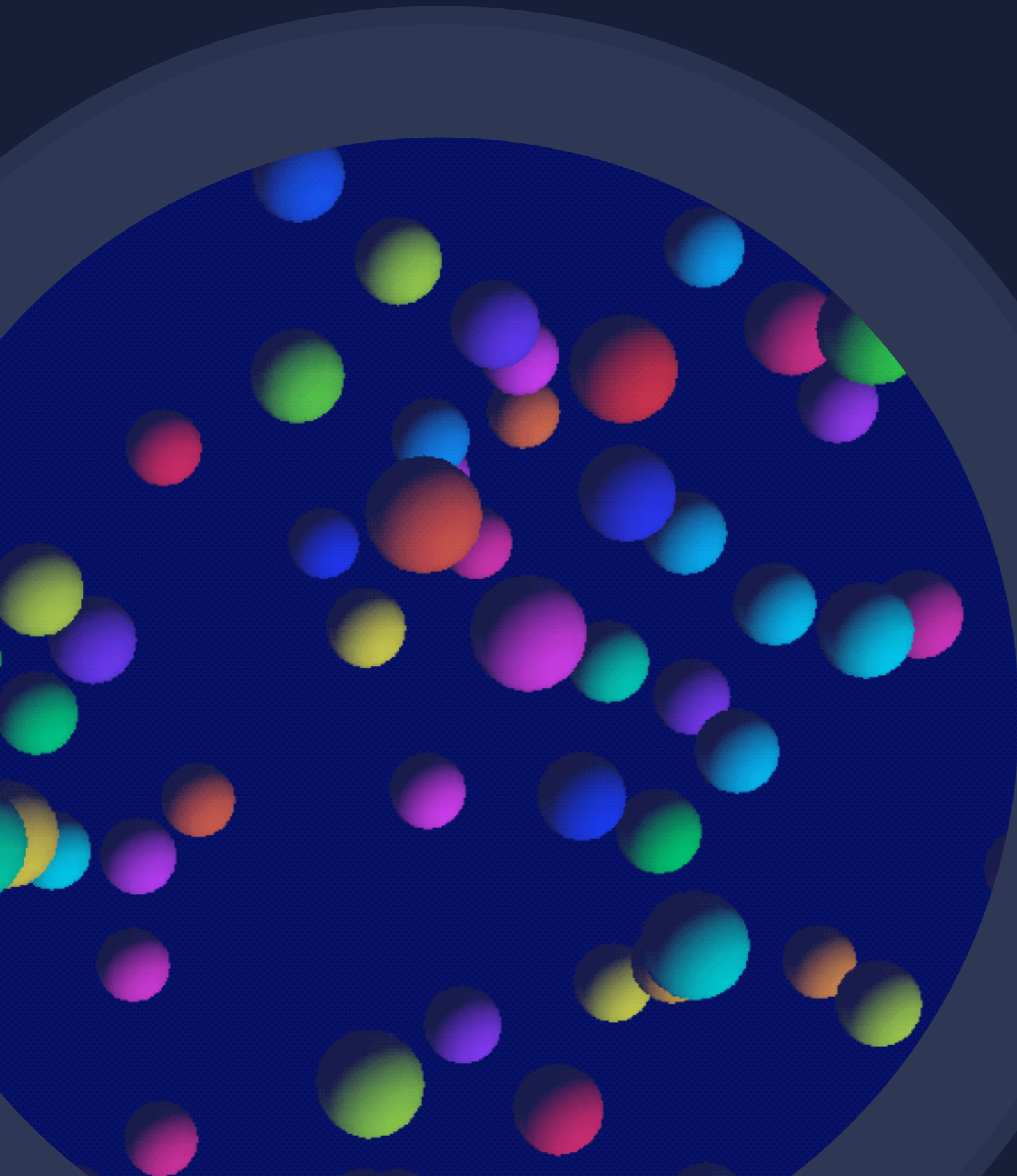


# Compressão de Gases

## Créditos

 Autores:

Renato Fonseca e André Cunha



 Alguns Elementos de *Design* da Propriedade de:  
Copyright © 2004 The Peat Group, Inc.  
Copyright © Apple Inc.