Simulação Numérica de um Gás Ideal 2D com Aquecimento pela Base

Relatório técnico — Física computacional

1. Descrição geral

Simulação numérica de um gás ideal em um recipiente bidimensional, sem colisões entre partículas e com colisões perfeitamente elásticas nas paredes laterais e no topo. As colisões com a base acrescentam energia às partículas, funcionando como uma **fonte de energia externa**. O objetivo é analisar a evolução térmica e dinâmica do sistema, incluindo o cálculo e o gráfico da posição e velocidade do **centro de massa** ao longo do tempo.

2. Fundamentos físicos e matemáticos

2.1 Velocidade escalar

A velocidade escalar (módulo da velocidade vetorial) é dada por:

$$V = \sqrt{V_x^2 + V_y^2} \tag{1}$$

2.2 Energia cinética individual

A energia cinética de uma partícula com massa m é:

$$E_c = \frac{1}{2}m(V_x^2 + V_y^2) \tag{2}$$

2.3 Teorema da equipartição de energia

O teorema da equipartição estabelece que a energia média por partícula é:

$$\langle E_c \rangle = \frac{f}{2}k_B T \tag{3}$$

onde:

- f = número de graus de liberdade,
- k_B = constante de Boltzmann,
- T = temperatura em kelvin.

Para um sistema bidimensional ($f = 2$):

$$\langle E_c \rangle = k_B T \tag{4}$$

Importante: não se pode igualar diretamente $\langle E_c \rangle$ à energia cinética individual E_c de uma partícula, pois $\langle E_c \rangle$ representa a **média** de muitas partículas. Para relacionar ambas, deve-se tomar o somatório das energias individuais e dividir por N, o número total de partículas.

3. Temperatura efetiva do sistema

A energia cinética total é:

$$K_{\text{total}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m (V_{xi}^2 + V_{yi}^2) \tag{5}$$

Pela equipartição:

$$K_{\text{total}} = \frac{f}{2} N k_B T \tag{6}$$

Isolando a temperatura:

$$\boxed{T_{\text{efetiva}} = \frac{2}{f N k_B} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m (V_{xi}^2 + V_{yi}^2)} \tag{7}$$

4. Velocidade RMS (Root Mean Square)

Como as velocidades podem ser positivas ou negativas, a média simples $\langle V \rangle$ pode ser zero, mesmo que todas as partículas estejam se movendo rapidamente. A velocidade RMS mede a intensidade real do movimento:

$$V_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (V_{xi}^2 + V_{yi}^2)} \tag{8}$$

Relação entre V_{rms} e a temperatura (via equipartição):

$$\frac{1}{2} m \langle V_x^2 + V_y^2 \rangle = k_B T \tag{9}$$

Logo:

$$\boxed{V_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{2 k_B T}{m}}} \tag{10}$$

Quanto maior a temperatura, maior o valor médio de V_{rms}, indicando que as partículas estão mais agitadas.

5. Injeção de energia na base

A cada colisão com a base, uma partícula recebe energia adicional:

$$Q_{\text{per hit}} = c\, k_B\, T_{\text{base}} \tag{11}$$

onde:

- c = parâmetro de eficiência de transferência de energia,
- k_B = constante de Boltzmann,
- T_{base} = temperatura da base em kelvin.

O **fator de energia** é calculado como:

$$F = \sqrt{\frac{E_{\text{nova}}}{E_{\text{atual}}}} \tag{12}$$

Esse fator ajusta o módulo total da velocidade, aumentando proporcionalmente V_x e V_y de forma isotrópica (em ambas as direções).

6. Movimento das partículas

O movimento de cada partícula é modelado por um **Movimento Retilíneo Uniforme (MRU)**, com atualização temporal usando o **método de Euler**:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + V_x(t)\, \Delta t \tag{13}$$

$$y(t + \Delta t) = y(t) + V_y(t)\, \Delta t \tag{14}$$

O método de Euler é um integrador de primeira ordem, simples e eficiente para simulações com pequenos intervalos de tempo (Δt pequeno).

7. Centro de massa do sistema

O centro de massa representa a posição média ponderada pela massa de todas as partículas. Para N partículas de massas m_i e posições (x_i, y_i):

$$x_{CM} = \frac{\sum_{i=1}^{N} m_i x_i}{\sum_{i=1}^{N} m_i}, \qquad y_{CM} = \frac{\sum_{i=1}^{N} m_i y_i}{\sum_{i=1}^{N} m_i} \tag{15}$$

Se todas as partículas têm a mesma massa m, as massas se cancelam:

$$x_{CM} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i, \qquad y_{CM} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i \tag{16}$$

A velocidade do centro de massa é obtida como:

$$v_{CM,x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} V_{xi}, \qquad v_{CM,y} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} V_{yi} \tag{17}$$

8. Interpretação física

- **Temperatura efetiva:** representa a agitação média das partículas (energia interna do sistema). É uma grandeza escalar.
- **Centro de massa:** representa a posição média do sistema. É uma grandeza vetorial.
- **Velocidade do centro de massa:** indica o movimento global do conjunto de partículas. Também é vetorial.

9. Conclusão

O sistema descrito realiza uma **simulação numérica de um gás ideal bidimensional** sob aquecimento pela base, utilizando o **método de Euler** para integração temporal. A temperatura efetiva do sistema é obtida pela média da energia cinética das partículas, enquanto o centro de massa e sua velocidade descrevem o comportamento global do conjunto. Com o aumento da energia injetada pela base, espera-se observar um crescimento de T_{efetiva} e uma variação ascendente na coordenada y_{CM}, análoga ao efeito de **convecção térmica**.