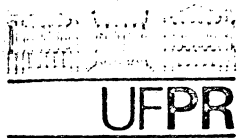


DENILTON CARLOS GAIO

**TEORIA CINÉTICA PARA GASES  
POLIATÔMICOS DENSOS**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Paraná, como requisito à obtenção do grau de Mestre em Ciências.

CURITIBA  
1991



ATA DA DEFESA DE TESE DE MESTRADO DO SR. DENILTON CARLOS GAIO

TÍTULO DA TESE: "Teoria Cinética para Gases Poliatômicos Densos"

Em sessão pública de defesa de tese, iniciada às dez horas, nesta data, após um seminário sobre o assunto da tese e arguição pela banca, esta decidiu atribuir Conceito A.

Curitiba, 30 de agosto de 1991.

Banca Examinadora:

Prof. GILBERTO MEDEIROS KREMER  
Presidente/Orientador - UFPR

Prof. I-SHIH LIU  
Instituto de Matemática/UFRJ

Prof. JOSÉ ANTONIO SALVADOR  
Instituto de Matemática/UFRJ

## AGRADECIMENTOS

**À CAPES pelo apoio financeiro.**

**Aos amigos da Pós-Graduação em Física pelo incentivo e apoio.**

**Em especial a meu orientador, professor Gilberto Medeiros Kremer, pela orientação, dedicação e amizade.**

## Resumo

Desenvolvemos uma teoria cinética para um único gás denso poliatômico de moléculas esféricas rugosas baseada na equação de Enskog e no método dos momentos de Grad . Expressões gerais para os coeficientes de transporte, das equações constitutivas para tensor pressão , fluxo de calor e fluxo de spin, são obtidas da transição de uma teoria de 29 campos escalares (com densidade, velocidades linear e de spin, tensor pressão cinético, fluxos de calor rotacional e translacional cinéticos, fluxo de spin cinético e temperatura como campos básicos) para uma teoria de 8 campos escalares (com densidade, velocidades linear e de spin e temperatura como campos básicos). Analisamos o problema da propagação de ondas harmônicas planas com pequenas amplitudes (ondas forçadas) e determinamos os oito modos hidrodinâmicos (ondas livres).

# Abstract

Based on Enskog's equation and on Grad's method of moments, a kinetic theory for polyatomic dense gases of rough spherical molecules is developed. General expressions for the transport coefficients - of the constitutive equations for the pressure tensor, heat flux, and spin flux - are obtained, from the transition of a 29-field theory (with density, linear and spin velocities, pressure tensor, translational and rotational heat flux, spin flux, and temperature as basic fields) to a eight-field theory (with density, linear and spin velocities, and temperature as basic fields). For theory of eight fields, the problem concerning the propagation of plane harmonic waves of small amplitudes is analyzed (forced waves), and the eight hydrodynamic modes (free waves) are determined.

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>COLISÃO BINÁRIA</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>AS EQUAÇÕES DE TRANSPORTE</b>	<b>8</b>
3.1	A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN . . . . .	8
3.2	O MODELO DE ENSKOG . . . . .	10
3.3	EQUAÇÃO DE TRANSPORTE I . . . . .	12
3.4	EQUAÇÃO DE TRANSPORTE II . . . . .	14
<b>4</b>	<b>TEORIA CINÉTICA DE 29 CAMPOS</b>	<b>15</b>
4.1	CAMPOS BÁSICOS . . . . .	15
4.2	EQUAÇÕES DE BALANÇO . . . . .	16
4.3	A FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO . . . . .	19
4.4	TERMOS CONSTITUTIVOS . . . . .	21
4.5	AS EQUAÇÕES DE CAMPO LINEARIZADAS . . . . .	24
<b>5</b>	<b>TEORIA CINÉTICA DE 8 CAMPOS</b>	<b>26</b>
5.1	CAMPOS BÁSICOS . . . . .	26
5.2	EQUAÇÕES DE BALANÇO . . . . .	26
5.3	TERMOS CONSTITUTIVOS . . . . .	27
5.4	AS EQUAÇÕES DE CAMPO LINEARIZADAS . . . . .	30
<b>6</b>	<b>PROCESSOS TERMODINÂMICOS</b>	<b>33</b>
6.1	PROPAGAÇÃO DE ONDAS PLANAS HARMÔNICAS FORÇADAS DE PEQUENA AMPLITUDE . . . . .	34
6.2	MODOS HIDRODINÂMICOS . . . . .	37
<b>7</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>44</b>
	<b>APÊNDICE A - TABELAS DE INTEGRAIS</b>	<b>45</b>
	<b>APÊNDICE B - PROGRAMA MUSIMP</b>	<b>47</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>60</b>

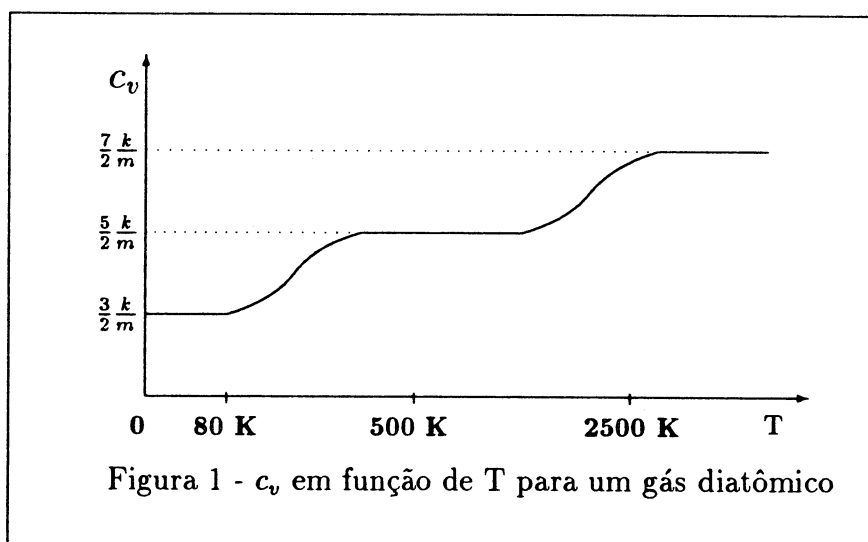
# 1 INTRODUÇÃO

Os gases poliatômicos podem ser considerados como gases que possuem variáveis internas, as quais podem ser representadas pela energia de rotação da molécula ou/e de vibração de seus átomos.

Uma diferença entre um gás monoatômico e um gás poliatômico está na relação entre o coeficiente de condutividade térmica  $\lambda$  e o coeficiente de viscosidade  $\mu$ . Para um gás monoatômico  $\frac{\lambda}{\mu}$  é igual<sup>1</sup> a  $\frac{5}{2} c_v^T$  (veja [3] pp 247-251), enquanto que, para o gás diatômico, há também uma contribuição da energia interna<sup>2</sup>:

$$\frac{\lambda}{\mu} = \frac{5}{2} c_v^T + c_v^I.$$

Outra diferença importante relaciona-se com o calor específico a volume constante, que para gases monoatômicos é uma constante<sup>3</sup>  $c_v = \frac{3}{2} \frac{k}{m}$ , enquanto que para gases poliatômicos é função da temperatura.



Na análise<sup>4</sup> da figura 1, verifica-se ser  $c_v$  para um gás diatômico, sob temperaturas muito baixas igual ao calor específico de um gás monoatômico. Interpretamos este fato dizendo que a temperaturas muito baixas, a energia de rotação e a energia de vibração não estão excitadas. Com o crescimento da temperatura a energia rotacional é excitada e o calor específico cresce até  $c_v = \frac{5}{2} \frac{k}{m}$ . O subsequente aumento da temperatura faz com que a energia de vibração se excite, acarretando um aumento do calor específico até  $c_v = \frac{7}{2} \frac{k}{m}$ .

<sup>1</sup>Utilizamos a seguinte notação:  $c_v^T$  e  $c_v^I$  são calores específicos a volume constante correspondentes a energia de translação e energia da variável interna, respectivamente.  $k$  é a constante de Boltzmann e  $m$ , a massa da molécula.

<sup>2</sup>Existem várias fórmulas na literatura (veja por exemplo Reid & Sherwood [22]). Aqui estamos empregando a fórmula de Eucken.

<sup>3</sup>Não estamos interessados aqui em gases degenerados a temperaturas muito baixas. Gases sujeitos a temperaturas entre 50 K e 100.000 K podem ser tratados como gases clássicos, pois, neste intervalo de temperatura, nem os efeitos quânticos, nem os efeitos relativísticos são importantes. Isto nos permite descrever o movimento das moléculas a partir das leis da mecânica clássica newtoniana.

<sup>4</sup>Apresentamos aqui uma curva teórica, do calor específico a volume constante em função da temperatura, obtida da mecânica estatística (veja por exemplo Pointon [21]).

## FLUIDOS POLARES

Nosso objetivo é o desenvolvimento de uma teoria cinética de gases poliatômicos densos, na qual consideramos apenas a energia de rotação das moléculas como variável interna, não estando excitada a energia vibracional. Esta teoria essencialmente estende a teoria clássica de viscosidade do fluido para incluir a velocidade angular de um elemento material, considerando as partículas do gás como *pequenos corpos rígidos*. Os fluidos que incorporam estes *efeitos de microestrutura* são chamados de fluidos polares<sup>5</sup>.

As equações constitutivas da teoria do fluido polar diferem das de outras teorias em que os efeitos do momento angular não são considerados. O tensor pressão total é assimétrico, pois incorpora um termo proporcional ao acoplamento da velocidade de spin e metade da vorticidade local. Ao fluxo de calor total também se apresenta um acréscimo, devido à consideração do momento angular, que é proporcional ao rotacional da velocidade de spin.

A noção de fluido polar parece ter sido introduzida por Born [2], que relacionou a resistência ao movimento rotacional relativo à parte anti-simétrica do tensor pressão.

Aproximadamente 30 anos mais tarde, Grad [14] introduziu as equações constitutivas linearizadas para um fluido polar, considerando os efeitos do momento angular.

O estudo destas mesmas equações constitutivas recebeu contribuições de diferentes pontos de vista e modificações por Aero et alii. [1], Cowin [8], Condiff & Dahler [4], Eringen [12], dentre outros.

Aero e colaboradores [1] introduziram os campos de velocidade e velocidade angular da partícula e postularam uma função de dissipação, a qual conduz às equações constitutivas de Grad. O desenvolvimento de Cowin [8] baseia-se na mecânica do continuum apresentada e desenvolvida pelos irmãos Cosserat [5,6,7]. Condiff e Dahler [4] aparecem como os primeiros a chamar de teoria do fluido polar e Eringen [12] obtêm as mesmas equações constitutivas de Grad [14] como um caso especial da teoria mais geral do microfluido.

Atualmente, têm sido apresentadas soluções para um grande número de problemas de valores de contorno envolvendo fluidos polares, bem como aplicações a esta teoria (veja Cowin [9]).

## MODELO DE BRYAN

As forças intermoleculares que agem sobre os íons, átomos e moléculas de um gás podem ser classificadas, segundo o alcance, em: forças de curto alcance ou forças de valência e forças de longo alcance ou de van der Waals. As forças de valência são de repulsão e surgem quando as moléculas aproximam-se e há superposição das nuvens eletrônicas. As forças de van der Waals são atrativas. O potencial (devido ao acoplamento de forças centrais e não-centrais) empregado neste trabalho é um modelo empírico chamado potencial de esferas rígidas, o qual caracteriza-se por ser infinito quando as moléculas estão em contato e nulo quando não, isto é

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & \Rightarrow r \leq a \\ 0 & \Rightarrow r > a, \end{cases}$$

onde  $\phi(r)$  é o potencial de interação a uma distância  $r$  de um molécula de diâmetro  $a$ .

<sup>5</sup>Uma análise termodinâmica desta teoria encontramos em Leslie [19] e Cowin [9].



Se restringirmos o modelo de modo que, além de esferas perfeitamente rígidas com energia de rotação, as moléculas sejam também perfeitamente elásticas e rugosas, recaímos no modelo proposto por Bryan (*veja por exemplo [3]*), o qual pode ser interpretado como segue: durante uma colisão binária as moléculas aderem-se sem deslizamento e, com isto, a energia de deformação de cada molécula (resultante do choque) é totalmente convertida em energia de translação e rotação. A consequência desta hipótese é a reversão da velocidade relativa dos pontos das esferas que entram em contato.

## FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO

Uma partícula do gás pode ser especificada instantaneamente através de sua posição  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ , e de suas velocidades linear e angular respectivamente  $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)$  e  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, w_3)$ . Consequentemente, podemos especificar uma partícula através de um ponto em um espaço de nove dimensões, denominado espaço  $\mu$ . O estado do gás neste espaço é caracterizado por uma função de distribuição  $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$ . A função de distribuição em equilíbrio é caracterizada por uma Maxwelliana. Determinaremos a função de distribuição perto do equilíbrio através da expansão do desvio da Maxwelliana em uma série de produtos das velocidades.

## EQUAÇÃO DE ENSKOG

A evolução da função de distribuição é dada pela *equação de Boltzmann*, que, neste trabalho é determinada pela *suposição sobre o número de colisões* entre as partículas. Este processo, chamado *Stosszahlansatz*, tem como hipóteses básicas:

- (i) considera-se apenas as colisões binárias;
- (ii) durante a colisão o efeito das forças externas é muito menor que o efeito das forças intermoleculares;
- (iii) a variação da função de distribuição  $f$  não é muito grande ao longo do tempo de duração de uma colisão, bem como ao longo de uma distância da ordem do alcance das forças intermoleculares; e
- (iv) suposição do caos molecular – em quaisquer posição  $\mathbf{x}$  e tempo  $t$ , as velocidades de duas partículas não estão co-relacionadas.

A equação de Boltzmann é válida para gases rarefeitos: gases sujeitos a pressões até a ordem de 100 atmosferas, pois, neste intervalo de pressão, a probabilidade de ocorrência de colisões ternárias é pequena em comparação com as colisões binárias. Também, para gases rarefeitos, as dimensões das partículas podem ser desconsideradas com relação ao livre caminho médio – distância média percorrida por uma molécula entre duas colisões consecutivas.

Em 1920, Enskog propôs duas modificações à equação de Boltzmann, formulando um modelo para gases moderadamente densos, as quais adotaremos neste trabalho (*veja referências [10], [11] e [20]*):

- (i) ainda considera-se desprezível a ocorrência de colisões ternárias, entretanto leva-se em conta um aumento na probabilidade de ocorrência de colisões binárias;

- (ii) as dimensões das partículas devem ser consideradas durante a colisão, pois, apesar de instantânea a transferência da quantidade de movimento e energia na colisão entre as moléculas, realiza-se à distância entre seus centros.

## EQUAÇÕES DE TRANSPORTE

As equações de balanço, correspondentes aos campos básicos, são obtidas da equação de transporte, a qual é derivada da equação de Enskog de uma maneira similar a empregada para os gases monoatômicos densos (*veja [18]*): ao multiplicarmos a equação de Enskog por uma função arbitrária  $\psi = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$  e integrarmos sobre todos os valores de  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{w}$  obtemos uma equação de balanço da densidade da quantidade arbitrária  $\psi$ , denominada *equação de transporte*.

Neste trabalho obteremos duas equações de transporte: na primeira, o fluxo e o termo de produção contêm apenas gradientes de primeira ordem de  $\psi$ , enquanto na segunda, contêm gradientes de até segunda ordem de  $\psi$ .

## MÉTODO DOS MOMENTOS

Na teoria cinética dos gases existem dois métodos que descrevem um estado macroscópico de um gás. Conhecidos na literatura como o método de Chapman e Enskog e o método dos momentos de Grad [13], diferem principalmente no número de campos básicos adotados. Na teoria de gases poliatômicos com spin, o método de Chapman e Enskog adota 8 campos escalares, enquanto o método de Grad expande para 29 campos básicos escalares, os quais são<sup>6</sup>:

Notação	Nome	Componentes	Chapman e Enskog
$\rho$	densidade	1	sim
$v_i$	velocidade linear	3	sim
T	temperatura	1	sim
$s_i$	velocidade de spin	3	sim
$p_{ij}$	tensor pressão cinético	6	não
$q_i$	fluxo de calor translacional cinético	3	não
$h_i$	fluxo de calor rotacional cinético	3	não
$m_{ij}$	fluxo de spin	9	não

Na termodinâmica, os métodos de Chapman e Enskog e o dos momentos de Grad correspondem respectivamente à termodinâmica usual e à termodinâmica estendida.

Desenvolvemos uma teoria cinética baseada no método dos momentos de Grad: a princípio uma teoria de 29 campos básicos e a seguir fazemos uma redução para 8 campos básicos escalares (densidade, velocidade, temperatura e velocidade de spin), obtendo os coeficientes de transporte através de um método iterativo semelhante ao proposto por Maxwell (*veja referência [15]*).

<sup>6</sup>As colunas Componentes e Chapman e Enskog referem-se respectivamente ao número componentes dos campos básicos e se o campo está presente no método de Chapman e Enskog.

## SOLUÇÕES

O sistema de equações de campo obtido é de grande complexidade e possui uma grande variedade de soluções<sup>7</sup>. Obtemos duas soluções linearizadas: a primeira, correspondendo a uma propagação de ondas harmônicas planas de pequenas amplitudes, ondas forçadas, (*vide [17]*) e a segunda correspondendo a uma propagação de ondas livres, (*veja [23]*) dadas em função dos oito modos hidrodinâmicos independentes.

## NOTAÇÃO CARTESIANA

Para os cálculos dos termos de produção, das equações de campo linearizadas, da iteração Maxwelliana e das propagações de ondas foram utilizados pacotes de computação algébrica *Musimp* e *Derive*.

Empregamos a convenção de soma de Einstein em conjunto com a notação Cartesiana para os tensores:

- (i) parênteses (colchetes) em torno dos índices, representam a parte simétrica (anti-simétrica) dos tensores em relação a esses índices

$$p_{(ij)} = \frac{1}{2!} (p_{ij} + p_{ji})$$

$$p_{[ij]} = \frac{1}{2!} (p_{ij} - p_{ji});$$

- (ii) parênteses ponteados em torno dos índices representam a parte simétrica dos tensores em relação a esses índices sem o traço (deviante do tensor)

$$p_{\langle ij \rangle} = p_{(ij)} - \frac{1}{3} p_{rr} \delta_{ij}$$

---

<sup>7</sup>Cada solução é denominada um processo termodinâmico.

## 2 COLISÃO BINÁRIA

A figura 2 mostra a colisão de duas moléculas eletricamente neutras, esféricas de diâmetro  $a$ , massa  $m$  e momento de inércia  $I$ . O vetor unitário  $\mathbf{k}$ , na direção da linha que une os centros das moléculas e no sentido do centro da molécula  $\beta$  ao centro da molécula  $\alpha$ , é denominado vetor de colisão.

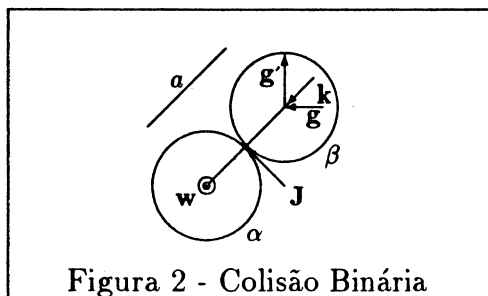


Figura 2 - Colisão Binária

Se  $\mathbf{c}$ ,  $\mathbf{c}^1$  e  $\mathbf{w}$ ,  $\mathbf{w}^1$  denotam, respectivamente, as velocidades lineares e angulares pré-colisionais das moléculas  $\alpha$  e  $\beta$  e, se  $\mathbf{c}'$ ,  $\mathbf{c}'^1$  e  $\mathbf{w}'$ ,  $\mathbf{w}'^1$  representarem as velocidades após o choque, podemos escrever as equações de impacto na forma<sup>8</sup>:

$$\begin{aligned} m \mathbf{c}' &= m \mathbf{c} - \mathbf{J}, \\ m \mathbf{c}'^1 &= m \mathbf{c}^1 + \mathbf{J}, \\ I \mathbf{w}' &= I \mathbf{w} + \frac{a}{2} \mathbf{k} \times \mathbf{J}, \\ I \mathbf{w}'^1 &= I \mathbf{w}^1 + \frac{a}{2} \mathbf{k} \times \mathbf{J}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde  $\mathbf{J}$  é o impulso exercido pela molécula  $\alpha$  sobre a molécula  $\beta$ . A velocidade relativa dos pontos das esferas que entram em contato antes da colisão será:

$$\mathbf{V} = \mathbf{c}^1 - \mathbf{c} - \frac{a}{2} \mathbf{k} \times \mathbf{w}^1 - \frac{a}{2} \mathbf{k} \times \mathbf{w}. \quad (2.2)$$

A velocidade relativa é revertida na colisão. Obtemos portanto, para  $\mathbf{V}$ , também a relação seguinte:

$$\mathbf{V} = \mathbf{c}' - \mathbf{c}'^1 + \frac{a}{2} \mathbf{k} \times \mathbf{w}'^1 + \frac{a}{2} \mathbf{k} \times \mathbf{w}'. \quad (2.3)$$

Ao adicionarmos as equações (2.2) e (2.3) e empregarmos as equações (2.1), teremos:

$$\mathbf{V} = -\frac{\mathbf{J}}{m} + \frac{1}{mK} [ (\mathbf{k} \cdot \mathbf{J}) \mathbf{k} - \mathbf{J} ]. \quad (2.4)$$

A quantidade  $K = \frac{4I}{ma^2}$ , denominada de momento de inércia adimensional, adquire, para a esfera, valores entre zero, quando a massa concentra-se totalmente no centro, e  $K = \frac{2}{3}$ , máximo valor, correspondente a uma concentração de massa na superfície. Para uma distribuição uniforme de massa  $K = \frac{2}{5}$ .

<sup>8</sup>Das duas primeiras equações temos a conservação do momento linear das moléculas, enquanto das outras duas, a conservação do momento angular

Tomando o produto interno da equação (2.4) com  $\mathbf{k}$  e substituindo o resultado na própria equação (2.4), encontramos uma expressão para o impulso  $\mathbf{J}$ :

$$\mathbf{J} = -\frac{mK}{K+1} \left[ \mathbf{V} + \frac{1}{K}(\mathbf{V} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k} \right]. \quad (2.5)$$

Substituindo agora as expressões da velocidade relativa dos pontos das esferas que entram em contato antes da colisão (2.4) e do impulso (2.5) nas equações (2.1) obtemos as expressões para as velocidades pós-colisionais em função das velocidades pré-colisionais no choque direto:

$$\mathbf{c}' = \mathbf{c} + \frac{K}{K+1} \left[ \mathbf{g} - \frac{a}{2} \mathbf{k} \times (\mathbf{w}^1 + \mathbf{w}) + \frac{1}{K} \mathbf{k} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \right]. \quad (2.6)$$

$$\mathbf{c}^{1'} = \mathbf{c}^1 - \frac{K}{K+1} \left[ \mathbf{g} - \frac{a}{2} \mathbf{k} \times (\mathbf{w}^1 + \mathbf{w}) + \frac{1}{K} \mathbf{k} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \right]. \quad (2.7)$$

$$\mathbf{w}' = \mathbf{w} - \frac{2}{a(K+1)} \left\{ \mathbf{k} \times \mathbf{g} - \frac{a}{2} \mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times (\mathbf{w}^1 + \mathbf{w})] \right\}. \quad (2.8)$$

$$\mathbf{w}^{1'} = \mathbf{w}^1 - \frac{2}{a(K+1)} \left\{ \mathbf{k} \times \mathbf{g} - \frac{a}{2} \mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times (\mathbf{w}^1 + \mathbf{w})] \right\}. \quad (2.9)$$

Introduzimos a velocidade relativa pré-colisional  $\mathbf{g} = \mathbf{c}^1 - \mathbf{c}$ .

Não existe um choque inverso, para o caso de moléculas esféricas rugosas, que corresponda a um choque direto. Para o choque com direção da linha dos centros  $-\mathbf{k}$  e velocidades finais  $\mathbf{c}$ ,  $\mathbf{c}^1$ ,  $\mathbf{w}$  e  $\mathbf{w}^1$  denotaremos por  $\mathbf{c}^*$ ,  $\mathbf{c}^{1*}$ ,  $\mathbf{w}^*$  e  $\mathbf{w}^{1*}$  as velocidades iniciais correspondentes<sup>9</sup>.

Se introduzirmos as notações  $\mathbf{g}^* = \mathbf{c}^{1*} - \mathbf{c}^*$  e  $\mathbf{k}^* = -\mathbf{k}$  as relações entre as velocidades com e sem asterisco terão a mesma forma de (2.6) a (2.9).

Ao subtrairmos a equação (2.6) da equação (2.7) e tomarmos o produto interno com  $\mathbf{k}$  para os sistemas linha e asterisco obtemos:

$$\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{g}' \cdot \mathbf{k}' = \mathbf{g}^* \cdot \mathbf{k}^*. \quad (2.10)$$

As equações (2.6) e (2.7) são válidas para  $I \neq 0$ . No limite em que  $I$  tende a zero,  $K$  também tende a zero e estas equações recaem nas equações válidas para esferas lisas, isto é, as velocidades lineares finais independem das velocidades angulares:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}' &= \mathbf{c} + \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}), \\ \mathbf{c}^{1'} &= \mathbf{c}^1 - \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Por outro lado, para um gás em equilíbrio, o princípio da equipartição de energia nos indica que:

$$\frac{1}{2} m \bar{c}^2 = \frac{1}{2} I \bar{\omega}^2 = \frac{1}{8} m K a^2 \bar{\omega}^2 = \frac{3}{2} k T.$$

Consequentemente, no limite em que  $K$  tende a zero,  $\mathbf{c}$  deve ser muito menor que  $a\mathbf{w}$  e as equações (2.8) e (2.9) reduzem-se a:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}' &= \mathbf{w} + 2 \mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times (\mathbf{w} + \mathbf{w}^1)], \\ \mathbf{w}^{1'} &= \mathbf{w}^1 + 2 \mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times (\mathbf{w} + \mathbf{w}^1)], \end{aligned} \quad (2.12)$$

isto é, as velocidades angulares finais independem das velocidades lineares. Concluimos que, no caso limite em que  $I$  tende a zero, a transferência de energia translacional em energia rotacional, e vice-versa, é praticamente inexistente.

<sup>9</sup>Denominado choque de restituição.

### 3 AS EQUAÇÕES DE TRANSPORTE

Neste capítulo obteremos duas equações de balanço de uma quantidade arbitrária  $\psi = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$ , chamadas de equações de transferência ou de transporte. A primeira contendo gradientes de primeira ordem de  $\psi$  será utilizada na teoria de 29 campos, enquanto a segunda, que conterà até gradientes de segunda ordem de  $\psi$  e produtos de gradientes, será utilizada para a obtenção das equações de balanço para a teoria de 8 campos básicos.

#### 3.1 A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN

O estado do gás poliatômico é caracterizado por uma função de distribuição  $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$ , tal que:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) \, d\mathbf{x}d\mathbf{c}d\mathbf{w}, \quad (3.1.1)$$

nos dá o número de moléculas que se encontram no elemento de volume entre  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ , com velocidade linear entre  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$  e com velocidade angular entre  $\mathbf{w}$  e  $\mathbf{w} + d\mathbf{w}$  no instante  $t$ .

O gás está sujeito a uma força externa específica  $\mathbf{F}$ , que, para nossos propósitos, independe da velocidade das moléculas.

Após um intervalo de tempo infinitesimal  $\Delta t$ , as moléculas ocuparão uma nova posição, caracterizada por  $x_i + c_i \Delta t$ ,  $c_i + F_i \Delta t$  e  $w_i$ . Portanto, podemos afirmar que o número de moléculas, no intervalo de tempo entre  $t$  e  $t + \Delta t$ , no elemento de volume entre  $\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t$  e  $(\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t) + d\mathbf{x}$ , com velocidade linear entre  $\mathbf{c} + \mathbf{F}\Delta t$  e  $(\mathbf{c} + \mathbf{F}\Delta t) + d\mathbf{c}$  e com velocidade angular<sup>10</sup> entre  $\mathbf{w}$  e  $\mathbf{w} + d\mathbf{w}$ , será:

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t, \mathbf{c} + \mathbf{F}\Delta t, \mathbf{w}, t + \Delta t) \, d\mathbf{x}d\mathbf{c}d\mathbf{w}. \quad (3.1.2)$$

O número de moléculas no elemento de volume do espaço de fase, representado por (3.1.1) e (3.1.2) seria igual se não houvesse colisões entre as moléculas. As colisões porém, alteram a densidade de número de moléculas que estão no elemento de volume  $d\mathbf{x} \, d\mathbf{c} \, d\mathbf{w}$ , fazendo com que certas moléculas deixem este elemento, enquanto que outras, provenientes de outros elementos de volume, podem entrar no mesmo. A mudança do número de moléculas é proporcional a  $d\mathbf{x}d\mathbf{c}d\mathbf{w}$  e escrevemos:

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t, \mathbf{c} + \mathbf{F}\Delta t, \mathbf{w}, t + \Delta t) \, d\mathbf{x}d\mathbf{c}d\mathbf{w} - f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) \, d\mathbf{x}d\mathbf{c}d\mathbf{w} = \mathcal{C} \, d\mathbf{x}d\mathbf{c}d\mathbf{w} \, \Delta t,$$

onde  $\mathcal{C}$  é a taxa de criação e destruição de pontos no espaço de fase.

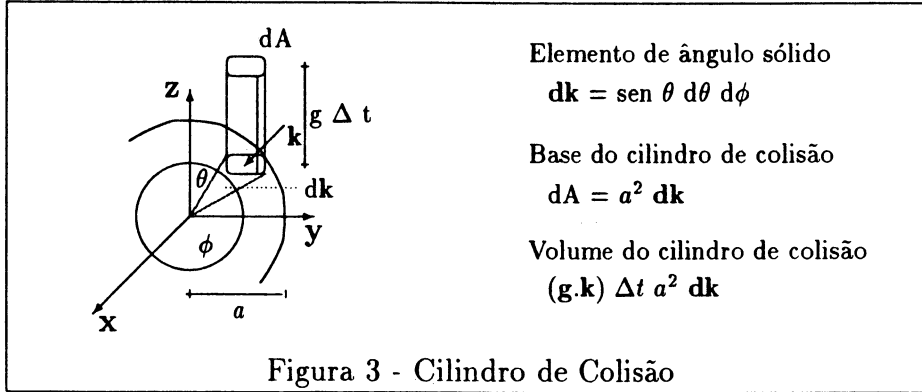
Se dividirmos por  $d\mathbf{x} \, d\mathbf{c} \, d\mathbf{w} \, \Delta t$  e passarmos ao limite quando  $\Delta t$  tende a zero, obtemos a equação de Boltzmann:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = \mathcal{C}. \quad (3.1.3)$$

Uma molécula  $\alpha$  (com velocidades entre  $(\mathbf{c}, \mathbf{w})$  e  $(\mathbf{c} + d\mathbf{c}, \mathbf{w} + d\mathbf{w})$ ) irá se chocar com um molécula  $\beta$  (com centro no cilindro de colisão e velocidades entre  $(\mathbf{c}^1, \mathbf{w}^1)$  e  $(\mathbf{c}^1 + d\mathbf{c}^1, \mathbf{w}^1 + d\mathbf{w}^1)$ ), se o seu centro estiver situado sobre a superfície de uma esfera de raio  $a$  (ver figura 3).

<sup>10</sup>Estamos considerando nulos os torques das forças externas.

Se antes da colisão, a direção da linha dos centros, das moléculas  $\alpha$  e das moléculas  $\beta$ , se encontra no intervalo entre  $\mathbf{k}$  e  $\mathbf{k} + d\mathbf{k}$ , podemos afirmar que no instante da colisão o centro da molécula  $\beta$  deve se encontrar sobre o elemento de superfície  $a^2 d\mathbf{k}$ .



O número de colisões entre as moléculas  $\alpha$ , que se encontram no elemento de volume  $d\mathbf{x}$ , e as moléculas  $\beta$ , que se encontram no cilindro de volume  $a^2 d\mathbf{k}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})\Delta t$  será:

$$[f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c} d\mathbf{w}] [f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^1, \mathbf{w}^1, t) a^2 d\mathbf{k}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \Delta t d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1]. \quad (3.1.4)$$

Se dividirmos a equação (3.1.4) por  $d\mathbf{x} \, d\mathbf{c} \, d\mathbf{w} \, \Delta t$  e integrarmos<sup>11</sup> sobre todas as velocidades  $\mathbf{c}^1$ ,  $\mathbf{w}^1$  e sobre todas as direções  $\mathbf{k}$  obteremos a densidade do número total de colisões por intervalo de tempo que anula pontos no espaço de fase com velocidades  $\mathbf{c}$ ,  $\mathbf{w}$  no elemento de espaço de fase  $d\mathbf{x} \, d\mathbf{c} \, d\mathbf{w}$ :

$$\mathcal{C}^- = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^1, \mathbf{w}^1, t) a^2 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1. \quad (3.1.5)$$

Por outro lado, a criação de pontos com velocidade  $(\mathbf{c}, \mathbf{w})$  no elemento de volume  $d\mathbf{x} \, d\mathbf{c} \, d\mathbf{w}$  resulta das colisões de moléculas cujas velocidades iniciais são  $\mathbf{c}^*$ ,  $\mathbf{c}^{1*}$ ,  $\mathbf{w}^*$  e  $\mathbf{w}^{1*}$ , as velocidades finais são  $\mathbf{c}$ ,  $\mathbf{c}^1$ ,  $\mathbf{w}$  e  $\mathbf{w}^1$ , e possuem direção das linhas dos centros  $\mathbf{k}^*$ . O número de colisões entre as moléculas  $\alpha$ , com velocidades entre  $(\mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*)$  e  $(\mathbf{c}^* + d\mathbf{c}^*, \mathbf{w}^* + d\mathbf{w}^*)$  e que se encontram em  $d\mathbf{x}$ , e as moléculas  $\beta$ , com velocidades entre  $(\mathbf{c}^{1*}, \mathbf{w}^{1*})$  e  $(\mathbf{c}^{1*} + d\mathbf{c}^{1*}, \mathbf{w}^{1*} + d\mathbf{w}^{1*})$ , que se encontram no cilindro de volume  $a^2 d\mathbf{k}^*(\mathbf{g}^* \cdot \mathbf{k}^*)\Delta t$  será:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c}^* d\mathbf{w}^* f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^{1*}, \mathbf{w}^{1*}, t) a^2 d\mathbf{k}^*(\mathbf{g}^* \cdot \mathbf{k}^*) \Delta t d\mathbf{c}^{1*} d\mathbf{w}^{1*}. \quad (3.1.6)$$

Devido a unitariedade do Jacobiano da transformação dos sistemas com e sem asterisco, é válida a relação:  $d\mathbf{c}^* d\mathbf{w}^* d\mathbf{c}^{1*} d\mathbf{w}^{1*} = d\mathbf{c} d\mathbf{w} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1$ .

Assim, o número de colisões de restituição será dado por<sup>12</sup>:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c} d\mathbf{w} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^{1*}, \mathbf{w}^{1*}, t) a^2 (\mathbf{g}^* \cdot \mathbf{k}^*) d\mathbf{k} \Delta t d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1. \quad (3.1.7)$$

<sup>11</sup>O símbolo de integral representa 8 integrais correspondentes a 3 componentes da velocidade linear e 3 componentes da velocidade angular, as quais variam de  $+\infty$  a  $-\infty$ , o ângulo  $\theta$  variando de 0 a  $\frac{\pi}{2}$  e o ângulo  $\phi$ , que varia de 0 a  $2\pi$

<sup>12</sup>O elemento de ângulo sólido  $d\mathbf{k} = \text{sen } \theta d\theta d\phi$  é o mesmo tanto na colisão direta como na colisão de restituição.

Se dividirmos agora a equação (3.1.7) por  $dx \, dc \, dw \, \Delta t$  e integrarmos sobre todas as velocidades  $\mathbf{c}^1 \mathbf{w}^1$  e sobre todas as direções  $\mathbf{k}$ , obtemos a densidade do número total de colisões que cria pontos no espaço de fase com velocidades  $\mathbf{c}$ ,  $\mathbf{w}$  no elemento de espaço de fase  $dx \, dc \, dw$ :

$$C^+ = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^{1*}, \mathbf{w}^{1*}, t) a^2 (\mathbf{g}^* \cdot \mathbf{k}^*) dk dc^1 dw^1. \quad (3.1.8)$$

A taxa de criação e destruição de pontos no espaço de fase pode ser escrita com base nas relações (3.1.5) e (3.1.8) e, fazendo-se uso da relação (2.10):

$$C = C^+ - C^- = \int (f^* f^{1*} - f f^1) a^2 d\mathbf{k} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) dc^1 dw^1. \quad (3.1.9)$$

Em (3.1.9) fez-se uso das abreviações :

$$\begin{aligned} f^* &= f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*, t), \\ f^{1*} &= f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^{1*}, \mathbf{w}^{1*}, t), \\ f &= f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t), \\ f^1 &= f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^1, \mathbf{w}^1, t). \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Finalmente, de (3.1.3) e (3.1.9) temos a equação de Boltzmann para gases poliátômicos rarefeitos

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = \int (f^* f^{1*} - f f^1) a^2 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) dk dc^1 dw^1. \quad (3.1.11)$$

## 3.2 O MODELO DE ENSKOG

Enskog introduziu as seguintes modificações para o termo de colisão da equação de Boltzmann para o caso de um gás moderadamente denso, onde o volume total das moléculas é comparável com o volume do gás<sup>13</sup>:

- i) As funções de distribuição devem ser avaliadas em pontos diferentes, pois na colisão os centros das moléculas estão separados por uma distância  $\pm a\mathbf{k}$ , onde  $a$  é o diâmetro da molécula e os sinais  $+$  e  $-$  referem-se às colisões cujas moléculas têm velocidades iniciais  $(\mathbf{c}^*, \mathbf{c}^{1*}, \mathbf{w}^*, \mathbf{w}^{1*})$  e  $(\mathbf{c}, \mathbf{c}^1, \mathbf{w}, \mathbf{w}^1)$ , respectivamente;
- ii) O produto das funções de distribuição deve ser multiplicado por uma função  $\chi$  pois há um aumento na probabilidade de ocorrência de colisões em gases densos. A função  $\chi$  deve ser avaliada no ponto de contato entre as duas esferas, isto é ,  $\chi = \chi(\mathbf{x} - \frac{a}{2}\mathbf{k}, t)$  na colisão direta e por  $\chi = \chi(\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{k}, t)$  na colisão de restituição.

Este modelo apresenta como vantagens, o fato de considerar desprezível a probabilidade de colisões múltiplas, bem como, instantâneas as colisões entre as moléculas.

<sup>13</sup>No gás rarefeito o volume das moléculas é desprezível.



Se fizermos as seguintes notações :

$$\begin{aligned}
\chi(\mathbf{x} - \frac{a}{2}\mathbf{k}) &= \chi(\mathbf{x} - \frac{a}{2}\mathbf{k}, t), \\
\chi(\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{k}) &= \chi(\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{k}, t), \\
f^*(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*, t), \\
f^{1*}(\mathbf{x} + a\mathbf{k}) &= f(\mathbf{x} + a\mathbf{k}, \mathbf{c}^{1*}, \mathbf{w}^{1*}, t), \\
f(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t), \\
f^1(\mathbf{x} - a\mathbf{k}) &= f(\mathbf{x} - a\mathbf{k}, \mathbf{c}^1, \mathbf{w}^1, t),
\end{aligned} \tag{3.2.1}$$

as taxas de destruição e criação de pontos, devido as modificações propostas por Enskog, podem ser reescritas:

$$C^- = \int \chi(\mathbf{x} - \frac{a}{2}\mathbf{k}) f(\mathbf{x}) f^1(\mathbf{x} - a\mathbf{k}) a^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1, \tag{3.2.2}$$

$$C^+ = \int \chi(\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{k}) f^*(\mathbf{x}) f^{1*}(\mathbf{x} + a\mathbf{k}) a^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1. \tag{3.2.3}$$

A partir do desenvolvimento das funções  $\chi$ ,  $f^1$  e  $f^{1*}$  em séries de Taylor em torno do ponto<sup>14</sup>  $\mathbf{x}$ , podemos escrever a *equação de Enskog*<sup>15</sup> na forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = \mathcal{J}^0(ff) + \mathcal{J}^1(ff) + \mathcal{J}^2(ff), \tag{3.2.4}$$

onde

$$\mathcal{J}^0(ff) = \chi \int (f^* f^{1*} - f f^1) a^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1, \tag{3.2.5}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}^1(ff) &= \chi a \int \left( f^* \frac{\partial f^{1*}}{\partial x_i} + f \frac{\partial f^1}{\partial x_i} \right) k_i a^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1 \\
&+ \frac{a}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \int (f^* f^{1*} + f f^1) k_i a^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1,
\end{aligned} \tag{3.2.6}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}^2(ff) &= \frac{a}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \int \left( f^* \frac{\partial f^{1*}}{\partial x_j} + f \frac{\partial f^1}{\partial x_j} \right) k_i k_j a^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1 \\
&+ \frac{a^2}{2} \chi \int \left( f^* \frac{\partial^2 f^{1*}}{\partial x_i \partial x_j} - f \frac{\partial^2 f^1}{\partial x_i \partial x_j} \right) k_i k_j a^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1 \\
&+ \frac{a^2}{8} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x_i \partial x_j} \int (f^* f^{1*} - f f^1) k_i k_j a^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}^1.
\end{aligned} \tag{3.2.7}$$

O termo de colisão foi dividido em três contribuições  $\mathcal{J}^0(ff)$ ,  $\mathcal{J}^1(ff)$  e  $\mathcal{J}^2(ff)$ . A primeira, com  $\chi = 1$ , é o termo usual da equação de Boltzmann para um gás rarefeito. As outras duas são correções do termo de colisão, que levam em consideração o fato do gás ser denso.  $\mathcal{J}^1(ff)$  contém somente gradientes de primeira ordem de  $\chi$  e das funções de distribuição e  $\mathcal{J}^2(ff)$  contém gradientes de segunda ordem e produtos de gradientes de primeira ordem de  $\chi$  e das funções de distribuição.

<sup>14</sup>Estamos considerando suaves estas funções na vizinhança do ponto  $\mathbf{x}$ .

<sup>15</sup>Estamos desprezando termos de ordem superior aos gradientes de segunda ordem de  $\chi$  e das funções de distribuição.

### 3.3 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE I

Para se obter a equação de transporte I, multiplicamos a equação de Enskog, considerando apenas os termos de colisão  $\mathcal{J}^0(ff)$  e  $\mathcal{J}^1(ff)$ , por uma função arbitraria  $\psi = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$  e integramos<sup>16</sup> sobre todos os valores de  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{w}$ :

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \psi d\mathbf{c}d\mathbf{w} + \int c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \psi d\mathbf{c}d\mathbf{w} + \int F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} \psi d\mathbf{c}d\mathbf{w} = \chi \int (f^* f^{1*} - f f^1) \psi d\Gamma \\ + \chi a \int \left( f^* \frac{\partial f^{1*}}{\partial x_i} + f \frac{\partial f^1}{\partial x_i} \right) \psi d\Gamma + \frac{a}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \int (f^* f^{1*} + f f^1) k_i \psi d\Gamma, \quad (3.3.1)$$

onde  $d\Gamma = a^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c} d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w} d\mathbf{w}^1$ .

Na análise do primeiro membro da equação (3.3.1) devemos considerar que a força externa independe da velocidade

$$\int \frac{\partial f}{\partial c_i} F_i \psi d\mathbf{c}d\mathbf{w} = \int \frac{\partial (f \psi F_i)}{\partial c_i} d\mathbf{c}d\mathbf{w} - \int \frac{\partial \psi}{\partial c_i} f F_i d\mathbf{c}d\mathbf{w} \quad (3.3.2)$$

e, com base no teorema da divergência,

$$\int \frac{\partial (f \psi F_i)}{\partial c_i} d\mathbf{c}d\mathbf{w} = \int \oint \psi f F_i n_i dS d\mathbf{w}, \quad (3.3.3)$$

onde  $n_i$  é o vetor unitário normal ao elemento de área,  $dS$ , do espaço das velocidades localizado no infinito.

A função distribuição decresce rapidamente para valores grandes da velocidade, assim, a integral fechada da equação (3.3.3) é nula e a equação (3.3.2) reduz-se a:

$$\int \frac{\partial f}{\partial c_i} F_i \psi d\mathbf{c}d\mathbf{w} = - \int \frac{\partial \psi}{\partial c_i} f F_i d\mathbf{c}d\mathbf{w}. \quad (3.3.4)$$

O primeiro membro da equação (3.3.1) pode, após alguns arranjos, ser reescrito na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi f d\mathbf{c}d\mathbf{w} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \int \psi f C_i d\mathbf{c}d\mathbf{w} + v_i \int \psi f d\mathbf{c}d\mathbf{w} \right] \\ - \int \left[ \frac{\partial \psi}{\partial t} + c_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right] f d\mathbf{c}d\mathbf{w} - \int F_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} f d\mathbf{c}d\mathbf{w}, \quad (3.3.5)$$

onde introduzimos a velocidade linear peculiar  $C_i = c_i - v_i$ .

No segundo membro da equação (3.3.1), estamos transformando os gradientes de  $\chi$ , de modo que temos apenas gradientes de  $\psi$  e das funções de distribuição. Se, nos termos cujas velocidades iniciais são  $\mathbf{c}^*$ ,  $\mathbf{c}^{1*}$ ,  $\mathbf{w}^*$  e  $\mathbf{w}^{1*}$ , trocarmos as velocidades iniciais por  $\mathbf{c}$ ,  $\mathbf{c}^1$ ,  $\mathbf{w}$  e  $\mathbf{w}^1$ , as velocidades finais serão  $\mathbf{c}'$ ,  $\mathbf{c}^{1'}$ ,  $\mathbf{w}'$  e  $\mathbf{w}^{1'}$ . Logo, o segundo membro da equação (3.3.1), assume a forma:

$$\chi \int \psi' f f^1 d\Gamma' - \chi \int \psi f f^1 d\Gamma + \chi a \int \psi' f \frac{\partial f^1}{\partial x_i} k_i d\Gamma' - \chi a \int \psi f \frac{\partial f^1}{\partial x_i} k_i d\Gamma \\ + \frac{a}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \int \psi' f f^1 k_i d\Gamma' - \frac{a}{2} \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \int \psi f f^1 k_i d\Gamma, \quad (3.3.6)$$

<sup>16</sup>No primeiro membro da equação de transporte, o símbolo de integral representa 6 integrais correspondentes a 3 componentes de cada velocidade  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{w}$  variando de  $-\infty$  a  $+\infty$ . No segundo membro desta equação, o símbolo de integral representa 14 integrais correspondentes a 3 componentes de cada velocidade  $\mathbf{c}$ ,  $\mathbf{c}^1$ ,  $\mathbf{w}$ ,  $\mathbf{w}^1$ , variando de  $-\infty$  a  $+\infty$ , o ângulo  $\theta$  variando de 0 a  $\frac{\pi}{2}$  e o ângulo  $\phi$ , que varia de 0 a  $2\pi$ .

onde utilizamos a notação

$$\begin{aligned}\psi &= \psi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t), \\ \psi' &= \psi(\mathbf{x}, \mathbf{c}', \mathbf{w}', t), \\ d\Gamma' &= a^2(\mathbf{g}' \cdot \mathbf{k}') d\mathbf{k} d\mathbf{c}' d\mathbf{c}^1 d\mathbf{w}' d\mathbf{w}^1.\end{aligned}$$

Com base na equação (2.10) e tendo em vista que o jacobiano da transformação (2.6) a (2.9) é unitário, prova-se que  $d\Gamma = d\Gamma'$ .

Finalmente, através das equações (3.3.1), (3.3.5) e (3.3.6), obtemos a equação de transporte I:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\Psi v_i + \Phi_i + \tilde{\Phi}_i) = S + P + \tilde{P}. \quad (3.3.7)$$

Em (3.3.7)  $\Psi$  é a densidade de uma quantidade aditiva arbitrária;  $\Phi_i$  é a sua densidade de fluxo devida ao fluxo de moléculas (parte cinética da densidade de fluxo);  $\tilde{\Phi}_i$ , a densidade de fluxo devida à transferência de choque (parte potencial da densidade de fluxo);  $S$ , densidade de suprimento relacionada com as forças externas e,  $P$  e  $\tilde{P}$  são termos de produção, dados através de:

$$\begin{aligned}\Psi &= \int \psi f d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \\ \Phi_i &= \int \psi C_i f d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \\ \tilde{\Phi}_i &= \frac{a}{2} \chi \int k_i (\psi' - \psi) f f^1 d\Gamma, \\ S &= \int F_i \frac{\partial \psi}{\partial c_i} f d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \\ P &= \int \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + c_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) f d\mathbf{c} d\mathbf{w} + \chi \int (\psi' - \psi) f f^1 d\Gamma, \\ \tilde{P} &= \frac{a}{2} \chi \int k_i (\psi' - \psi) f f^1 \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma + \frac{a}{2} \chi \int k_i \frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_i} f f^1 d\Gamma.\end{aligned} \quad (3.3.8)$$

Se trocarmos os papéis das moléculas que colidem, isto é, se trocarmos as velocidades iniciais  $(\mathbf{c}, \mathbf{c}', \mathbf{w}, \mathbf{w}')$  por  $(\mathbf{c}^1, \mathbf{c}^1', \mathbf{w}^1, \mathbf{w}^1')$  e o vetor de colisão  $\mathbf{k}$  por  $-\mathbf{k}$ , obtemos a relação :

$$\begin{aligned}\chi \int (\psi' - \psi) f f^1 d\Gamma &= \frac{1}{2} \chi \int (\psi' - \psi) f f^1 d\Gamma + \frac{1}{2} \chi \int (\psi' - \psi) f f^1 d\Gamma \\ &= \frac{1}{2} \chi \int (\psi' - \psi) f f^1 d\Gamma + \frac{1}{2} \chi \int (\psi^{1'} - \psi^1) f f^1 d\Gamma \\ &= \frac{1}{2} \chi \int (\psi' + \psi^{1'} - \psi - \psi^1) f f^1 d\Gamma\end{aligned} \quad (3.3.9)$$

Portanto, o termo de produção  $P$  pode ser escrito também na forma:

$$P = \int \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + c_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) f d\mathbf{c} d\mathbf{w} + \frac{1}{2} \chi \int (\psi' + \psi^{1'} - \psi - \psi^1) f f^1 d\Gamma. \quad (3.3.10)$$

Adotando o mesmo procedimento para o termo de produção  $\tilde{P}$  encontramos:

$$\begin{aligned}\tilde{P} &= \frac{a}{4} \chi \int k_i (\psi' + \psi^{1'} - \psi - \psi^1) f f^1 \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma \\ &+ \frac{a}{2} \chi \int k_i \frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_i} f f^1 d\Gamma.\end{aligned} \quad (3.3.11)$$

As quantidades  $\psi$  que obedecem a relação :

$$\psi' + \psi^1 - \psi - \psi^1 = 0, \quad (3.3.12)$$

são chamadas *invariantes de soma*. Estas quantidades são conservadas e portanto possuem produção nula ( $P + \tilde{P} = 0$ ). Em nosso caso, são invariantes de soma a massa, o momento linear, o momento angular e a energia total.

### 3.4 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE II

Se considerarmos agora o termo  $\mathcal{J}^2(ff)$  na equação de Enskog, multiplicarmos por uma quantidade arbitrária  $\psi = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$  e integrarmos sobre todos os valores de  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{w}$ , obtemos, após alguns arranjos, a equação de transporte II:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\Psi v_i + \Phi_i + \tilde{\Phi}_i + \tilde{\tilde{\Phi}}_i) = S + P + \tilde{P} + \tilde{\tilde{P}}, \quad (3.4.1)$$

onde

$$\begin{aligned} \tilde{\tilde{\Phi}}_i = & \frac{a^2}{4} \left[ \chi \int k_i k_j (\psi' - \psi) f f^1 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma + \chi \int k_i k_j f f^1 \frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_j} d\Gamma \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \int \chi k_i k_j f f^1 (\psi' - \psi) d\Gamma \right], \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\tilde{P}} = & \frac{a^2}{4} \left\{ \chi \int k_i k_j f f^1 \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) \frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_j} d\Gamma + \frac{\chi}{2} \int k_i k_j f f^1 \frac{\partial (\psi' - \psi)}{\partial x_i \partial x_j} d\Gamma \right. \\ & \left. - \chi \int k_i k_j \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f^1}{\partial x_j} (\psi' - \psi) d\Gamma + \frac{\chi}{2} \int k_i k_j \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2 f^1}{\partial x_i \partial x_j} \right) (\psi' - \psi) d\Gamma \right\}. \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

Na equação de transporte II (3.4.1) o fluxo total  $\Phi_i + \tilde{\Phi}_i + \tilde{\tilde{\Phi}}_i$  tem a mesma forma que o apresentado por Enskog [11] (equação 25). Se considerarmos  $\psi$  independente do vetor de posição  $\mathbf{x}$ , podemos obter, das equações acima, o fluxo total dado pela equação (16.4,1) do livro de Chapman & Cowling [3].

## 4 TEORIA CINÉTICA DE 29 CAMPOS

Nesta seção, desenvolveremos uma teoria cinética para um gás poliatômico denso, baseada no modelo proposto por Enskog [11] e no método dos momentos de Grad [13].

### 4.1 CAMPOS BÁSICOS

Caracterizamos o gás denso através dos campos escalares de densidade ( $\rho$ ); velocidade linear ( $v_i$ ); velocidade de spin ( $s_i$ )<sup>17</sup>; temperatura ( $T$ ); tensor pressão cinético ( $p_{ij}$ ); fluxo de calor translacional cinético ( $q_i$ ); fluxo de calor rotacional cinético ( $h_i$ ) e fluxo de spin cinético ( $m_{ij}$ ).

$$\rho = \int m f dcdw, \quad (4.1.1)$$

$$v_i = \frac{1}{\rho} \int m c_i f dcdw, \quad (4.1.2)$$

$$s_i = \frac{1}{\rho} \int m w_i f dcdw, \quad (4.1.3)$$

$$T = \frac{m}{3k\rho} \int \left( \frac{m}{2} C^2 + \frac{I}{2} \Omega^2 \right) f dcdw, \quad (4.1.4)$$

$$p_{ij} = \int m C_i C_j f dcdw, \quad (4.1.5)$$

$$q_i = \int \frac{m}{2} C^2 C_i f dcdw, \quad (4.1.6)$$

$$h_i = \int \frac{I}{2} \Omega^2 C_i f dcdw, \quad (4.1.7)$$

$$m_{ij} = \int m \Omega_i C_j f dcdw, \quad (4.1.8)$$

onde introduzimos a velocidade peculiar angular,  $\Omega_i = w_i - s_i$ .

### O CAMPO DE TEMPERATURA

Com base na energia cinética da partícula  $\left( \frac{mc^2}{2} + \frac{Iw^2}{2} \right)$  define-se a densidade de energia através da equação:

$$\rho u = \int \left( \frac{mc^2}{2} + \frac{Iw^2}{2} \right) f dcdw.$$

---

<sup>17</sup>Os quais são definidos com base nas quantidades microscópicas: massa da partícula  $m$ , momento linear  $mc_i$  e momento angular  $Iw_i$ , respectivamente.

Ao utilizarmos as definições  $C_i = c_i - v_i$  e  $\Omega_i = w_i - s_i$ , obtemos:

$$\rho u = \frac{1}{2}\rho v^2 + \frac{1}{2}\rho \frac{I}{m} s^2 + \rho \epsilon,$$

onde a densidade de energia interna é dada por:

$$\rho \epsilon = \int \left( \frac{mC^2}{2} + \frac{I\Omega^2}{2} \right) f dcdw.$$

Com base no princípio da equipartição de energia<sup>18</sup> é válida a relação:

$$\rho \epsilon = \frac{3k\rho T}{m}. \quad (4.1.9)$$

Assim o campo de temperatura é definido como:

$$T = \frac{m}{3k\rho} \int \left( \frac{mC^2}{2} + \frac{I\Omega^2}{2} \right) f dcdw.$$

## 4.2 EQUAÇÕES DE BALANÇO

Neste capítulo estamos interessados apenas no desenvolvimento de uma teoria linear com gradientes de primeira ordem dos campos básicos. Utilizaremos portanto a equação de transporte I na derivação das equações de balanço para os 29 campos escalares.

As equações abaixo foram obtidas a partir da equação (3.3.7) e das equações (3.3.8) ao tomarmos  $\psi$  igual a:

(i) **Balanço de massa** :  $\psi = m$ .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0. \quad (4.2.1)$$

(ii) **Balanço de momento linear** :  $\psi = mc_i$ .

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_i v_j + p_{ij} + \tilde{p}_{ij}) = F_i \rho, \quad (4.2.2)$$

onde

$$\tilde{p}_{ij} = \frac{a}{2} \int m \chi (c'_i - c_i) k_j f f^1 d\Gamma. \quad (4.2.3)$$

(iii) **Balanço do tensor pressão cinético**:  $\psi = mC_i C_j$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (v_k p_{ij} + p_{ijk} + \tilde{p}_{ijk}) + (p_{ik} + \tilde{p}_{ik}) \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \\ + (p_{jk} + \tilde{p}_{jk}) \frac{\partial v_i}{\partial x_k} = P_{ij} + \tilde{P}_{ij}, \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

<sup>18</sup>Não estamos considerando excitados os modos de vibração, temos portanto seis graus de liberdade.

onde

$$p_{ijk} = \int m C_i C_j C_k f dcdw, \quad (4.2.5)$$

$$\tilde{p}_{ijk} = \frac{a}{2} \int m \chi (C'_i C'_j - C_i C_j) k_k f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.6)$$

$$P_{ij} = \int m \chi (C'_i C'_j - C_i C_j) f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.7)$$

$$\tilde{P}_{ij} = \frac{a}{2} \int m \chi (C'_i C'_j - C_i C_j) k_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) f f^1 d\Gamma. \quad (4.2.8)$$

(iv) **Balanco do fluxo de calor translacional cinético** :  $\psi = \frac{m}{2} C^2 C_i$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (v_j q_i + q_{ij} + \tilde{q}_{ij}) + (q_j + \tilde{q}_j) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + (p_{ijk} + \tilde{p}_{ijk}) \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \\ - \frac{p_{ij}}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} (p_{jk} + \tilde{p}_{jk}) - \frac{p_{rr}}{2\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} (p_{ik} + \tilde{p}_{ik}) = Q_i + \tilde{Q}_i, \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

onde

$$q_{ij} = \int \frac{m}{2} C^2 C_i C_j f dcdw, \quad (4.2.10)$$

$$\tilde{q}_i = \frac{a}{2} \int m \chi \left( \frac{C'^2}{2} - \frac{C^2}{2} \right) k_i f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.11)$$

$$\tilde{q}_{ij} = \frac{a}{2} \int m \chi \left( \frac{C'^2 C'_i}{2} - \frac{C^2 C_i}{2} \right) k_j f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.12)$$

$$Q_i = \int m \chi \left( \frac{C'^2 C'_i}{2} - \frac{C^2 C_i}{2} \right) f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.13)$$

$$\tilde{Q}_i = \frac{a}{2} \int m \chi \left( \frac{C'^2 C'_i}{2} - \frac{C^2 C_i}{2} \right) k_j f f^1 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma. \quad (4.2.14)$$

(v) **Balanco da velocidade de spin**:  $\psi = m w_i$ .

$$\frac{\partial \rho s_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho s_i v_j + m_{ij} + \tilde{m}_{ij}) = M_i + \tilde{M}_i, \quad (4.2.15)$$

onde

$$\tilde{m}_{ij} = \frac{a}{2} \chi \int k_j m (w'_i - w_i) f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.16)$$

$$M_i = \int m \chi (w'_i - w_i) f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.17)$$

$$\tilde{M}_i = \frac{a}{2} \chi \int k_j m (w'_i - w_i) f f^1 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma. \quad (4.2.18)$$

(vi) **Balanco do fluxo de spin cinético:**  $\psi = m\Omega_i C_j$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (v_k m_{ij} + m_{ijk} + \tilde{m}_{ijk}) + (m_{ik} + \tilde{m}_{ik}) \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \\ + (p_{jk} + \tilde{p}_{jk}) \frac{\partial s_i}{\partial x_k} = M_{ij} + \tilde{M}_{ij}, \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

onde

$$m_{ijk} = \int m \Omega_i C_j C_k f dcdw, \quad (4.2.20)$$

$$\tilde{m}_{ijk} = \frac{a}{2} \int m \chi (\Omega'_i C'_j - \Omega_i C_j) k_k f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.21)$$

$$M_{ij} = \int m \chi (\Omega'_i C'_j - \Omega_i C_j) f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.22)$$

$$\tilde{M}_{ij} = \frac{a}{2} \int m \chi (\Omega'_i C'_j - \Omega_i C_j) k_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) f f^1 d\Gamma. \quad (4.2.23)$$

(vii) **Balanco de energia:**  $\psi = \frac{1}{2}(mc^2 + I\omega^2)$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{3k\rho T}{m} + \frac{v^2 \rho}{2} + \frac{I s^2 \rho}{m} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ q_i + \tilde{q}_i + h_i + \tilde{h}_i + (p_{ij} + \tilde{p}_{ij}) v_j \right. \\ \left. + \frac{I}{m} (m_{ij} + \tilde{m}_{ij}) s_j + \left( \frac{3k\rho T}{m} + \frac{v^2 \rho}{2} + \frac{I s^2 \rho}{m} \right) v_i \right] = F_i \rho v_i, \end{aligned} \quad (4.2.24)$$

onde

$$\tilde{h}_i = \frac{a}{2} \int I \chi \left( \frac{\Omega'^2}{2} - \frac{\Omega^2}{2} \right) k_i f f^1 d\Gamma. \quad (4.2.25)$$

(viii) **Balanco do fluxo de calor rotacional cinético:**  $\psi = \frac{I}{2} \Omega^2 C_i$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (v_j h_i + h_{ij} + \tilde{h}_{ij}) + (h_j + \tilde{h}_j) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{I}{m} (m_{kij} + \tilde{m}_{kij}) \frac{\partial s_k}{\partial x_j} \\ - \frac{I}{m} \frac{m_{ji}}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} (m_{jk} + \tilde{m}_{jk}) - \frac{3}{2} \left( \frac{kT}{m} - \frac{\tilde{\omega}}{\rho} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} (p_{ij} + \tilde{p}_{ij}) \\ = H_i + \tilde{H}_i - \frac{I}{m} \frac{m_{ji}}{\rho} (M_i + \tilde{M}_i), \end{aligned} \quad (4.2.26)$$

onde

$$h_{ij} = \int \frac{I}{2} \Omega^2 C_i C_j f dcdw, \quad (4.2.27)$$



$$\tilde{h}_{ij} = \frac{a}{2} \int m\chi \left( \frac{\Omega'^2 C'_i}{2} - \frac{\Omega^2 C_i}{2} \right) k_j f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.28)$$

$$H_i = \int I\chi \left( \frac{\Omega'^2 C'_i}{2} - \frac{\Omega^2 C_i}{2} \right) f f^1 d\Gamma, \quad (4.2.29)$$

$$\tilde{H}_i = \frac{a}{2} \int I\chi \left( \frac{\Omega'^2 C'_i}{2} - \frac{\Omega^2 C_i}{2} \right) k_j f f^1 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma, \quad (4.2.30)$$

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{3} p_{rr} - \frac{k}{m} \rho T = \frac{1}{3} \int m C^2 f dcdw - \frac{k}{m} \rho T, \quad (4.2.31)$$

$\tilde{\omega}$  é denominada pressão dinâmica.

Os termos, que se referem às contribuições da energia potencial (transferência devida às colisões) são encimados por um til. Os outros termos referem-se às contribuições da energia cinética (fluxos de moléculas).

Da análise do sistema de equações diferenciais constituídos pelas equações (4.2.1), (4.2.2), (4.2.4), (4.2.9), (4.2.15), (4.2.19), (4.2.19), (4.2.24) e (4.2.26), concluímos que este não pode ser ainda considerado como um sistema de equações de campo para os 29 campos básicos escalares, pois contém novas quantidades:  $\tilde{p}_{ij}$ ,  $p_{ijk}$ ,  $\tilde{p}_{ijk}$ ,  $P_{ij}$ ,  $\tilde{P}_{ij}$ ,  $\tilde{q}_i$ ,  $q_{ij}$ ,  $\tilde{q}_{ij}$ ,  $Q_i$ ,  $\tilde{Q}_i$ ,  $\tilde{m}_{ij}$ ,  $M_i$ ,  $\tilde{M}_i$ ,  $m_{ijk}$ ,  $\tilde{m}_{ijk}$ ,  $M_{ij}$ ,  $\tilde{M}_{ij}$ ,  $\tilde{h}_i$ ,  $h_{ij}$ ,  $\tilde{h}_{ij}$ ,  $H_i$  e  $\tilde{H}_i$ , chamadas termos constitutivos do sistema.

Para que o sistema referido se torne um sistema de equações de campo precisamos exprimir os termos constitutivos como funções dos campos básicos. Entretanto é necessário primeiramente determinar a função de distribuição, o que faremos a seguir. Na sequência determinaremos, os termos constitutivos.

### 4.3 A FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO

Nosso objetivo é determinar a função de distribuição perto do equilíbrio como uma função exponencial do tipo:

$$f = f_E(1 + \phi), \quad (4.3.1)$$

com  $f_E$  sendo uma Maxwelliana:

$$f_E = \frac{\rho}{m} \frac{(mI)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi kT)^3} \exp \left[ -\frac{m}{2kT} \left( C^2 + \frac{I}{m} \Omega^2 \right) \right], \quad (4.3.2)$$

e  $\phi$  o seu desvio, o qual vamos expandir em uma série de produtos das velocidades linear e angular:

$$\phi = a_i C_i + a_{ij} C_i C_j + a_{ijj} C^2 C_i + b_0 \Omega^2 + b_i \Omega_i + b_{ij} \Omega_i C_j + b_{ijj} \Omega^2 C_i. \quad (4.3.3)$$

Os termos do polinômio estão relacionados com os campos básicos. A introdução de outros termos daria origem a momentos da função distribuição não definidos como campos básicos, portanto, truncou-se a série.

Ao substituírmos (4.3.2) e (4.3.3) em (4.3.1) obtemos para a função de distribuição de velocidades:

$$f = \frac{\rho}{m} \frac{(mI)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi kT)^3} \exp \left[ -\frac{m}{2kT} \left( C^2 + \frac{I}{m} \Omega^2 \right) \right] \left( 1 + a_i C_i + a_{ij} C_i C_j + a_{ijj} C^2 C_i + b_0 \Omega^2 + b_i \Omega_i + b_{ij} \Omega_i C_j + b_{ijj} \Omega^2 C_i \right). \quad (4.3.4)$$

O tensor  $a_{ij}$  é simétrico e podemos decompô-lo em deviante e traço:

$$a_{ij} = a_{\langle ij \rangle} + \frac{1}{3} a_{rr} \delta_{ij}.$$

Ao substituírmos agora (4.3.4) nas definições dos campos básicos (4.1.1) a (4.1.8), e utilizarmos o valor da integral definida:

$$\int_0^\infty c^{2n} e^{-\alpha c^2} dc = \frac{\sqrt{\pi} (2n-1)!!}{2 \cdot 2^n} \alpha^{-(2n+1)/2}, \quad (4.3.5)$$

obtemos um sistema de equações cujas incógnitas são os coeficientes dos termos da série de produtos do desenvolvimento de  $\phi$ .

Matricialmente, podemos escrever este sistema na forma:

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{kT}{m} & 0 & 0 & 3\frac{kT}{I} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 5\frac{kT}{m} & 0 & 0 & 0 & 3\frac{kT}{I} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 7\frac{kT}{m} & 0 & 0 & 0 & 3\frac{kT}{I} \\ 0 & \frac{kT}{m} & 0 & 0 & 5\frac{kT}{I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 5\frac{kT}{m} & 0 & 0 & 0 & 5\frac{kT}{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_i \\ a_{rr} \\ a_{\langle ij \rangle} \\ a_{ijj} \\ b_0 \\ b_i \\ b_{ij} \\ b_{ijj} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\rho}{2} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 p_{\langle ij \rangle} \\ \frac{2\rho}{5} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 q_i \\ -\frac{m}{\rho kT} \tilde{\omega} \\ 0 \\ \frac{I}{\rho m} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 m_{ij} \\ \frac{2\rho}{3} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 h_i \end{pmatrix} \quad (4.3.6)$$

A resolução deste sistema nos fornece:

$$\begin{aligned} a_i &= -\frac{(h_i + q_i)}{\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2, \\ a_{ij} &= \left( \frac{p_{\langle ij \rangle} + \tilde{\omega} \delta_{ij}}{2\rho} \right) \left( \frac{m}{kT} \right)^2, \\ a_{ijj} &= \frac{q_i}{5\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^3, \\ b_0 &= -\frac{\tilde{\omega}}{2\rho} \frac{I}{m} \left( \frac{m}{kT} \right)^2, \\ b_i &= 0, \\ b_{ij} &= \frac{m_{ij}}{\rho} \frac{I}{m} \left( \frac{m}{kT} \right)^2, \\ b_{ijj} &= \frac{h_i}{3\rho} \frac{I}{m} \left( \frac{m}{kT} \right)^3. \end{aligned} \quad (4.3.7)$$

Finalmente, substituindo (4.3.7) em (4.3.4), obtemos a *função de distribuição de velocidades* para o gás poliatômico denso:

$$\begin{aligned}
f &= \frac{\rho}{m} \frac{(mI)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi kT)^3} \exp \left[ -\frac{m}{2kT} \left( C^2 + \frac{I}{m} \Omega^2 \right) \right] \left[ 1 + \frac{p_{\langle ij \rangle}}{2\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 C_i C_j \right. \\
&+ \frac{\tilde{\omega}}{2\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \left( C^2 - \frac{I}{m} \Omega^2 \right) + \frac{m_{ij}}{\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \frac{I}{m} \Omega_i C_j \\
&+ \left. \frac{q_i}{\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \left( \frac{mC^2}{5kT} - 1 \right) C_i + \frac{h_i}{\rho} \left( \frac{m}{kT} \right)^2 \left( \frac{I\Omega^2}{3kT} - 1 \right) C_i \right]. \quad (4.3.8)
\end{aligned}$$

De posse desta equação determinaremos a seguir os termos constitutivos da teoria.

#### 4.4 TERMOS CONSTITUTIVOS

Os termos constitutivos, que possuem a forma geral

$$p_{i_1 i_2 \dots i_n j_1 j_2 \dots j_n} = \int \mathcal{A}(m, I) C_{i_1} C_{i_2} \dots C_{i_n} \Omega_{i_1} \Omega_{i_2} \dots \Omega_{i_n} f \, d\mathbf{c} d\mathbf{w}$$

onde  $\mathcal{A}(m, I)$  é um funcional que independe das variáveis de integração), são denominados momentos da função distribuição e foram determinados substituindo-se a função de distribuição nas definições dos termos e integrando-se (com o uso das tabelas do apêndice A. Apresentamos a seguir os resultados:

$$p_{ijk} = \frac{2}{5} (q_i \delta_{jk} + q_j \delta_{ik} + q_k \delta_{ij}), \quad (4.4.1)$$

$$q_{ij} = \left[ \frac{5}{2} \rho \left( \frac{kT}{m} \right)^2 + 5\tilde{\omega} \left( \frac{kT}{m} \right) \right] \delta_{ij} + \frac{7}{2} p_{\langle ij \rangle} \left( \frac{kT}{m} \right), \quad (4.4.2)$$

$$m_{ijk} = 0, \quad (4.4.3)$$

$$h_{ij} = \frac{3}{2} \rho \left( \frac{kT}{m} \right)^2 \delta_{ij} + \frac{3}{2} p_{\langle ij \rangle} \left( \frac{kT}{m} \right). \quad (4.4.4)$$

Os termos constitutivos, que aparecem nas equações de balanço e que possuem a forma esquemática:

$$T_p = \int \mathcal{H}[a, I, m, \chi, \mathbf{k}, \mathbf{C}, \Omega, \mathbf{C}', \Omega'] \mathcal{F}(f, f^1) \, d\mathbf{k} \, d\mathbf{c} \, d\mathbf{w} \, d\mathbf{c}^1 \, d\mathbf{w}^1,$$

foram calculados em MUSIMP.  $\mathcal{H}$  é um funcional que possui uma parte constante  $(a, I, m, \chi)$  e outra parte que é função das velocidades lineares e angulares e  $\mathcal{F}$  é um funcional das funções de distribuição  $f$  e  $f^1$ .

Se introduzirmos a velocidade linear relativa  $\mathbf{g}$ , a velocidade linear do centro de massa  $\mathbf{G}$ , a velocidade angular relativa  $\mathbf{z}$  e a velocidade angular do centro de massa  $\mathbf{Z}$ , definidas por:

$$\begin{aligned}
\mathbf{g} &= \mathbf{c}^1 - \mathbf{c} = \mathbf{C}^1 - \mathbf{C}, \\
\mathbf{G} &= (\mathbf{C}^1 + \mathbf{C})/2, \\
\mathbf{z} &= \mathbf{w}^1 - \mathbf{w} = \Omega^1 - \Omega, \\
\mathbf{Z} &= (\Omega^1 + \Omega)/2, \quad (4.4.5)
\end{aligned}$$

É fácil provar, a partir das equações (4.4.5), que:

$$dc dw dc^1 dw^1 = dg dG dz dZ. \quad (4.4.6)$$

Com esta mudança de variáveis, os termos constitutivos passam a ter a seguinte forma genérica:

$$T_p = \int \mathcal{H}[a, I, m, \chi, \mathbf{k}, \mathbf{g}, \mathbf{G}, \mathbf{z}, \mathbf{Z}] \mathcal{F}(f, f^1) dk dg dG dz dZ,$$

e podem ser integrados.

O programa Musimp, listado no apêndice B, utiliza também as tabelas de integrais definidas no apêndice A. Com base nas definições destes termos, equações (4.2.3), (4.2.6), (4.2.7), (4.2.8), (4.2.11), (4.2.12), (4.2.13), (4.2.14), (4.2.16), (4.2.17), (4.2.18), (4.2.21), (4.2.22), (4.2.23), (4.2.25), (4.2.28), (4.2.29) e (4.2.30), obtemos os resultados:

$$\tilde{p}_{ij} = \chi \rho b \left\{ \left[ \frac{\rho k T}{m} + \tilde{\omega} \right] \delta_{ij} + \frac{(2+5K)}{5(1+K)} p_{\langle ij \rangle} - \frac{4}{B} \frac{\rho T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)} \frac{I}{m} \epsilon_{ijk} s_k \right\}, \quad (4.4.7)$$

$$\begin{aligned} \tilde{p}_{ijk} = & \chi \rho b \left\{ \frac{(9+10K)}{25(1+K)} \left[ \delta_{ik} q_j + \delta_{jk} q_i + \frac{(4+10K)}{(9+10K)} \delta_{ij} q_k \right] \right. \\ & \left. - \frac{4}{B} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)} \frac{I}{m} m_{r(i} \epsilon_{j)kr} \right\}, \end{aligned} \quad (4.4.8)$$

$$P_{ij} = \frac{A \chi \rho T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)^2} \left[ -\frac{32}{3} K \tilde{\omega} \delta_{ij} - \frac{8}{15} (6+13K) p_{\langle ij \rangle} \right], \quad (4.4.9)$$

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{ij} = & \chi \rho b \left\{ -\frac{4}{15} \frac{K}{(1+K)^2} \left( 2 \frac{\partial h_r}{\partial x_r} \delta_{ij} - \frac{\partial h_{(i}}{\partial x_{j)}} \right) + \frac{6}{5(1+K)} \frac{\rho k T}{m} \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} \right. \\ & + \frac{4}{5} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \frac{(3+K)}{(1+K)^2} \frac{I}{m} \left[ \frac{(6K-2)}{(3+K)} \frac{\partial m_{r(i}}{\partial x_s} \epsilon_{j)sr} + \frac{\partial m_{rs}}{\partial x_{(i}} \epsilon_{j)sr} \right] \\ & \left. + \frac{2}{25} \frac{(3+K)}{(1+K)^2} \left[ \frac{(3K-1)}{(3+K)} \frac{\partial q_r}{\partial x_r} \delta_{ij} + \frac{\partial q_{(i}}{\partial x_{j)}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.4.10)$$

$$\tilde{q}_i = \frac{1}{2} \tilde{p}_{jji} = \chi \rho b \left[ \frac{(3+5K)}{5(1+K)} q_i - \frac{2}{(1+K)} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \frac{I}{m} \epsilon_{ijk} m_{jk} \right], \quad (4.4.11)$$

$$\begin{aligned} \tilde{q}_{ij} = & \chi \rho b \left( \frac{kT}{m} \right) \left\{ \left[ \frac{5}{2} \frac{kT}{\rho m} + \frac{(5K^2+8K+5)}{(1+K)^2} \tilde{\omega} \right] \delta_{ij} \right. \\ & \left. + \frac{(35K^2+54K+17)}{10(1+K)^2} p_{\langle ij \rangle} - \frac{11}{B(1+K)} \frac{I}{m} \rho T^{\frac{1}{2}} \epsilon_{ijk} s_k \right\}, \end{aligned} \quad (4.4.12)$$

$$Q_i = \frac{\chi \rho A T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)^2} \left[ -\frac{8}{15} (4+17K) q_i + \frac{40}{9} K h_i \right], \quad (4.4.13)$$

$$\tilde{Q}_i = \frac{\chi\rho b}{(1+K)} \left( \frac{kT}{m} \right) \left\{ \frac{k\rho}{m} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \left[ \frac{1}{10} \frac{\partial p_{\langle ir \rangle}}{\partial x_r} + \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_i} \right] \right\}, \quad (4.4.14)$$

$$\tilde{m}_{ij} = 0, \quad (4.4.15)$$

$$M_i = -\frac{16}{3} \chi A \rho^2 \frac{T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)} s_i, \quad (4.4.16)$$

$$\begin{aligned} \tilde{M}_i = & \chi\rho b \left\{ \frac{4\rho T^{\frac{1}{2}}}{B(1+K)} \epsilon_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \right. \\ & \left. + \frac{1}{5(1+K)} \left[ 3 \frac{\partial m_{\langle ir \rangle}}{\partial x_r} + 5 \frac{\partial m_{[ir]}}{\partial x_r} + \frac{4}{3} \frac{A}{bT^{\frac{1}{2}}} \frac{m}{k} \epsilon_{ijk} \frac{\partial q_k}{\partial x_j} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.4.17)$$

$$\begin{aligned} \tilde{m}_{ijk} = & \frac{\chi\rho b}{(1+K)} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \left\{ \frac{4(1-3K)}{5(1+K)} \left[ \epsilon_{ikr} p_{\langle jr \rangle} - \frac{(3+K)}{(2-6K)} \epsilon_{ijr} p_{\langle kr \rangle} \right] \right. \\ & \left. + \frac{BT^{\frac{1}{2}}}{5} \frac{k}{m} (s_j \delta_{ik} - 4s_i \delta_{jk} + s_k \delta_{ij}) + 4 \frac{(K-1)}{(K+1)} \tilde{\omega} \epsilon_{ijk} \right\}, \end{aligned} \quad (4.4.18)$$

$$M_{ij} = \chi A \rho \left[ \frac{2}{9} \frac{K}{(K+1)} B \frac{m}{I} \epsilon_{ijk} h_k - \frac{16}{3} T^{\frac{1}{2}} m_{ij} \right], \quad (4.4.19)$$

$$\tilde{M}_{ij} = \chi\rho b \left[ \frac{k}{m} \rho T \frac{\partial s_i}{\partial x_j} + \frac{2T^{\frac{1}{2}}}{B(1+K)} \left( \epsilon_{irs} \frac{\partial p_{\langle js \rangle}}{\partial x_r} - 2 \frac{k}{m} \rho \epsilon_{ijk} \frac{\partial T}{\partial x_k} \right) \right], \quad (4.4.20)$$

$$\tilde{h}_i = \frac{\chi\rho b}{(K+1)} \left( \frac{2}{3} h_i - 2 \frac{I}{m} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \epsilon_{ijk} m_{jk} \right), \quad (4.4.21)$$

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{ij} = & \chi\rho b \left( \frac{kT}{m} \right) \left\{ \left[ \frac{3}{2} \frac{kT}{m} \rho + \frac{2K}{(K+1)^2} \tilde{\omega} \right] \delta_{ij} - \frac{6\rho T^{\frac{1}{2}}}{B(K+1)} \frac{I}{m} \epsilon_{ijk} s_k \right. \\ & \left. + \frac{(15K^2 + 19K + 6)}{10(K+1)^2} p_{\langle ij \rangle} \right\}, \end{aligned} \quad (4.4.22)$$

$$H_i = \frac{\chi A \rho T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)^2} \left[ \frac{8}{3} K q_i - \frac{8}{3} (1+2K+2K^2) h_i + \frac{4}{3} \frac{\pi I T^{\frac{1}{2}}}{mB} (1+K) \epsilon_{ijk} m_{kj} \right] \quad (4.4.23)$$

$$\tilde{H}_i = \chi\rho b \left( \frac{kT}{m} \right) \frac{(1+3K)}{2(1+K)} \left[ \frac{k}{m} \rho \frac{\partial T}{\partial x_i} - \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_i} \right]. \quad (4.4.24)$$

No cálculo de  $\tilde{P}_{ij}$ ,  $\tilde{Q}_i$ ,  $\tilde{M}_i$ ,  $\tilde{M}_{ij}$  e  $H_i$  foram considerados somente termos lineares em  $\frac{\partial \rho}{\partial x_i}$ ,  $\frac{\partial T}{\partial x_i}$ ,  $v_i$ ,  $p_{\langle ij \rangle}$ ,  $\tilde{\omega}$ ,  $q_i$ ,  $h_i$ ,  $s_i$ ,  $m_{ij}$  e suas derivadas. No termo  $\tilde{h}_{ij}$ , uma "function" de tratamento de produtos de tensores de permutação foi executada antes da "function" INTEGRAL, de forma que as integrações em  $\mathbf{k}$  e  $\mathbf{g}$  ficassem dentro da abrangência da "function" INTGK.

As equações (4.4.7) a (4.4.24) indicam serem os tensores  $\tilde{p}_{ij}$ ,  $\tilde{p}_{ijk}$ ,  $\tilde{q}_{ij}$ ,  $\tilde{m}_{ijk}$ ,  $M_{ij}$ ,  $\tilde{h}_{ij}$  assimétricos. Nestas equações utilizou-se as notações:

$$A = \frac{a^2}{m} \left( \frac{k\pi}{m} \right)^{1/2}; \quad B = a \left( \frac{m\pi}{k} \right)^{1/2}; \quad b = \frac{2}{3} \frac{\pi a^3}{m}.$$

## 4.5 AS EQUAÇÕES DE CAMPO LINEARIZADAS

Um sistema de equações de campo para os campos básicos, (4.1.1) a (4.1.8), é obtido através da substituição dos termos constitutivos da teoria (equações (4.4.1) a (4.4.24)) nas equações de balanço: (4.2.1), (4.2.2), (4.2.4), (4.2.9), (4.2.15), (4.2.19), (4.2.19), (4.2.24) e (4.2.26).

Escrevemos abaixo este sistema de equações de campo linearizado com relação à  $\frac{\partial \rho}{\partial x_i}$ ,  $\frac{\partial T}{\partial x_i}$ ,  $v_i$ ,  $p_{\langle ij \rangle}$ ,  $\tilde{\omega}$ ,  $q_i$ ,  $h_i$ ,  $s_i$ ,  $m_{ij}$  e suas derivadas:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i}, \quad (4.5.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \frac{T}{3} (\chi \rho b + 1) + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \left( \frac{m}{3k\rho} \right) \left[ 1 + \chi \rho b \frac{(5K+3)}{5(K+1)} \right] \\ + \frac{\partial h_i}{\partial x_i} \left( \frac{m}{3k\rho} \right) \left[ 1 + \frac{2\chi \rho b}{3(K+1)} \right] - \frac{4}{3} \frac{\chi \rho b}{(K+1)} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \frac{I}{k\rho} \epsilon_{ijk} \frac{\partial m_{jk}}{\partial x_i} = 0, \end{aligned} \quad (4.5.2)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{k\rho}{m} (\chi \rho b + 1) \frac{\partial T}{\partial x_i} + \frac{kT}{m} \left( 1 + 2\chi \rho b + \rho^2 b \frac{\partial \chi}{\partial \rho} \right) \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + (\chi \rho b + 1) \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_i} \\ + \left[ 1 + \chi \rho b \frac{(5K+2)}{5(K+1)} \right] \frac{\partial p_{\langle ij \rangle}}{\partial x_j} - \frac{4}{B} \frac{\rho T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)} \chi \rho b \frac{I}{m} \epsilon_{ijk} \frac{\partial s_k}{\partial x_j} = \rho F_i, \end{aligned} \quad (4.5.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial t} + \frac{1}{3} \left[ 1 + \frac{(3+4K+5K^2)}{5(1+K)^2} \chi \rho b \right] \frac{\partial q_r}{\partial x_r} - \frac{1}{3} \left[ 1 - \frac{2(K-1)}{3(1+K)^2} \chi \rho b \right] \frac{\partial h_r}{\partial x_r} \\ - \frac{4}{3} \chi \rho b \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \frac{I}{m} \frac{(K-1)}{(K+1)^2} \frac{\partial m_{jk}}{\partial x_i} \epsilon_{ijk} + \frac{1}{3} \frac{kT\rho}{m} (1 + \chi \rho b) \frac{\partial v_r}{\partial x_r} \\ = -\frac{32}{3} \frac{K}{(1+K)^2} \chi A \rho T^{\frac{1}{2}} \tilde{\omega}, \end{aligned} \quad (4.5.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_{\langle ij \rangle}}{\partial t} + \frac{4}{5} \left[ 1 + \frac{(3+9K+5K^2)}{5(1+K)^2} \chi \rho b \right] \frac{\partial q_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} - \frac{4}{15} \frac{K}{(1+K)^2} \chi \rho b \frac{\partial h_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} \\ - \frac{4}{5} \chi \rho b \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \frac{I}{m} \frac{(3+K)}{(1+K)^2} \left[ \frac{(3+11K)}{(3+K)} \frac{\partial m_{r\langle i}}{\partial x_s} \epsilon_{j \rangle sr} + \frac{\partial m_{rs}}{\partial x_{\langle i}} \epsilon_{j \rangle sr} \right] \\ + 2 \frac{kT\rho}{m} \left[ 1 + \frac{(2+5K)}{5(1+K)} \chi \rho b \right] \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} = -\frac{8}{15} \frac{(6+13K)}{(1+K)^2} \chi A \rho T^{\frac{1}{2}} p_{\langle ij \rangle}, \end{aligned} \quad (4.5.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{5}{2} \left( \frac{k}{m} \right)^2 \rho T \left[ 1 + \frac{(3+5K)}{5(1+K)} \chi \rho b \right] \frac{\partial T}{\partial x_i} - \frac{kI\rho}{m^2} \frac{T^{\frac{3}{2}} \chi \rho b}{B(1+K)} \epsilon_{ijk} \frac{\partial s_k}{\partial x_j} \\ + \frac{5}{2} \frac{kT}{m} \left[ 1 + \frac{(3+4K+5K^2)}{5(1+K)^2} \chi \rho b \right] \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_i} + \frac{kT}{m} \left[ 1 + \frac{(5K^2+9K+3)}{5(1+K)^2} \chi \rho b \right] \frac{\partial p_{\langle ij \rangle}}{\partial x_j} \\ = \frac{\chi A \rho T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)^2} \left[ -\frac{8}{15} (4+17K) q_i + \frac{40}{9} K h_i \right], \end{aligned} \quad (4.5.6)$$

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\partial s_i}{\partial t} & - \frac{4}{BT^{\frac{1}{2}}} \frac{m}{k} \frac{\chi \rho b}{(K+1)} \left[ \frac{kT\rho}{m} \epsilon_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j} + \frac{1}{10} \epsilon_{ijk} \frac{\partial q_k}{\partial x_j} \right] \\
& + \left[ 1 - \frac{3}{5(1+K)} \chi \rho b \right] \frac{\partial m_{\langle ij \rangle}}{\partial x_r} + \left[ 1 - \frac{\chi \rho b}{(1+K)} \right] \frac{\partial m_{[ir]}}{\partial x_r} \\
& + \frac{1}{3} \frac{\partial m_{rr}}{\partial x_i} = -\frac{16}{3} \frac{\chi A \rho^2 T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)} s_i, \tag{4.5.7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial m_{ij}}{\partial t} & + \frac{kT\rho}{m} \left\{ \frac{\partial s_r}{\partial x_r} \frac{\delta_{ij}}{3} + \left[ 1 - \frac{3}{5(1+K)} \chi \rho b \right] \frac{\partial s_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} + \left[ 1 - \frac{\chi \rho b}{(1+K)} \right] \frac{\partial s_{[i}}{\partial x_{j]}} \right\} \\
& + \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \frac{4\chi \rho b}{(1+K)} \left[ \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_k} \epsilon_{ijk} \frac{(K-1)}{(K+1)} + \frac{k\rho}{m} \epsilon_{ijk} \frac{\partial T}{\partial x_k} - \frac{\partial p_{\langle jk \rangle}}{\partial x_r} \epsilon_{irk} \frac{(11K+3)}{10(K+1)} \right. \\
& \left. - \frac{\partial p_{\langle kr \rangle}}{\partial x_k} \epsilon_{ijr} \frac{(K+3)}{10(K+1)} \right] = \chi \rho b \left[ \frac{1}{3} \frac{K}{(K+1)} \frac{m}{I} \epsilon_{ijk} h_k - 8 \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} m_{ij} \right], \tag{4.5.8}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial h_i}{\partial t} & - \frac{kT}{m} \chi \rho b \frac{K}{5(K+1)^2} \frac{\partial p_{\langle ij \rangle}}{\partial x_j} + \left( \frac{k}{m} \right)^2 \rho T \left[ \frac{3}{2} + \frac{\chi \rho b}{(1+K)} \right] \frac{\partial T}{\partial x_i} \\
& - \frac{3kT}{2m} \left[ 1 - \frac{2(K-1)}{3(K+1)^2} \chi \rho b \right] \frac{\partial \tilde{\omega}}{\partial x_i} = \left( \frac{kT}{m} \right) \frac{K\chi \rho b}{2(K+1)} \epsilon_{ijk} m_{kj} \\
& + \frac{\chi A \rho T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)^2} \left[ \frac{8}{3} K q_i - \frac{8}{3} (1+2K+2K^2) h_i \right], \tag{4.5.9}
\end{aligned}$$

As soluções do sistema de equações diferenciais (4.5.1) a (4.5.9) são denominadas de *processos termodinâmicos*.

## 5 TEORIA CINÉTICA DE 8 CAMPOS

Desenvolveremos, nesta seção, uma teoria cinética de oito campos escalares: densidade, velocidade linear, temperatura e velocidade de spin.

Neste caso, o tensor pressão, o fluxo de spin e os fluxos de calor translacional e rotacional são considerados termos constitutivos, que dependem dos oito campos básicos. Sendo a função de distribuição definida em termos destes campos, não podemos obtê-los através da substituição da função de distribuição e integração, pois teríamos uma identidade. O método utilizado, consiste em um processo iterativo semelhante ao empregado por Maxwell (*vide referência [15]*), o qual será descrito na terceira seção deste capítulo.

### 5.1 CAMPOS BÁSICOS

Nesta teoria, o gás denso poliatômico, será caracterizado pelos campos de densidade,

$$\rho = \int m f dcdw, \quad (5.1.1)$$

velocidade linear,

$$v_i = \frac{1}{\rho} \int m c_i f dcdw, \quad (5.1.2)$$

temperatura,

$$T = \frac{m}{3k\rho} \int \left( \frac{m}{2} C^2 + \frac{I}{2} \Omega^2 \right) f dcdw \quad (5.1.3)$$

e velocidade de spin,

$$s_i = \frac{1}{\rho} \int m w_i f dcdw. \quad (5.1.4)$$

### 5.2 EQUAÇÕES DE BALANÇO

Em geral, em uma teoria linear, os termos constitutivos são expressos como funções dos campos básicos e de seus gradientes. Iremos utilizar, portanto, a equação de transporte II, pois os fluxos que ocorrem nas equações de balanço devem conter termos proporcionais aos gradientes dos campos básicos. As equações de balanço são obtidas a partir da equação (3.4.1), fazendo-se  $\psi = m$ ,  $mc_i$ ,  $mw_i$  e  $(mc^2 + I\omega^2)/2$ .

(i) Balanço de massa :  $\psi = m$ .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0. \quad (5.2.1)$$

(ii) Balanço de momento linear :  $\psi = mc_i$ .

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_i v_j + p_{ij} + \tilde{p}_{ij} + \tilde{\tilde{p}}_{ij}) = F_i \rho, \quad (5.2.2)$$



onde

$$\tilde{p}_{ij} = \frac{a^2}{4} \int \chi m k_j k_k (c'_i - c_i) f f^1 \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma. \quad (5.2.3)$$

(iii) **Balço da velocidade de spin:**  $\psi = m w_i$ .

$$\frac{\partial \rho s_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho s_i v_j + m_{ij} + \tilde{m}_{ij} + \tilde{m}_{ij}) = M_i + \tilde{M}_i + \tilde{M}_i, \quad (5.2.4)$$

onde

$$\begin{aligned} \tilde{m}_{ij} &= \frac{a^2}{4} \int \chi m k_j k_k (w'_i - w_i) f f^1 \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma \\ &\quad - \frac{a^2}{8} \frac{\partial}{\partial x_k} \int \chi m k_j k_k (w'_i - w_i) f f^1 d\Gamma, \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

$$\begin{aligned} \tilde{M}_i &= \frac{a^2}{8} \int \chi m k_j k_k (w'_i - w_i) \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k} f^1 + f \frac{\partial^2 f^1}{\partial x_j \partial x_k} \right) d\Gamma \\ &\quad - \frac{a^2}{4} \int \chi m k_j k_k (w'_i - w_i) \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial f^1}{\partial x_k} d\Gamma. \end{aligned} \quad (5.2.6)$$

(iv) **Balço de energia:**  $\psi = \frac{1}{2}(m c^2 + I \omega^2)$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{3k\rho T}{m} + \frac{v^2 \rho}{2} + \frac{I s^2 \rho}{m} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ q_i + \tilde{q}_i + \tilde{q}_i + h_i + \tilde{h}_i + \tilde{h}_i \right. \\ \left. + (p_{ij} + \tilde{p}_{ij} + \tilde{p}_{ij}) v_j + \frac{I}{m} (m_{ij} + \tilde{m}_{ij} + \tilde{m}_{ij}) s_j \right. \\ \left. + \left( \frac{3k\rho T}{m} + \frac{v^2 \rho}{2} + \frac{I s^2 \rho}{m} \right) v_i \right] = F_i \rho v_i, \end{aligned} \quad (5.2.7)$$

onde

$$\tilde{q}_i = \frac{a^2}{4} \int \chi m k_i k_j \left( \frac{C'^2}{2} - \frac{C^2}{2} \right) f f^1 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma. \quad (5.2.8)$$

$$\tilde{h}_i = \frac{a^2}{4} \int \chi I k_i k_j \left( \frac{\Omega'^2}{2} - \frac{\Omega^2}{2} \right) f f^1 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \ln \frac{f}{f^1} \right) d\Gamma. \quad (5.2.9)$$

### 5.3 TERMOS CONSTITUTIVOS

O sistema de equações, da seção anterior, ainda não pode ser considerado como um sistema de equações de campo, pois contém os termos:  $p_{ij}$ ,  $\tilde{p}_{ij}$ ,  $m_{ij}$ ,  $\tilde{m}_{ij}$ ,  $\tilde{m}_{ij}$ ,  $M_i$ ,  $\tilde{M}_i$ ,  $\tilde{M}_i$ ,  $q_i$ ,  $\tilde{q}_i$ ,  $\tilde{q}_i$ ,  $h_i$ ,  $\tilde{h}_i$  e  $\tilde{h}_i$ , que devem ser expressos em função dos campos básicos.

Os termos  $\tilde{p}_{ij}$ ,  $\tilde{m}_{ij}$ ,  $M_i$ ,  $\tilde{M}_i$ ,  $\tilde{q}_i$  e  $\tilde{h}_i$ , que aparecem também na teoria de 29 campos, serão aqui reescritos.

O termo  $\tilde{M}_i$  será truncado com relação aos gradientes do fluxo de calor e do fluxo de spin cinético<sup>19</sup>, pois não estamos interessados em obter equações constitutivas em que participem segundos gradientes dos campos básicos:

$$\tilde{p}_{ij} = \chi \rho b \left[ \left( \frac{\rho k T}{m} + \tilde{\omega} \right) \delta_{ij} + \frac{(2+5K)}{5(1+K)} p_{\langle ij \rangle} - \frac{4}{B} \frac{\rho T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)} \frac{I}{m} \epsilon_{ijk} s_k \right], \quad (5.3.1)$$

$$\tilde{q}_i = \chi \rho b \left[ \frac{(3+5K)}{5(1+K)} q_i - \frac{2}{(1+K)} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \frac{I}{m} \epsilon_{ijk} m_{jk} \right], \quad (5.3.2)$$

$$\tilde{m}_{ij} = 0, \quad (5.3.3)$$

$$M_i = -\frac{16}{3} \chi A \rho^2 \frac{T^{\frac{1}{2}}}{(1+K)} s_i, \quad (5.3.4)$$

$$\tilde{M}_i = \chi \rho b \frac{4T^{\frac{1}{2}} \rho}{B(1+K)} \epsilon_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j}, \quad (5.3.5)$$

$$\tilde{h}_i = \frac{\chi \rho b}{(K+1)} \left( \frac{2}{3} h_i - 2 \frac{I}{m} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{B} \epsilon_{ijk} m_{jk} \right). \quad (5.3.6)$$

Os termos constitutivos encimados por duplo til referem-se (assim como os encimados por um único til) às contribuições da energia potencial. No cálculo destes termos, em MUSIMP, o funcional das funções distribuição foi truncado com relação aos gradientes do tensor pressão, da pressão dinâmica, do fluxo de spin cinético e dos fluxos de calor translacional e rotacional (*functions ffIII e DffII*), pois, novamente aqui, não estamos interessados em obter equações constitutivas em que participem segundos gradientes dos campos básicos. Descrevemos os resultados:

$$\tilde{\tilde{p}}_{ij} = -\frac{(\chi \rho b)^2 T^{\frac{1}{2}} k}{\pi \chi A m} \left[ \frac{\partial v_r}{\partial x_r} \delta_{ij} + \frac{(12+21K)}{10(1+K)} \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} + \frac{3K}{2(1+K)} \frac{\partial v_{[i}}{\partial x_{j]}} \right], \quad (5.3.7)$$

$$\tilde{\tilde{m}}_{ij} = \frac{3(\chi \rho b)^2 T^{\frac{1}{2}} k}{4 \pi \chi A m (1+K)} \left[ \frac{3}{5} \frac{\partial s_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} + \frac{\partial s_{[i}}{\partial x_{j]}} \right], \quad (5.3.8)$$

$$\tilde{\tilde{q}}_i = -\frac{(\chi \rho b)^2 T^{\frac{1}{2}}}{\pi \chi A} \left( \frac{k}{m} \right)^2 \frac{(3+6K)}{2(1+K)} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (5.3.9)$$

$$\tilde{\tilde{M}}_i = 0, \quad (5.3.10)$$

$$\tilde{\tilde{h}}_i = -\frac{(\chi \rho b)^2 T^{\frac{1}{2}}}{\pi \chi A} \left( \frac{k}{m} \right)^2 \frac{3}{2(1+K)} \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (5.3.11)$$

<sup>19</sup>O fluxo de calor e o fluxo de spin cinético serão descritos em função dos gradientes dos campos básicos. Veja equações (5.3.13) e (5.3.16).

Para a determinação dos termos constitutivos  $\tilde{\omega}$ ,  $p_{ij}$ ,  $m_{ij}$ ,  $q_i$  e  $h_i$ , empregamos um método de iteração semelhante ao método de Maxwell (veja referências [15] e [16]), que consiste em inserir valores em equilíbrio, dos termos constitutivos, no primeiro membro das equações de campo da teoria de 29 campos, os quais contém a variação temporal destes termos, (4.5.4), (4.5.5), (4.5.6), (4.5.8) e (4.5.9), obtendo, no segundo membro, os valores dos termos constitutivos da primeira iteração. Substituindo-se  $\tilde{\omega} = 0$ ,  $p_{\langle ij \rangle} = 0$ ,  $m_{ij} = 0$ ,  $q_i = 0$  e  $h_i = 0$  encontramos os valores:

$$\tilde{\omega} = -\frac{(1+K)^2 k T^{\frac{1}{2}}}{32K m \chi A} (1 + \chi \rho b) \frac{\partial v_r}{\partial x_r}, \quad (5.3.12)$$

$$p_{\langle ij \rangle} = -\frac{15}{4} \frac{(1+K)^2 k T^{\frac{1}{2}}}{(6+13K) m \chi A} \left[ 1 + \chi \rho b \frac{(2+5K)}{5(1+K)} \right] \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}}, \quad (5.3.13)$$

$$\begin{aligned} q_i = & -\frac{75}{16} \frac{(K+1)^2 (48K^2 + (\pi+72)K + 24)}{(17K+4)(48K^2 + (\pi+48)K + 24) - 200K^2} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{\chi A} \left( \frac{k}{m} \right)^2 \left\{ \frac{\partial T}{\partial x_i} \left[ 1 \right. \right. \\ & + \left. \left. \chi \rho b \frac{(5K+3)(48K^2 + (\pi+48)K + 24)(K+1) + 40K(K+2)}{5(K+1)^2 (48K^2 + (\pi+72)K + 24)} \right] \right. \\ & + \left. \frac{T^{\frac{1}{2}} I}{B k} \epsilon_{ijk} \frac{\partial s_k}{\partial x_j} \frac{4K\pi}{(K+1)(48K^2 + (\pi+72)K + 24)} \left[ 1 \right. \right. \\ & \left. \left. - \chi \rho b \frac{10K\pi + (K+1)(48K^2 + (\pi+48)K + 24)}{10K(K+1)\pi} \right] \right\}, \quad (5.3.14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h_i = & -\frac{18(K+1)^2 (19K+3)}{(17K+4)(48K^2 + (\pi+48)K + 24) - 200K^2} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{\chi A} \left( \frac{k}{m} \right)^2 \left\{ \frac{\partial T}{\partial x_i} \left[ 1 \right. \right. \\ & + \left. \left. \chi \rho b \frac{(25K^3 + 57K^2 + 53K + 8)}{4(19K+3)(K+1)^2} \right] + \frac{T^{\frac{1}{2}} I}{B k} \epsilon_{ijk} \frac{\partial s_k}{\partial x_j} \frac{\pi(17K+4)}{8(K+1)(19K+3)} \left[ 1 \right. \right. \\ & \left. \left. - \chi \rho b \frac{20K^2 + (17\pi+20)K + 4\pi}{\pi(17K+4)(K+1)} \right] \right\}, \quad (5.3.15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_{ij} = & -\frac{3 T^{\frac{1}{2}} k}{16 \chi A m} \left\{ \frac{\partial s_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} \left[ 1 - \frac{3 \chi \rho b}{5(K+1)} \right] + \frac{1}{3} \frac{\partial s_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \frac{\partial s_{[i}}{\partial x_{j]}} \left[ \left( 1 - \frac{\chi \rho b}{(K+1)} \right) \right. \right. \\ & - \left. \frac{K\pi(17K+4)}{(17K+4)(48K^2 + (\pi+48)K + 24) - 200K^2} \left( 1 \right. \right. \\ & \left. \left. - \chi \rho b \frac{20K^2 + (17\pi+20)K + 4\pi}{\pi(K+1)(17K+4)} \right) \right] + \frac{1}{BT^{\frac{1}{2}}} \epsilon_{ijk} \frac{\partial T}{\partial x_k} \left[ \frac{4\chi \rho b}{(K+1)} \right. \\ & + \left. \frac{16\pi(K+1)(19K+3)}{(17K+4)(48K^2 + (\pi+48)K + 24) - 200K^2} \left( 1 \right. \right. \\ & \left. \left. + \chi \rho b \frac{(25K^3 + 57K^2 + 53K + 8)}{4(19K+3)(K+1)^2} \right) \right] \right\}, \quad (5.3.16) \end{aligned}$$

## 5.4 AS EQUAÇÕES DE CAMPO LINEARIZADAS

O sistema de equações (5.2.1), (5.2.2), (5.2.4) e (5.2.7) da seção (5.2) pode ser reescrito com base nas funções constitutivas, (5.3.1) a (5.3.16), determinadas na seção anterior. Obtemos, linearizando, o sistema de equações de campo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (5.4.1)$$

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial p_{ij}^t}{\partial x_j} = \rho F_i, \quad (5.4.2)$$

$$\rho \frac{\partial s_i}{\partial t} + \frac{\partial m_{ij}^t}{\partial x_j} = \frac{8\rho T^{\frac{1}{2}}}{B(K+1)} \chi \rho b \left( \frac{1}{2} \text{rotv} - \mathbf{s} \right)_i, \quad (5.4.3)$$

$$\frac{3k\rho}{m} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q_i^t}{\partial x_i} + \frac{k\rho T}{m} (1 + \chi \rho b) \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0. \quad (5.4.4)$$

Nas equações (5.4.1) a (5.4.4) o tensor pressão total,  $p_{ij}^t$ , o fluxo de spin total,  $m_{ij}^t$ , e o fluxo de calor total,  $q_i^t$ , possuem as seguintes expressões em função dos campos básicos e seus gradientes:

(i) Tensor Pressão Total :  $p_{ij}^t$ .

$$p_{ij}^t = (p^t - \eta \frac{\partial v_r}{\partial x_r}) \delta_{ij} - 2\mu \frac{\partial v_{<i}}{\partial x_{j>}} + 2\tau \epsilon_{ijk} \left( \frac{1}{2} \text{rotv} - \mathbf{s} \right)_k, \quad (5.4.5)$$

onde

$$p^t = \frac{k}{m} \rho T (1 + \chi \rho b), \quad (5.4.6)$$

$$\eta = \frac{k}{m} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{\chi A} \left[ \frac{(1+K)^2 (1+\chi \rho b)^2}{32K} + \frac{(\chi \rho b)^2}{\pi} \right], \quad (5.4.7)$$

$$\mu = \frac{3}{4} \frac{k}{m} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{\chi A} \left\{ \frac{5}{2} \frac{(K+1)}{(6+13K)} \left[ 1 + \frac{(5K+2)}{5(K+1)} \chi \rho b \right]^2 + \frac{(7K+4)}{5(K+1)} \frac{(\chi \rho b)^2}{\pi} \right\}, \quad (5.4.8)$$

$$\tau = \frac{3}{4} \frac{k}{m} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{\chi A} \frac{(\chi \rho b)^2}{\pi} \frac{K}{(K+1)}. \quad (5.4.9)$$

Nestas equações  $p^t$  é a pressão,  $\eta$ , o coeficiente de viscosidade volumétrica,  $\mu$ , o coeficiente de viscosidade de cisalhamento e  $\tau$  é o coeficiente de viscosidade rotacional.

(ii) Fluxo de Spin Total :  $m_{ij}^t$ .

$$m_{ij}^t = -\nu_1 \frac{\partial s_{<i}}{\partial x_{j>}} - \nu_2 \frac{\partial s_r}{\partial x_r} \delta_{ij} - \nu_3 \frac{\partial s_{[i}}{\partial x_{j]}} - \nu_4 \epsilon_{ijk} \frac{\partial T}{\partial x_k}, \quad (5.4.10)$$

onde

$$\nu_1 = \frac{3}{16} \frac{k}{m} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{\chi A} \left[ 1 - \frac{3}{5} \frac{\chi \rho b}{(1+K)} \left( \frac{4}{\pi} \chi \rho b + 1 \right) \right], \quad (5.4.11)$$

$$\nu_2 = \frac{1}{16} \frac{k}{m} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{\chi A}, \quad (5.4.12)$$

$$\begin{aligned} \nu_3 = & \frac{3}{16} \frac{k}{m} \frac{T^{\frac{1}{2}}}{\chi A} \left\{ 1 - \frac{\chi \rho b}{(K+1)} \left( 1 + \frac{4}{\pi} \chi \rho b \right) \right. \\ & - \frac{K \pi (17K+4)}{(17K+4)(48K^2 + (\pi+48)K + 24) - 200K^2} \left[ 1 \right. \\ & \left. \left. - \chi \rho b \frac{20K^2 + (17\pi+20)K + 4\pi}{\pi(K+1)(17K+4)} \right] \right\}, \quad (5.4.13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nu_4 = & \frac{2}{\chi b m} \frac{k}{\chi A} \left\{ \frac{\pi(19K+3)(K+1)}{(17K+4)(48K^2 + (\pi+48)K + 24) - 200K^2} \left[ 1 \right. \right. \\ & \left. \left. + \chi \rho b \frac{(25K^3 + 57K^2 + 53K + 8)}{4(19K+3)(K+1)^2} \right] + \frac{\chi \rho b}{4(K+1)} \right\}. \quad (5.4.14) \end{aligned}$$

Os coeficientes  $\nu_1$  a  $\nu_3$  estão associados a viscosidades de gradientes de spin. O coeficiente  $\nu_4$  está associado a um acoplamento termo-mecânico: um gradiente de temperatura gera um fluxo de spin no gás.

(iii) Fluxo de Calor Total :  $q_i^t$ .

$$q_i^t = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \zeta \epsilon_{ijk} \frac{\partial s_j}{\partial x_k}, \quad (5.4.15)$$

onde

$$\begin{aligned} \lambda = & \left( \frac{k}{m} \right)^2 \frac{T^{\frac{1}{2}}}{\chi A} \left\{ \frac{18(K+1)^2(19K+3)}{((17K+4)(48K^2 + (\pi+48)K + 24) - 200K^2)} \left[ \frac{25}{96} \left( 1 \right. \right. \right. \\ & + \chi \rho b \frac{(5K+3)}{5(K+1)} \left. \left. \left( \frac{48K^2 + (\pi+72)K + 24}{19K+3} \right) \left( 1 \right. \right. \right. \\ & + \chi \rho b \frac{(5K+3)(K+1)(48K^2 + (\pi+48)K + 24) + 40(K+2)K}{5(48K^2 + (\pi+72)K + 24)(K+1)^2} \right. \\ & \left. \left. \left. + \left( 1 + \chi \rho b \frac{(K+2)}{3(K+1)^2} \right) \left( 1 + \chi \rho b \frac{25K^3 + 57K^2 + 53K + 8}{4(K+1)^2(19K+3)} \right) \right] \right. \\ & \left. + \frac{3}{2} \frac{(\chi \rho b)^2}{\pi} \left[ \frac{2K^2 + 3K + 2}{(K+1)^2} \right] \right\}, \quad (5.4.16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\zeta = & \frac{k\rho T}{2m} \frac{I}{m} \left\{ \frac{3\pi}{\chi\rho b} \frac{(K+1)(17K+4)}{(17K+4)(48K^2 + (\pi+48)K + 24) - 200K^2} \left[ \frac{25K}{(17K+4)} \left( 1 \right. \right. \right. \\
& + \left. \left. \chi\rho b \frac{(5K+3)}{5(K+1)} \right) \left( 1 - \chi\rho b \frac{10K\pi + (48K^2 + (\pi+48)K + 24)(K+1)}{10K(K+1)} \right) \right. \\
& + \left. \left. \left( 1 + \chi\rho b \frac{(K+2)}{3(K+1)^2} \right) \left( 1 - \chi\rho b \frac{20K^2 + (17\pi+20)K + 4\pi}{\pi(17K+4)(K+1)} \right) \right] \right. \\
& \left. + \frac{1}{(K+1)} \left( 1 - \frac{\chi\rho b}{(K+1)} \right) \right\}. \tag{5.4.17}
\end{aligned}$$

$\lambda$  é o coeficiente de condutividade térmica e  $\zeta$  é um coeficiente associado a um acoplamento termo-mecânico: um fluxo de calor é gerado devido ao rotacional da velocidade de spin.

## 6 PROCESSOS TERMODINÂMICOS

Cada solução do sistema de equações de campo, (5.4.1) a (5.4.4), caracteriza um processo termodinâmico. Este sistema possui variadas soluções, porém, em um caso limite, quando está muito próximo do equilíbrio, possui soluções bastante simplificadas.

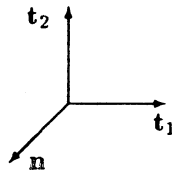
Analisaremos duas soluções : propagação de ondas harmônicas forçadas e modos hidrodinâmicos, onde os campos básicos possuem a forma:

$$\begin{aligned}\rho &= \rho_0 + \rho^1, \\ v_i &= v_i^1, \\ T &= T_0 + T^1, \\ s_i &= s_i^1.\end{aligned}\tag{6.1}$$

Neste capítulo, o índice 0 representará valores no equilíbrio.  $\rho^1$ ,  $v_i^1$ ,  $T^1$ , e  $s_i^1$  são os desvios do equilíbrio. Introduziremos a difusividade térmica,  $D_T$ , a viscosidade cinemática longitudinal,  $D_V$ , a velocidade adiabática do som,  $c_s$  e o coeficiente de atenuação do som no gás,  $\Gamma_s$  (veja referência [23]):

$$\begin{aligned}D_T &= \frac{m\lambda_0}{3k\rho_0}, \\ D_V &= \frac{1}{\rho_0} \left( \eta_0 + \frac{4}{3}\mu_0 \right), \\ c_s &= \left[ \frac{c_p}{c_v} \left( \frac{\partial p^t}{\partial \rho} \right)_T \right]^{(1/2)}, \\ \Gamma_s &= \frac{1}{2} \left[ D_V + \lambda_0 \left( \frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p} \right) \right].\end{aligned}\tag{6.2}$$

Adotaremos, como referência, o seguinte sistema de eixos cartesianos:



de tal modo que os campos de velocidade e velocidade de spin possam ser decompostos:

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{v}} &= \bar{v}_{\parallel} \mathbf{n} + \bar{v}_{\perp 1} \mathbf{t}_1 + \bar{v}_{\perp 2} \mathbf{t}_2, \\ \bar{\mathbf{s}} &= \bar{s}_{\parallel} \mathbf{n} + \bar{s}_{\perp 1} \mathbf{t}_1 + \bar{s}_{\perp 2} \mathbf{t}_2,\end{aligned}\tag{6.3}$$

onde  $\mathbf{n}$  é o sentido de propagação das ondas harmônicas planas.

Adotaremos também as seguintes notações simplificadoras:

$$D_A = \frac{\nu_1^0 + \nu_3^0}{2},$$

$$D_B = \mu_0 + \tau_0,$$

$$\begin{aligned}
D_C &= \frac{1}{\rho_0} \left( \frac{2}{3} \nu_1^0 + \nu_2^0 \right), \\
D_D &= \frac{T_0}{3} (1 + \chi_0 \rho_0 b), \\
\nu_5^0 &= \frac{4(T_0)^{\frac{1}{2}}}{B(K+1)} \chi_0 \rho_0 b.
\end{aligned} \tag{6.4}$$

## 6.1 PROPAGAÇÃO DE ONDAS PLANAS HARMÔNICAS FORÇADAS DE PEQUENA AMPLITUDE

Nesta primeira solução, consideraremos que os desvios  $\rho^1$ ,  $v_i^1$ ,  $T^1$ , e  $s_i^1$  do equilíbrio, propagam-se no gás na forma de ondas harmônicas planas forçadas:

$$\begin{aligned}
\rho^1 &= \bar{\rho} \exp[i (wt - k^c \mathbf{n} \cdot \mathbf{x})], \\
v_i^1 &= \bar{v}_i \exp[i (wt - k^c \mathbf{n} \cdot \mathbf{x})], \\
T^1 &= \bar{T} \exp[i (wt - k^c \mathbf{n} \cdot \mathbf{x})], \\
s_i^1 &= \bar{s}_i \exp[i (wt - k^c \mathbf{n} \cdot \mathbf{x})].
\end{aligned} \tag{6.1.1}$$

As amplitudes  $\bar{\rho}$ ,  $\bar{v}_i$ ,  $\bar{T}$  e  $\bar{s}_i$  são consideradas pequenas, sendo desprezível o produto entre duas delas. A frequência da onda é representada por  $w (w > 0)$ , e o número de onda complexo por  $k^c = k^r + ik^i$ , onde  $k^r > 0$ .

Nosso objetivo, nesta seção, é calcular a velocidade de fase,  $v = w/k^r$  e o coeficiente de atenuação da onda,  $\alpha = -k^i$ . Se utilizarmos (6.1.1), as equações de campo, (5.4.1) a (5.4.4), podem ser reescritas:

$$w \bar{\rho} - \rho_0 k^c (\mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{v}}) = 0, \tag{6.1.2}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\rho_0} \left( \frac{\partial p^t}{\partial \rho} \right)_T^0 \bar{\rho} k^c n_i + \frac{1}{\rho_0} \left( \frac{\partial p^t}{\partial T} \right)_\rho^0 \bar{T} k^c n_i - [w + i(k^c)^2 D_B] \bar{v}_i - \\
- \frac{1}{\rho_0} i \left( \eta_0 + \frac{\mu_0}{3} - \tau_0 \right) (k^c)^2 n_i (\mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{v}}) - 2 \frac{\tau_0}{\rho_0} k^c \epsilon_{ijk} n_j \bar{s}_k = 0,
\end{aligned} \tag{6.1.3}$$

$$[w - i(k^c)^2 D_T] \bar{T} - D_D k^c n_i \bar{v}_i = 0, \tag{6.1.4}$$

$$\begin{aligned}
\nu_5^0 (k^c) \epsilon_{ijk} n_j \bar{v}_k + \left[ w + i(k^c)^2 \frac{D_A}{\rho_0} - 2i\nu_5^0 \right] \bar{s}_i - \\
- i \left( \frac{\nu_1^0 + 6\nu_2^0 - 3\nu_3^0}{6\rho_0} \right) (k^c)^2 n_i (\mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{s}}) = 0.
\end{aligned} \tag{6.1.5}$$

Podemos desacoplar as equações (6.1.2 a 6.1.5) em quatro sistemas de equações lineares e homogêneas, segundo a direção de propagação: dois longitudinais (paralelos a  $\mathbf{n}$ ) e dois transversais (um paralelo a  $\mathbf{t}_1$  e outro paralelo a  $\mathbf{t}_2$ ).



## (i) Longitudinal - 1

Considerando-se a equação (6.1.2) a componente paralela a  $\mathbf{n}$  da equação (6.1.3) e a equação (6.1.4), obtemos o primeiro sistema:

$$\begin{pmatrix} w & -\rho_0 k^c & 0 \\ -\frac{k^c}{\rho_0} \left(\frac{\partial p^i}{\partial \rho}\right)_T^0 & [w - iD_V(k^c)^2] & -\frac{k^c}{\rho_0} \left(\frac{\partial p^i}{\partial T}\right)_\rho^0 \\ 0 & -D_D k^c & [w - iD_T(k^c)^2] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\rho} \\ \bar{v}_{\parallel} \\ \bar{T} \end{pmatrix} = 0. \quad (6.1.6)$$

Este sistema nos permite uma solução não trivial somente se o determinante for nulo. Esta solução nos fornece uma relação entre  $w$  e  $k^c$ , chamada relação de dispersão

$$\Gamma^4 \frac{D_T}{D_V} \left[ Re e^{-2} - i \frac{1}{\gamma} Re^{-1} \right] + \Gamma^2 \left[ i \left( 1 + \frac{D_T}{D_V} \right) Re^{-1} + 1 \right] - 1 = 0. \quad (6.1.7)$$

Na relação acima,  $Re$  é chamado de número de Reynolds:

$$Re = \frac{c_s^2}{D_V w}. \quad (6.1.8)$$

Podemos expandir  $\Gamma$  em potências de  $Re^{-1}$ ,

$$\Gamma = c_s \left( \frac{k^c}{w} \right) = c_s \left( \frac{k^r}{w} + i \frac{k^i}{w} \right) = a_0 + ia_1 \frac{1}{Re} + a_2 \frac{1}{Re^2}, \quad (6.1.9)$$

sendo esta equação válida para baixas frequências de modo que podemos eliminar  $\Gamma$  da equação (6.1.7), desprezando-se potências menores que  $Re^{-2}$ . Encontramos os valores de  $a_0$ ,  $a_1$  e  $a_2$  considerando nulos os coeficientes de  $Re$ :

$$a_0 = 1,$$

$$a_1 = -\frac{1}{2} \left[ \frac{D_T}{D_V} \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) + 1 \right],$$

$$a_2 = -\frac{1}{2} \left[ \frac{D_T}{D_V} \left( \frac{1 - \gamma}{\gamma} \right) + 1 \right] \left[ \frac{D_T}{D_V} \left( \frac{3\gamma - 7}{4\gamma} \right) + \frac{1}{4} \right] - \frac{1}{2} \frac{D_T}{D_V}. \quad (6.1.10)$$

Finalmente, igualando as partes real e imaginária, respectivamente, de (6.1.9), obtemos a velocidade de propagação da onda e seu coeficiente de atenuação:

$$v_{l1} = c_s \left\{ 1 + \frac{1}{2c_s^4} \left[ \left( \frac{3\gamma - 7}{4\gamma} D_T + \frac{3}{4} D_V \right) \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} D_T + D_V \right) + D_V D_T \right] w^2 \right\}, \quad (6.1.11)$$

$$\alpha_{l1} = \frac{w^2}{2c_s^3} \left[ \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} D_T + D_V \right]. \quad (6.1.12)$$

## (ii) Longitudinal - 2

Se tomarmos agora o produto interno da equação (6.1.5) por  $\mathbf{n}$ , temos a segunda relação de dispersão:

$$iw + \frac{\nu_5^0}{\rho_0} + (k^c)^2 D_C = 0, \quad (6.1.13)$$

da qual obtemos, diretamente, a velocidade e o coeficiente de atenuação da onda para o segundo modo longitudinal, o qual está associado à componente longitudinal da velocidade de spin:

$$v_{l2} = \left( \frac{2\rho_0 D_C}{\nu_5^0} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \left( 1 + \left( \frac{\rho_0 w}{\nu_5^0} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right]^{-\frac{1}{2}} w, \quad (6.1.14)$$

$$\alpha_{l2} = \left( \frac{\nu_5^0}{2\rho_0 D_C} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \left( 1 + \left( \frac{\rho_0 w}{\nu_5^0} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + 1 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (6.1.15)$$

## (iii) Transversais

Do produto externo das equação (6.1.3) e (6.1.5) por  $\mathbf{n}$ , e efetuando o produto interno com  $\mathbf{t}_1$  e  $\mathbf{t}_2$ , obtemos dois sistemas equações :

a. Paralelo a  $\mathbf{t}_1$ :

$$-\frac{\nu_5^0}{\rho_0} v_{\perp 2} + \left[ w - i(k^c)^2 \frac{D_A}{\rho_0} - i \frac{\nu_5^0}{\rho_0} \right] s_{\perp 1} = 0, \quad (6.1.16)$$

$$-\left[ w + i(k^c)^2 \frac{D_B}{\rho_0} v_{\perp 2} \right] - 2 \frac{\tau_0}{\rho_0} s_{\perp 1} = 0. \quad (6.1.17)$$

b. Paralelo a  $\mathbf{t}_2$ :

$$\frac{\nu_5^0}{\rho_0} v_{\perp 1} + \left[ w - i(k^c)^2 \frac{D_A}{\rho_0} - i \frac{\nu_5^0}{\rho_0} \right] s_{\perp 2} = 0, \quad (6.1.18)$$

$$\left[ w + i(k^c)^2 \frac{D_B}{\rho_0} v_{\perp 1} \right] - 2 \frac{\tau_0}{\rho_0} s_{\perp 2} = 0. \quad (6.1.19)$$

Esses dois sistemas de equações possuem a mesma relação de dispersão:

$$\left[ 1 - i \left( \frac{\mu_0 + \tau_0}{\rho_0} \right) w \left( \frac{k^c}{w} \right)^2 \right] \left[ \left( \frac{\rho_0}{\nu_5^0} \right) w - i - i \left( \frac{\nu_1^0 + \nu_3^0}{\rho_0} \right) w \left( \frac{\rho_0}{2\nu_5^0} \right) w \left( \frac{k^c}{w} \right)^2 \right] + \left( \frac{\tau_0}{\rho_0} \right) w \left( \frac{k^c}{w} \right)^2 = 0. \quad (6.1.20)$$

As quantidades  $\left(\frac{\mu_0 + \tau_0}{\rho_0}\right) w$ ,  $\left(\frac{\rho_0}{\nu_5^0}\right) w$ ,  $\left(\frac{\nu_1^0 + \nu_3^0}{\rho_0}\right) w$  e  $\left(\frac{\tau_0}{\rho_0}\right) w$  podem ser consideradas pequenas no limite de baixa frequência, portanto a equação (6.1.20) reduz-se a:

$$-\left(\frac{\mu_0 + \tau_0}{\rho_0}\right) w \left(\frac{k^c}{w}\right)^2 + \left(\frac{\rho_0}{\nu_5^0}\right) w - i + \left(\frac{\tau_0}{\rho_0}\right) w \left(\frac{k^c}{w}\right)^2 = 0. \quad (6.1.21)$$

Esta equação pode ser diretamente resolvida, o que nos fornece para o modo transversal, a velocidade e o coeficiente de atenuação da onda:

$$v_t = \left(\frac{2\mu_0 w}{\rho_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \left(1 + \left(\frac{\rho_0 w}{\nu_5^0}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}} + \frac{\rho_0 w}{\nu_5^0} \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (6.1.22)$$

$$\alpha_t = \left(\frac{\rho_0 w}{2\mu_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \left(1 + \left(\frac{\rho_0 w}{\nu_5^0}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}} - \frac{\rho_0 w}{\nu_5^0} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (6.1.23)$$

## 6.2 MODOS HIDRODINÂMICOS

Estudemos uma solução<sup>20</sup> das equações (6.1.2) a (6.1.5) para um sistema de volume infinito de modo que possamos definir as suas transformadas de Fourier:

$$\hat{\rho} = \int \rho^1 \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

$$\hat{v}_i = \int v_i^1 \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

$$\hat{T} = \int T^1 \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

$$\hat{s}_i = \int s_i^1 \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Utilizando a notação da figura 4 da seção anterior obtemos, do sistema de equações de campo (5.4.1) a (5.4.4) e em base nas equações (6.1), um sistema de equações, o qual podemos escrever na forma compacta:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = M \Psi, \quad (6.2.1)$$

onde  $\Psi$  é o seguinte vetor:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \hat{\rho} \\ \hat{v}_{\parallel} \\ \hat{v}_{\perp 1} \\ \hat{v}_{\perp 2} \\ \hat{T} \\ \hat{s}_{\parallel} \\ \hat{s}_{\perp 1} \\ \hat{s}_{\perp 2} \end{pmatrix}, \quad (6.2.2)$$

<sup>20</sup>Em Résibois & Leener [23], pode ser encontrada, a solução, em modos hidrodinâmicos, das equações de campo para gases monoatômicos.

e a matriz  $M$  pode ser escrita:

$$M = - \begin{pmatrix} 0 & i\rho_0 q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{iq}{\rho_0} \left(\frac{\partial p'}{\partial \rho}\right)_T^0 & -D_V q^2 & 0 & 0 & i\frac{q}{\rho_0} \left(\frac{\partial p'}{\partial T}\right)_\rho^0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{D_E q^2}{\rho_0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2iq\frac{\tau_0}{\rho_0} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{D_E q^2}{\rho_0} & 0 & 0 & 2iq\frac{\tau_0}{\rho_0} & 0 & 0 \\ 0 & iD_D & 0 & 0 & D_T q^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{D_C q^2}{\rho_0} + \frac{\nu_s^0}{\rho_0} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{(\nu_s^0)}{2\rho_0} & 0 & 0 & \frac{D_A q^2}{\rho_0} + \frac{\nu_s^0}{\rho_0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{(\nu_s^0)}{2\rho_0} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{D_A q^2}{\rho_0} + \frac{\nu_s^0}{\rho_0} & 0 \end{pmatrix}$$

Na obtenção do sistema de equações acima, utilizamos a relação

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \rightarrow iq_j,$$

válida para as transformações de Fourier das funções  $f(\mathbf{x})$  definidas em um espaço de volume infinito, onde  $f(\mathbf{x})$  possua a propriedade de decrescer rapidamente para valores grandes de  $\mathbf{x}$ .

Esta relação é facilmente obtida da definição da transformada de Fourier para o gradiente da função  $f(\mathbf{x})$ :

$$\int \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_j} \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \frac{\partial f(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})}{\partial x_j} d\mathbf{x} + iq_j \hat{f}(\mathbf{x}),$$

e do teorema da divergência:

$$\int \frac{\partial f(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})}{\partial x_j} d\mathbf{x} = \oint f(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) n_j dS$$

onde  $n_j$  é um vetor unitário normal ao elemento de área,  $dS$ , localizado no infinito. Como a função  $f(\mathbf{x})$  decresce rapidamente para grandes valores de  $\mathbf{x}$ , temos que a integral fechada acima é nula,

## CÁLCULO DOS AUTOVALORES

A solução do sistema resulta da diagonalização da matriz  $M$ , que é não-Hermitiana e possui, portanto, autovetores à direita e à esquerda.

$$M\bar{\phi} = \bar{\Lambda}\bar{\phi}, \quad (6.2.3)$$

$$\phi M = \Lambda\phi. \quad (6.2.4)$$

Temos, porém, apenas um conjunto de autovalores, pois das equações seculares:

$$\|M - \Lambda I\| = 0,$$

$$\|\bar{\Lambda} I - M\| = 0, \quad (6.2.5)$$

resulta ser  $\bar{\Lambda} = \Lambda$ .

As equações (6.2.5) nos fornecem após manipulações algébricas:

$$\left[ \frac{\tau_0 \nu_5^0}{\rho_0^2} q + i \left( \frac{D_B}{\rho_0} q^2 - \lambda_n \right) \left( \frac{D_A}{\rho_0} q^2 + \frac{\nu_5^0}{\rho_0} + \lambda_n \right) \right]^2 \left[ (q^2 D_T + \lambda_n) \left( \lambda_n^2 + D_V q^2 \lambda_n + \left( \frac{\partial p^t}{\partial \rho} \right)_T^0 q^2 \right) + \frac{D_D}{\rho_0} \left( \frac{\partial p^t}{\partial T} \right)_\rho^0 q^2 \lambda_n \right] \left( \frac{D_C}{\rho_0} q^2 + \frac{\nu_5^0}{\rho_0} + \lambda_n \right) = 0. \quad (6.2.6)$$

Uma raiz da equação é óbvia:

$$\lambda_6 = -\frac{1}{\rho_0} (D_C q^2 + \nu_5^0). \quad (6.2.7)$$

Para se obter as outras raízes, devemos observar que as variáveis hidrodinâmicas são válidas para fenômenos que variam lentamente no espaço, isto significa que os únicos coeficientes relevantes correspondem a pequenos valores de  $q$ , o que nos permite aproximar  $\lambda_n$  como uma expansão polinomial<sup>21</sup> em  $q$ .

$$\lambda_\alpha = a_\alpha q + b_\alpha q^2. \quad (6.2.8)$$

Substituindo esta forma em (6.2.6), obtemos:

$$-i \frac{\tau_0 \nu_5^0}{\rho_0^2} q + \left( \frac{D_B}{\rho_0} q^2 - a_n q - b_n q^2 \right) \left( \frac{D_A}{\rho_0} q^2 + \frac{\nu_5^0}{\rho_0} + a_n q + b_n q^2 \right) = 0$$

e

$$q^3 (D_T + a_n q + b_n q^2) \left[ q^2 (D_V b_n + b_n^2) + q (D_V a_n + a_n^2 + 2a_n b_n) + \left( \frac{\partial p^t}{\partial \rho} \right)_T^0 \right] + (a_n q + b_n q^2) q^3 \frac{D_D}{\rho_0} \left( \frac{\partial p^t}{\partial T} \right)_\rho^0 = 0. \quad (6.2.9)$$

Seja a quantidade:

$$c_p - c_v = \frac{T_0 \left( \frac{\partial p^t}{\partial T} \right)_\rho^2}{\rho_0^2 \left( \frac{\partial p^t}{\partial \rho} \right)_T^2},$$

obtida por manipulações algébricas simples, da relação de integrabilidade da equação de Gibbs:

$$\left( \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho_0} \right)_T = \frac{1}{\rho_0^2} \left[ p^t - T \left( \frac{\partial p^t}{\partial T} \right)_\rho \right],$$

e das definições:

$$c_p = \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_p$$

$$c_v = \left( \frac{\partial \epsilon}{\partial T} \right)_\rho.$$

<sup>21</sup>Termos de ordem igual ou superior a  $q^3$  não podem ser considerados, pois termos similares foram desprezados nas equações de campo.

Ao se Fazer os coeficientes das diferentes potências de  $q$  (de ordem igual e superior a 3) iguais a zero, obtemos, das equações (6.2.9), os autovalores restantes:

$$\lambda_{1,2} = \pm ic_s q - \Gamma_s q^2, \quad (6.2.10)$$

$$\lambda_{3,4} = -\frac{D_B}{\rho_0} q^2, \quad (6.2.11)$$

$$\lambda_5 = -\frac{D_T}{\gamma} q^2, \quad (6.2.12)$$

$$\lambda_{7,8} = -\frac{D_A}{\rho_0} q^2. \quad (6.2.13)$$

## CÁLCULO DOS AUTOVETORES

Os autovetores  $\phi$  e  $\bar{\phi}$ , são distintos e satisfazem a condição de biortonormalidade  $\bar{\phi} \phi = 1$ . Dados os autovalores  $\lambda_n$ , os sistemas de oito equações lineares e homogêneas (6.2.3) e (6.2.4), ficam imediatamente solucionados, no limite para  $q$  pequeno.

$$\lim_{q \rightarrow 0} \phi_{1,2} = \left( \frac{1}{2\gamma} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \rho_0 \\ \pm c_s \\ 0 \\ 0 \\ D_D \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lim_{q \rightarrow 0} \bar{\phi}_{1,2} = \left( \frac{1}{2\gamma} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho_0} \\ \pm c_s T_0 \frac{c_p - c_v}{(D_D c_v)^2} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\gamma - 1}{D_D} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad (6.2.14)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \phi_3 = \left( \frac{kT_0}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lim_{q \rightarrow 0} \bar{\phi}_3 = \left( \frac{m}{kT_0} \right) \lim_{q \rightarrow 0} \phi_3; \quad (6.2.15)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \phi_4 = \left( \frac{kT_0}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lim_{q \rightarrow 0} \bar{\phi}_4 = \left( \frac{m}{kT_0} \right) \lim_{q \rightarrow 0} \phi_4; \quad (6.2.16)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \phi_5 = \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \rho_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{D_D}{(1-\gamma)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lim_{q \rightarrow 0} \bar{\phi}_5 = \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho_0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{D_D} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad (6.2.17)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \phi_6 = \left( \frac{kT_0}{I} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lim_{q \rightarrow 0} \bar{\phi}_6 = \left( \frac{I}{kT_0} \right) \lim_{q \rightarrow 0} \phi_6; \quad (6.2.18)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \phi_7 = \left( \frac{kT_0}{I} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lim_{q \rightarrow 0} \bar{\phi}_7 = \left( \frac{I}{kT_0} \right) \lim_{q \rightarrow 0} \phi_7; \quad (6.2.19)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \phi_8 = \left( \frac{kT_0}{I} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \lim_{q \rightarrow 0} \bar{\phi}_8 = \left( \frac{I}{kT_0} \right) \lim_{q \rightarrow 0} \phi_8; \quad (6.2.20)$$

## INTERPRETAÇÃO DOS MODOS HIDRODINÂMICOS

Os autovetores  $\phi$  formam uma base, de modo que qualquer vetor<sup>22</sup>  $\Psi$  possa ser escrito:

$$\Psi_m = \sum_{n=1}^8 c_n(t) \phi_{n,m}, \quad (6.2.21)$$

onde  $c_n(t)$  é o coeficiente de expansão da base.

<sup>22</sup>Estamos explicitando os somatórios devidos aos produtos internos entre matrizes, de modo que, até o final deste capítulo, não mais utilizaremos a convenção de soma de Einstein.

Multiplicando à esquerda por  $\bar{\phi}_n$  e da condição de biortonormalidade:

$$c_n(t) = \sum_{m=1}^8 \bar{\phi}_{n,m} \cdot \Psi_m(t). \quad (6.2.22)$$

Combinando (6.2.22) e (6.2.1), obtemos a forma explícita para os coeficientes de expansão :

$$c_n(t) = \exp(\lambda_n t) c_n(0). \quad (6.2.23)$$

As equações (6.2.21) e (6.2.23) nos fornecem:

$$\Psi_m(t) = \sum_{n=1}^8 \exp(\lambda_n t) c_n(0) \phi_{n,m}. \quad (6.2.24)$$

Finalmente, multiplicando a equação (6.2.22), para  $t = 0$ , por  $\phi_{n,k}$  e substituindo em (6.2.24), é imediato:

$$\Psi_k(t) = \sum_{m=1}^8 \sum_{n=1}^8 \exp(\lambda_n t) \bar{\phi}_{n,m} \phi_{n,k} \Psi_m(0). \quad (6.2.25)$$

Portanto, a solução para as equações de campo é uma superposição dos oito modos hidrodinâmicos.

O significado destes modos, pode ser facilmente compreendido, ao retornarmos à determinação das variáveis macroscópicas em termos de seus valores iniciais, com o uso da equação (6.2.25):

(i) Densidade:

$$(\hat{\rho}(0) \neq 0, \hat{v}(0) = 0, \hat{T}(0) = 0 \text{ e } \hat{s}(0) = 0).$$

$$\hat{\rho}(t) = \Psi_1(t) = \sum_{n=1}^8 \bar{\phi}_{n,1} \phi_{n,1} \exp(\lambda_n t) \Psi_1(0), \quad (6.2.26)$$

onde o índice 1 indica a linha das matrizes-coluna  $\Psi$ ,  $\phi_n$  e  $\bar{\phi}_n$ , assim, expandindo o somatório:

$$\hat{\rho}(t) = [\bar{\phi}_{1,1} \phi_{1,1} \exp(\lambda_1 t) + \bar{\phi}_{2,1} \phi_{2,1} \exp(\lambda_2 t) + \bar{\phi}_{5,1} \phi_{5,1} \exp(\lambda_5 t)] \hat{\rho}(0), \quad (6.2.27)$$

substituindo os valores de  $\bar{\phi}$ ,  $\phi$  e  $\lambda$ , obtemos:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(0) \left[ \frac{1}{\gamma} \cos(c_s q t) \exp(-\Gamma_s q^2 t) + (1 - \gamma) \exp\left(-\frac{\lambda_0}{\rho_0 c_p} q^2 t\right) \right]. \quad (6.2.28)$$

De modo análogo, determinaremos os campos escalares de velocidade e velocidade de spin.

(ii) Velocidade linear longitudinal:

$$(\hat{\rho}(0) = 0, \hat{v}_{||}(0) \neq 0, \hat{v}_{\perp 1}(0) = 0, \hat{v}_{\perp 2}(0) = 0, \hat{T}(0) = 0 \text{ e } \hat{s}(0) = 0).$$

$$\hat{v}_{||}(t) = \hat{v}_{||}(0) \cos(c_s q t) \exp(-\Gamma_s q^2 t). \quad (6.2.29)$$



(iii) Velocidade linear transversal:

$$(\hat{\rho}(0) = 0, \hat{v}_{\parallel}(0) = 0, \hat{v}_{\perp 1}(0) \neq 0, \hat{v}_{\perp 2}(0) = 0, \hat{T}(0) = 0 \text{ e } \hat{s}(0) = 0).$$

$$\hat{v}_{\perp 1}(t) = \hat{v}_{\perp 1}(0) \exp \left[ - \left( \frac{\tau_0 + \mu_0}{\rho_0} \right) q^2 t \right]. \quad (6.2.30)$$

(iv) Velocidade de spin longitudinal:

$$(\hat{\rho}(0) = 0, \hat{v}(0) = 0, \hat{T}(0) = 0, \hat{s}_{\parallel}(0) \neq 0, \hat{s}_{\perp 1}(0) = 0 \text{ e } \hat{s}_{\perp 2}(0) = 0).$$

$$\hat{s}_{\parallel}(t) = \hat{s}_{\parallel}(0) \exp \left\{ - \frac{1}{3\rho_0} [(2\nu_1^0 + 3\nu_2^0)q^2 + 3\nu_3^0]t \right\}. \quad (6.2.31)$$

(v) Velocidade de spin transversal:

$$(\hat{\rho}(0) = 0, \hat{v}(0) = 0, \hat{T}(0) = 0, \hat{s}_{\parallel}(0) = 0, \hat{s}_{\perp 1}(0) \neq 0 \text{ e } \hat{s}_{\perp 2}(0) = 0).$$

$$\hat{s}_{\perp 1}(t) = \hat{s}_{\perp 1}(0) \exp \left[ - \left( \frac{\nu_1^0 + \nu_3^0}{\rho_0} \right) q^2 t \right]. \quad (6.2.32)$$

(vi) Entropia:

$$(\hat{\rho}(0) \neq 0, \hat{v}(0) = 0, \hat{T}(0) \neq 0 \text{ e } \hat{s}(0) = 0).$$

Sendo a entropia função da densidade e da temperatura  $\eta = \eta(\rho, T)$ , temos por definição :

$$d\eta = \left( \frac{\partial \eta}{\partial T} \right)_{\rho} dT + \left( \frac{\partial \eta}{\partial \rho} \right)_{T} d\rho$$

e considerando a equação de Gibbs:

$$Td\eta = d\epsilon + p^t d \left( \frac{1}{\rho} \right),$$

obtemos:

$$d\eta = \frac{c_v}{T} dT + \frac{p^t}{T_0 \rho_0} d\rho.$$

Tomando a transformada de Fourier (perto do equilíbrio):

$$\hat{\eta} = \frac{c_v}{T} \hat{T} + \frac{p^t}{T_0 \rho_0} \hat{\rho}.$$

Dadas as evoluções de  $\hat{\rho}$  e  $\hat{T}$ , calculadas de modo semelhante aos itens anteriores obtemos:

$$\hat{\eta}(t) = \hat{\eta}(0) \exp \left[ - \left( \frac{D_T}{\gamma} \right) q^2 t \right]. \quad (6.2.33)$$

## 7 CONCLUSÃO

Obtivemos o tensor pressão total,  $p_i^t$  (equação (5.4.5)), o fluxo de spin total,  $m_i^t$  (equação (5.4.10)) e o fluxo de calor total,  $q_i^t$  (equação (5.4.15)) em função dos campos básicos e de seus primeiros gradientes, através da transição de uma teoria de 29 campos para uma de 8 campos básicos escalares.

Estas equações representam as equações constitutivas de um fluido polar e possuem a mesma estrutura que as encontradas na teoria fenomenológica (*veja [19] e [9]*).

Encontramos duas soluções para as equações de campo (5.4.1) a (5.4.4). Na primeira, determinamos a propagação de ondas harmônicas planas de pequena amplitude, que resultou em quatro modos de propagação: 2 longitudinais e 2 transversais.

O primeiro deste modos, que associa os campos de densidade, velocidade longitudinal e temperatura, é o modo dispersivo de propagação do som.

No segundo modo longitudinal, determinamos a velocidade de propagação e o coeficiente de atenuação do desvio do equilíbrio da velocidade de spin longitudinal. Observa-se que os modos transversais, que associam:  $v_{\perp 1}$  e  $s_{\perp 2}$ ;  $v_{\perp 2}$  e  $s_{\perp 1}$ , possuem a mesma velocidade e o mesmo coeficiente de atenuação. Uma análise desta solução nos mostra que, com exceção do primeiro modo, as velocidades de propagação são pequenas comparadas com as fortes atenuações, isto é, esses modos são de difícil propagação.

A segunda solução, modos hidrodinâmicos, confirma a análise acima: Os autovetores nos mostram que os modos de densidade, velocidade linear longitudinal e temperatura estão acoplados. Estes modos propagam-se dispersivamente, enquanto os modos restantes possuem apenas atenuação.

Uma inspeção das equações (6.2.28) a (6.2.33) nos permite aferir que a densidade evolui no tempo através de um duplo mecanismo de propagação do som e da difusão do calor, enquanto a velocidade linear longitudinal depende exclusivamente do mecanismo de propagação do som.

A velocidade linear transversal, por seu turno, depende dos coeficientes de viscosidade de cisalhamento e rotacional e a velocidade de spin, depende além dos coeficientes de viscosidade de gradientes de spin, do coeficiente de acoplamento da velocidade de spin e da metade da vorticidade local da equação (5.4.3).

Finalmente, observamos, que um desvio do equilíbrio da entropia do sistema propaga-se em função da difusividade térmica e dos calores específicos, o que nos permite caracterizar  $\lambda_5$  como modo de difusão do calor.

Comparações com valores experimentais dos coeficientes de transporte e das velocidades de propagação dos modos acima descritos não foram possíveis, porque não encontramos referências sobre estes dados.

## APÊNDICE A - TABELAS DE INTEGRAIS

### FÓRMULAS EMPREGADAS NO CÁLCULO DOS MOMENTOS DA FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO E PRODUÇÕES

Seja  $\mathbf{c}$  um vetor do espaço tridimensional  $V$ , então as seguintes fórmulas são válidas:

$$\int_V c_i c_j f(c^2) d\mathbf{c} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \int_V c^2 f(c^2) d\mathbf{c}, \quad (\text{A.1})$$

$$\int_V c_i c_j c_r c_s f(c^2) d\mathbf{c} = \frac{1}{15} (\delta_{ij} \delta_{rs} + \delta_{ir} \delta_{js} + \delta_{is} \delta_{jr}) \int_V c^4 f(c^2) d\mathbf{c}, \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \int_V c_i c_j c_r c_s c_p c_q f(c^2) d\mathbf{c} = & \frac{1}{105} (\delta_{ij} \delta_{rs} \delta_{pq} + \delta_{ij} \delta_{rq} \delta_{ps} + \delta_{ij} \delta_{rp} \delta_{qs} + \\ & + \delta_{ir} \delta_{js} \delta_{pq} + \delta_{ir} \delta_{jq} \delta_{ps} + \delta_{ir} \delta_{jp} \delta_{qs} + \delta_{is} \delta_{jr} \delta_{pq} + \delta_{is} \delta_{jq} \delta_{pr} + \\ & + \delta_{is} \delta_{jp} \delta_{qr} + \delta_{ip} \delta_{jr} \delta_{sq} + \delta_{ip} \delta_{jq} \delta_{sr} + \delta_{ip} \delta_{js} \delta_{qr} + \delta_{iq} \delta_{jr} \delta_{ps} + \\ & + \delta_{iq} \delta_{jp} \delta_{rs} + \delta_{iq} \delta_{js} \delta_{pr}) \int_V c^6 f(c^2) d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

O valor das integrais definidas:

$$\int_0^\infty c^{2n} e^{-\alpha c^2} dc = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{(2n-1)}{2^n} \alpha^{-(2n+1)/2}, \quad (\text{A.4})$$

$$\int_0^\infty c^{(2n+1)} e^{-\alpha c^2} dc = \frac{n!}{2} \alpha^{-(n+1)}, \quad (\text{A.5})$$

pode ser encontrado em tabelas de integrais.

As seguintes fórmulas são válidas para  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ :

$$\int (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} = \frac{2\pi}{n+1} g^n, \quad (\text{A.6})$$

$$\int k_i (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} = \frac{2\pi}{n+2} g^{n-1} g_i, \quad (\text{A.7})$$

$$\int k_i k_j (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} = \frac{2\pi}{(n+1)(n+3)} g^{n-2} (g^2 \delta_{ij} + n g_i g_j), \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} \int k_i k_j k_k (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} = & \frac{2\pi}{(n+2)(n+4)} g^{n-3} [g^2 (g_i \delta_{jk} + \\ & + g_j \delta_{ik} + g_k \delta_{ij}) + (n-1) g_i g_j g_k], \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned}
\int k_i k_j k_r k_s (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} &= \frac{2\pi}{(n+1)(n+3)(n+5)} g^{n-4} [g^4 (\delta_{ij} \delta_{rs} + \\
&+ \delta_{ir} \delta_{js} + \delta_{is} \delta_{jr}) + n g^2 (g_i g_j \delta_{rs} + (g_i g_r \delta_{js} + (g_i g_s \delta_{jr} + \\
&+ (g_j g_r \delta_{is} + (g_j g_s \delta_{ir} + (g_r g_s \delta_{ij}) + n(n-2) g_i g_j g_r g_s)], \tag{A.10}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int k_i k_j k_k k_l k_m (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} &= \frac{2\pi}{(n+2)(n+4)(n+6)} g^{n-5} \{g^4 [g_i (\delta_{jk} \delta_{lm} + \\
&+ \delta_{jl} \delta_{km} + \delta_{jm} \delta_{kl}) + g_j (\delta_{ik} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + \\
&+ g_k (\delta_{ij} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jl}) + g_l (\delta_{ik} \delta_{jm} + \delta_{ij} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{jk}) + \\
&+ g_m (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{ik} \delta_{jl}) + (n+1) g^2 [g_i (g_j g_k \delta_{lm} + \\
&+ g_j g_l \delta_{km} + g_j g_m \delta_{kl} + g_k g_l \delta_{jm} + g_k g_m \delta_{jl} + g_l g_m \delta_{jk}) + g_k g_l g_m \delta_{ij} + \\
&+ g_j g_l g_m \delta_{ik} + g_j g_k g_m \delta_{il} + g_j g_k g_l \delta_{im}] + (n-1)(n-3) g_i g_j g_k g_l g_m \}, \tag{A.11}
\end{aligned}$$

## APÊNDICE B - PROGRAMA MUSIMP

A seguir apresentamos o programa em linguagem MUSIMP utilizado para o cálculo dos termos constitutivos

Observe-se que na definição das funções relativas as velocidades lineares e angulares multiplicamos cada velocidade por  $(K + 1)$ , de modo que a função  $C(i)$  define o produto  $C_i(K + 1)$ , a função  $W2(L)$  define  $(W')^2(K + 1)^2$ , o produto das funções  $C2() * WL(i)$  representa  $C^2W_i(K + 1)^3$  e assim por diante. Este número de  $(K + 1)$ , suprimidos no denominador das definições das velocidades, deve ser dado como argumento da função INTEGRAL.

Com este procedimento todos os cálculos foram realizados com expressões não fracionárias em  $(K + 1)$ , facilitando o trabalho de integração .

A função INTGK é a conjunção das tabelas de integrais em  $k$  e em  $c$  dadas no apêndice A.

```

FUNCTION INTEGRAL(ft,nck,exp1,exp2,
                  % local % ind,fat,ff,t0,t1 %global:st %),
%=====
  entrada(modo interativo): INTEGRAL(ft,nck,exp1,exp2);
  onde: ft    - arquivo de saida = termo
        nck   - numero de (1+K) no denominador
        exp1  - expressao das velocidades
        exp2  - expressao da funcao de distribuicao
  exemplo: termo pt(i,j)
           INTEGRAL(pij,t,1,a/2 X m k(j) * (CL(i) - C(i)), ff1);
=====
exp1: EXPAND(exp1), st:(1+K)^nck, fat: 0, POP(exp1), POP(exp2),
LOOP
  WHEN EMPTY(t0:POP(exp1)), EXIT,
  BLOCK
    WHEN (NOT FREE(t0,s)) AND (NOT ONE(QTY(t0,s)*FIRST(exp2))), EXIT,
    BLOCK
      WHEN FREE(t0,s), ff:exp2 EXIT, ff:LIST('1),
    ENDBLOCK,
  LOOP
    WHEN EMPTY(t1:POP(ff)), EXIT,
    ind:CONTA(t0*t1),
    BLOCK
      WHEN ODD(LENGTH(FIRST(ind))) OR ODD(LENGTH(SECOND(ind))) OR
        ODD(LENGTH(THIRD(ind))) OR ODD(LENGTH(FIRST(NTHNODE(ind,6)))+
        LENGTH(FIRST(NTHNODE(ind,7)))) EXIT,
      fat: fat + INTEGR2(ind),
    ENDBLOCK,
  ENDLLOOP,
ENDBLOCK,
ENDLOOP,
exp1: FACTOR(fat), GRAVA(ft,ft==exp1),
ENDFUN$

```

```

FUNCTION CONTA(exp,%local:% var,ind,nv,ct,fd,tx,t1),
  var:[Z,z,G,g,k,E,kg],  nv:[0,0,0,0,0,0,1],  POP(exp),
  ind:[FALSE,FALSE,FALSE,FALSE,FALSE,FALSE,FALSE,1],
  LOOP
    WHEN EMPTY(tx:POP(exp)), EXIT,
    ct:fd:1,
    LOOP
      WHEN (ct = 8), EXIT,
      BLOCK
        WHEN FREE(tx,var[ct]), ct:ct+1 EXIT,
        fd:2,
        BLOCK
          WHEN FIRST(tx) EQ '^', nv[ct]:nv[ct]+THIRD(tx) EXIT,
          nv[ct]:nv[ct]+1,
          WHEN FIRST(tx) EQ var[ct],
            ind[ct]:APPEND(REST(tx),ind[ct]) EXIT,
          ENDBLOCK,
          ct:8,
        ENDBLOCK,
      ENDLLOOP,
      BLOCK
        WHEN (fd=2), EXIT, ind[8]:ind[8]*tx,
      ENDBLOCK,
    ENDLLOOP,
    LIST(ind[1],ind[2],ind[3],ind[6],ind[8],ind[4],ind[5],
      nv[7],nv[4],nv[1],nv[2],nv[3]),
  ENDFUN$

```

```

FUNCTION QTY(exp,var,% local variable % t0,ll),
  ll:0,  POP(exp),
  LOOP
    WHEN EMPTY(t0:POP(exp)), ll EXIT,
    BLOCK
      WHEN FREE(t0,var), EXIT,
      WHEN FIRST(t0) EQ '^', ll:ll+THIRD(t0) EXIT,
      ll:ll+1,
    ENDBLOCK
  ENDLLOOP
ENDFUN$

```

```

FUNCTION C(ind),
  (G(ind) - g(ind)/2)* (K+1)/K
ENDFUN$

```

```

FUNCTION W(ind),
  (Z(ind) - z(ind)/2) * (K+1)/K
ENDFUN$

```

```

FUNCTION CL(ind),
  WHEN ind='i,
    C(i) + (g(i)-a E(i,ia,ib) k(ia)*(Z(ib)+s(ib))+
      1/K k(i) kg) EXIT,
    C(ind) + (g(ind)-a E(ind,ic,id) k(ic)*(Z(id)+s(id))+
      1/K k(ind) kg)
ENDFUN$

FUNCTION WL(ind),
  W(ind)-2/a/K E(ind,ja,jb) k(ja) g(jb) - 2/K k(ind) k(ja)
    * (Z(ja)+s(ja)) + 2/K * (s(ind) + Z(ind)),
ENDFUN$

FUNCTION C2(ind),
  WHEN ind='L,
    CL(ih)*(C(ih) + (g(ih)-a E(ih,im,in) k(im)*(Z(in)+s(in))
      +1/K k(ih) kg)) EXIT,
    (G^2 - G(ih) g(ih) + 1/4 g^2) * ((K+1)/K)^2
ENDFUN$

FUNCTION W2(ind),
  WHEN ind='L,
    9 Z^2/K^2 + 6 Z^2/K + 1/4 z^2/K^2 + 4 g^2/(a^2 K^2)
    + z^2/(2 K) + Z^2 - Z(ih) z(ih) + 1/4 z^2
    - 4/K Z(ih) z(ih) + 4/K Z(ih) s(ih)
    - 4/(K^2 a^2) g(ja) k(ja) g(jb) k(jb)
    - 12/(a K^2) E(ih,ja,jb) Z(ih) k(ja) g(jb)
    + 8/(a K^2) E(ih,ja,jb) Z(im) k(ja) g(jb) k(im) k(ih)
    - 8/(a K^2) E(ih,ja,jb) s(ih) k(ja) g(jb)
    + 8/(a K^2) E(ih,ja,jb) s(im) k(ja) g(jb) k(im) k(ih)
    + 2/(a K^2) E(ih,ja,jb) z(ih) k(ja) g(jb)
    - 4/(a K) E(ih,ja,jb) Z(ih) k(ja) g(jb)
    + 2/(a K) E(ih,ja,jb) z(ih) k(ja) g(jb)
    - 8/K^2 Z(ja) Z(jb) k(ja) k(jb) - 4/K Z(ja) Z(jb) k(ja) k(jb)
    - 12/K^2 Z(ja) s(jb) k(ja) k(jb) - 4/K Z(ja) s(jb) k(ja) k(jb)
    + 12/K^2 Z(ja) s(ja) - 3/K^2 Z(ja) z(ja)
    + 2/K^2 Z(ja) z(jb) k(ja) k(jb) + 2/K Z(ja) z(jb) k(ja) k(jb) EXIT,
    (Z^2 - Z(ih) z(ih) + 1/4 z^2) * ((K+1)/K)^2
ENDFUN$

ff1:EXPAND(1+ p(jm,jt)/2/ro *(m/KT)^2 *(2 G(jm) G(jt)+ g(jm) g(jt)/2)+
  wt/2/ro * (m/KT)^2 * (2 G^2 + g^2/2 - 2 I/m Z^2 - I/m/2 z^2)+
  ms(jm,jt)/ro * (m/KT)^2 I/m * (2 Z(jm) G(jt) + z(jm) g(jt) /2)+
  q(jm)/ro * (m/KT)^2 * (2 G(jm) * ((m/5/KT)*(G^2+g^2/4)-1) +
    (m/5/KT) * G(jt) g(jt) g(jm))+
  h(jm)/ro * (m/KT)^2 * (2 G(jm) * ((I/3/KT)*(Z^2+z^2/4)-1) +
    (I/3/KT) * Z(jt) z(jt) g(jm)))$

```

```
ff1II: LIST('1,'1)$
```

```
FUNCTION Dff(ex0),
  EXPAND( - m/KT/T g(jm) G(jm) DT(ex0)
          - I/KT/T Z(jm) z(jm) DT(ex0) -
  m/KT g(jm) Dv(jm,ex0) - I/KT z(jm) Ds(jm,ex0) -
  (m/KT)^2/2/ro Dp(jm,jt,ex0) * (G(jm) g(jt)+G(jt) g(jm)) -
  (m/KT)^2/ro Dwt(ex0) * (G(jm) g(jm) - I/m Z(jm) z(jm)) -
  (m/KT)^2 I/m/ro Dms(jm,jt,ex0)*(Z(jm) g(jt)+G(jt) z(jm))-
  (m/KT)^2/ro Dq(jm,ex0) * (m/5/KT * ( 2 G(jt) G(jm) g(jt) +
          G^2 g(jm) + g^2 g(jm)/4 ) - g(jm)) -
  (m/KT)^2/ro Dh(jm,ex0) * (I/3/KT * ( 2 Z(jt) z(jt) G(jm) +
          Z^2 g(jm) + z^2 g(jm)/4 ) - g(jm)))
ENDFUN$
```

```
FUNCTION DffII(ex0),
  EXPAND( - m/KT/T g(jm) G(jm) DT(ex0)
          - I/KT/T Z(jm) z(jm) DT(ex0) -
  m/KT g(jm) Dv(jm,ex0) - I/KT z(jm) Ds(jm,ex0))
ENDFUN$
```

```
FUNCTION INTEGR2(ind,% local:% cont,exp1,l1,
                 l2,in1,in2,t1,t2,cte,nn,l3),
  cont:l1:in1:1,
  LOOP
    WHEN (l1=4) , EXIT,
    l2:LENGTH(in2:CUT(POP(ind))),
    l1:l1+1,
    in1:in1/DF(l2+1),
    BLOCK
      WHEN ZERO(l2), EXIT,
      WHEN l2=4, in1: in1 * B4(in2) EXIT,
      WHEN l2=6, in1: in1 * B6(in2) EXIT,
      t1:POP(in2),
      t2:POP(in2),
      BLOCK
        WHEN t1 EQ t2, in1:in1 * 3 EXIT,
        WHEN NOT FREE(ind,t1), ind:SUB(ind,t1,t2) EXIT,
        WHEN NOT FREE(ind,t2), ind:SUB(ind,t2,t1) EXIT,
        in1: in1 * delta(t1,t2),
      ENDBLOCK,
    ENDBLOCK,
  ENDLLOOP,
  l2:LENGTH(in2:POP(ind)),
  BLOCK
    WHEN ZERO(l2), cte:1, EXIT,
    WHEN l2=3, cte:E(POP(in2),POP(in2),POP(in2)) EXIT,
```



```

    cte:EPSILON(in2)
ENDBLOCK,
cte: 2 pi cte in1 INTGK(POP(ind),POP(ind),POP(ind),nn:POP(ind)),
nn:nn+POP(ind),
BLOCK
    WHEN EVEN(nn), t1:(2 pi)^(3/2) DF(nn+1)
        * (2 KT/m)^((nn+3)/2) EXIT,
    nn: (nn+1)/2,
    t1: 2 pi nn! * (4 KT/m)^(nn+1),
ENDBLOCK,
t1:a^2 cte*(ro/m)^2/((2 pi KT)^6)*(pi^(9/2)) *
DF((l1:POP(ind))+1) * DF((l2:POP(ind))+1)
    * DF((l3:POP(ind))+1) * t1*((1/2)^((l1+l2+l3)/2))
    * ((KT/I)^((l1+3)/2))*(4 KT/I)^((l2+3)/2) *
    ((KT/m)^((l3+3)/2)) m^3 I^3,
SIMPLEp(t1),
ENDFUN$

FUNCTION SIMPLEp(exp1,t0,fat),
fat:0, exp1: EXPAND(exp1),
BLOCK
    WHEN SUM(exp1), POP(exp1) EXIT,
    exp1: LIST(exp1),
ENDBLOCK,
LOOP
    WHEN EMPTY(t0:POP(exp1)), fat EXIT,
    fat: fat + SIMPLEs(t0),
ENDLOOP
ENDFUN$

FUNCTION SIMPLEs(exp,fat,ind,t0),
    WHEN FREE(exp,'delta'),
        EVAL(FCTR(3/2 CORTA(exp)*(K^nc) m/(pi X ro a^3))) EXIT,
POP(exp), fat:1, ind:FALSE,
LOOP
    WHEN EMPTY(t0:POP(exp)), EXIT,
    BLOCK
        WHEN FREE(t0,'delta'), fat:fat * t0 EXIT,
        WHEN FIRST(t0) EQ '^', fat: 3 * fat EXIT,
        PUSH(SECOND(t0),ind),
        PUSH(THIRD(t0),ind),
    ENDBLOCK,
ENDLOOP,
EVAL(FCTR(CORTA(CONTRACT(CONCATEN(ind,LIST(fat))))
    * 3/2 * (K^nc) m/(pi X ro a^3))),
ENDFUN$

```

```

FUNCTION DF(nn),
  WHEN ONE(nn), 1 EXIT,
  nn*DF(nn-2),
ENDFUN$

```

```

FUNCTION CUT(ind,%local:% t0,fat),
  WHEN (LENGTH(ind) < 2) OR ATOM(ind), ind EXIT,
  ind:FCTR(PUSH('*',ind)),
  WHEN (POP(ind) EQ '^) , FALSE EXIT,
  fat:FALSE,
  LOOP
    WHEN EMPTY(t0:POP(ind)), fat EXIT,
    BLOCK
      WHEN FIRST(t0) EQ '^, EXIT,
      PUSH(t0,fat),
    ENDBLOCK,
  ENDLOOP,
  BLOCK
    WHEN ONE(LENGTH(fat)), POP(fat) EXIT,
    fat,
  ENDBLOCK
ENDFUN$

```

```

FUNCTION B4(iaux,%local:% u1,u2,u3,u4),
  CONTRACT(LIST(u1:POP(iaux), u2:POP(iaux), u3:POP(iaux),
    u4:POP(iaux),1)) + CONTRACT(LIST(u1,u3,u2,u4,1)) +
  CONTRACT(LIST(u1,u4,u2,u3,1)),
ENDFUN$

```

```

FUNCTION B6(iaux,%local:% u1,u2,u3,u4,u5,u6),
  delta(u1:POP(iaux),u2:POP(iaux)) B4(iaux) +
  delta(u1,u3:POP(iaux)) B4(CONCATEN(LIST(u2),iaux)) +
  delta(u1,u4:POP(iaux)) B4(CONCATEN(LIST(u2,u3),iaux)) +
  delta(u1,u5:POP(iaux)) B4(LIST(u2,u3,u4,u6:POP(iaux))) +
  delta(u1,u6) B4(LIST(u2,u3,u4,u5)),
ENDFUN$

```

```

FUNCTION INTGK(cte,ing,ink,nn,%local:% lk,lg,t1,t2,u1,u2,u3,u4),
  ink:CUT(ink),
  ing:CUT(ing),
  BLOCK
    WHEN ATOM(ink) AND NOT(NOT(ink)), ink:LIST(ink) EXIT,
  ENDBLOCK,
  BLOCK
    WHEN ATOM(ing) AND NOT(NOT(ing)), ing:LIST(ing) EXIT,
  ENDBLOCK,
  lk:LENGTH(ink),

```

```

lg:LENGTH(ing),
WHEN ZERO(1k+lg), cte/(nn+1) EXIT,
WHEN ZERO(1k) AND (lg=2),
    1/3/(nn+1) CONTRACT(LIST(POP(ing),POP(ing),cte)) EXIT,
WHEN ZERO(1k) AND (lg=4), cte/(nn+1)/15 B4(ing) EXIT,
WHEN ZERO(1k) AND (lg=6), cte*B6(ing)/(nn+1)/105 EXIT,
WHEN ONE(lg*1k), cte/3/(nn+2)* delta(POP(ing),POP(ink)) EXIT,
WHEN ONE(1k) AND (lg=3),
    cte*B4(CONCATEN(ink,ing))/(nn+2)/15 EXIT,
WHEN ONE(1k) AND (lg=5),
    cte*B6(PUSH(POP(ink),ing))/(nn+2)/105 EXIT,
WHEN (1k=2) AND ZERO(lg),
    1/3/(nn+1) CONTRACT(LIST(POP(ink),POP(ink),cte)) EXIT,
WHEN (1k=2) AND (lg=2), cte/(nn+1)/(nn+3) *
    (CONTRACT(LIST(t1:POP(ing),t2:POP(ing),
    u1:POP(ink),u2:POP(ink),1))/3
    + nn/15 * B4(LIST(t1,t2,u1,u2))) EXIT,
WHEN (1k=2) AND (lg=4), cte/(nn+1)/(nn+3) *
    (CONTRACT(LIST(u1:POP(ink),u2:POP(ink),B4(ing)))/15
    + nn/105 * B6(CONCATEN(LIST(u1,u2),ing))) EXIT,
WHEN (1k=3) AND ONE(lg),
    cte*B4(PUSH(POP(ing),ink))/(nn+2)/15 EXIT,
WHEN (1k=3) AND (lg=3), cte:cte/15/(nn+2)/(nn+4) *
    (CONTRACT(LIST(u1:POP(ink),u2:POP(ink),
        B4(CONCATEN(LIST(u3:POP(ink)),ing))))+
    CONTRACT(LIST(u2,u3,B4(CONCATEN(LIST(u1),ing)))) +
    CONTRACT(LIST(u1,u3,B4(CONCATEN(LIST(u2),ing)))) +
    (nn-1)/7 * B6(CONCATEN(LIST(u1,u2,u3),ing))) EXIT,
WHEN (1k=3) AND (lg=5) AND (nn = 1), cte:cte/(15 * 105) *
    (delta(u1:POP(ink),u2:POP(ink))
    B6(CONCATEN(LIST(u3:POP(ink)),ing))+
    delta(u2,u3) B6(CONCATEN(LIST(u1),ing)) +
    delta(u1,u3) B6(CONCATEN(LIST(u2),ing))) EXIT,
WHEN (1k=4) AND ZERO(lg), cte/(nn+1)/15 B4(ink) EXIT,
WHEN (1k=4) AND (lg=2), cte/(nn+1)/(nn+3)/(nn+5) *
    (CONTRACT(LIST(t1:POP(ing),t2:POP(ing),B4(ink)))/3+(nn/15)*
    (CONTRACT(LIST(u1:POP(ink),u2:POP(ink),
        B4(CONCATEN(LIST(t1,t2),ink))))+
    CONTRACT(LIST(u3:POP(ink),u4:POP(ink),
        B4(LIST(t1,t2,u1,u2)))) +
    CONTRACT(LIST(u2,u4,B4(LIST(t1,t2,u1,u3)))) +
    CONTRACT(LIST(u2,u3,B4(LIST(t1,t2,u1,u4)))) +
    CONTRACT(LIST(u1,u4,B4(LIST(t1,t2,u2,u3)))) +
    CONTRACT(LIST(u1,u3,B4(LIST(t1,t2,u2,u4)))))+
    nn * (nn-2)/105 * B6(LIST(t1,t2,u1,u2,u3,u4))) EXIT,
WHEN (1k = 5), cte/105/(nn+2) * B6(PUSH(POP(ing),ink)) EXIT,
ENDFUN$

```

```

FUNCTION p(x,y,% local variable % ind),
  WHEN x=y, 0 EXIT,
  ind:x*y,
  POP(ind),
  LIST('p,POP(ind),POP(ind))
ENDFUN$

FUNCTION Dp(x1,x2,x3,% local variable % ind),
  WHEN x1=x2, 0 EXIT,
  ind:x1*x2,
  POP(ind),
  LIST('Dp,POP(ind),POP(ind),x3),
ENDFUN$

FUNCTION delta(x,y,%local:%ind),
  WHEN (x EQ y), 3 EXIT,
  ind:x*y, POP(ind),
  LIST('delta,POP(ind),POP(ind)),
ENDFUN$

UNCTION E(x1,x2,x3,% local variable % ind,t1,t2,t3),
  WHEN (x1=x2) OR (x1=x3) OR (x2=x3), 0 EXIT,
  ind: x1*x2*x3,POP(ind),t1:POP(ind),t2:POP(ind),t3:POP(ind),
  BLOCK
    WHEN ((t1=x2) AND (t2=x1)) OR ((t1=x3) AND (t3=x1))
      OR ((t2=x3) AND (t3=x2)),
      (-1)* LIST('E,t1,t2,t3) EXIT,
      LIST('E,t1,t2,t3)
  ENDBLOCK
ENDFUN$

FUNCTION EPSILON(ind,% local variable % t1,t2,t3,u1,u2,u3,v1,lT),
  t1:POP(ind),t2:POP(ind),t3:POP(ind),
  WHEN (t1 EQ t2) OR (t1 EQ t3) OR (t2 EQ t3), 0 EXIT,
  u1:POP(ind),u2:POP(ind),u3:POP(ind),
  WHEN (u1 EQ u2) OR (u1 EQ u3) OR (u2 EQ u3), 0 EXIT,
  BLOCK
    WHEN EMPTY(v1:POP(ind)), lT:1 EXIT,
    lT:E(v1,POP(ind),POP(ind)),
  ENDBLOCK,
  CONTRACT(LIST(t1,u1,t2,u2,t3,u3,lT)) +
  CONTRACT(LIST(t2,u1,t3,u2,t1,u3,lT)) +
  CONTRACT(LIST(t3,u1,t1,u2,t2,u3,lT)) -
  CONTRACT(LIST(t3,u1,t2,u2,t1,u3,lT)) -
  CONTRACT(LIST(t2,u1,t1,u2,t3,u3,lT)) -
  CONTRACT(LIST(t1,u1,t3,u2,t2,u3,lT)),
ENDFUN$

```

```

FUNCTION CONTRACT(ind,% local:% t1,t2,fat),
  fat:1,
  LOOP
    WHEN EMPTY(t1:POP(ind)), EVAL(fat) EXIT,
    t2:POP(ind),
    BLOCK
      WHEN NOT (ind), fat:fat*t1, EXIT,
      BLOCK
        WHEN NOT FREE(ind,t1), ind:SUB(ind,t1,t2) EXIT,
        WHEN NOT FREE(ind,t2), ind:SUB(ind,t2,t1) EXIT,
        fat: fat delta(t1,t2),
      ENDBLOCK
    ENDBLOCK
  ENDLLOOP
ENDFUN$

FUNCTION FACTOR(exp,%local:% tt0,lista1,lista2,lista3,fatt2,
                fatt3,t1,tt1,trm,num % global: fatt %),
  lista1: LIST(wt(0),s(1),DT(1),Dwt(1),q(1),h(1),Dq(2),Dh(2),
    ms(2),Dv(2),Ds(2),p(2),Dp(3),Dms(3),LIST('E,3),delta(3)),
  lista2: LIST(i,j,l,r,n), fatt2:fatt:EXPAND(exp),
  NUMNUM:0, NUMDEN:0, DENNUM:0, DENDEN:0, fatt3:0,
  LOOP
    WHEN EMPTY(t1:POP(lista1)),
      X b ro * EVSUB(fatt3,a^2,4 I/m/K) EXIT,
    trm:POP(t1), num:POP(t1),
    BLOCK
      WHEN FREE(fatt,trm), EXIT,
      BLOCK
        WHEN ZERO(num), fatt3: fatt3 +
          FACT2(fatt2,trm), fatt2: fatt EXIT,
        WHEN ONE(num), nc:1,
        LOOP
          WHEN nc = 6, EXIT,
          tt1: LIST(trm,FIRST(NTHNODE(lista2,nc))),
          nc: nc + 1,
          fatt3: fatt3 + FACT2(fatt2,tt1), fatt2: fatt,
        ENDLLOOP EXIT,
        WHEN (num = 2), nl:1,
        LOOP
          WHEN nl = 6, EXIT, nc:1,
          LOOP
            WHEN nc = 6, EXIT,
            tt1:LIST(trm,FIRST(NTHNODE(lista2,nc)),
              FIRST(NTHNODE(lista2,nl))), nc:nc+1,
            fatt3:fatt3 + FACT2(fatt2,tt1), fatt2:fatt,
          ENDLLOOP,

```

```

        nl:nl+1,
    ENDLOOP EXIT,
WHEN (num = 3),
    BLOCK
    WHEN (trm EQ 'Dms),
        lista3:LIST(Dms(i,r,n), Dms(r,i,n), Dms(r,n,i),
            Dms(i,r,r), Dms(r,r,i), Dms(r,i,r),
            Dms(j,r,n), Dms(r,j,n), Dms(r,n,j)) EXIT,
    WHEN (trm EQ 'Dp),
        lista3:LIST(Dp(i,r,n),Dp(r,j,n),Dp(r,l,n),Dp(i,r,r))
            EXIT,
    WHEN (trm EQ 'E), lista3:LIST(E(i,j,l)) EXIT,
    WHEN (trm EQ 'delta), lista3:LIST(delta(i,j)) EXIT,
ENDBLOCK,
    LOOP
        WHEN EMPTY(tt1: POP(lista3)), EXIT,
        fatt3: fatt3 + FACT2(fatt2,tt1), fatt2: fatt,
    ENDLOOP EXIT,
ENDBLOCK,
ENDBLOCK,
ENDLOOP,
ENDFUN$

```

```

FUNCTION FACT2(fatt2,tt1,t0,cont,fat2,st2
    %global: fatt,st,fatev % ),
WHEN FREE(fatt2,tt1), 0 EXIT,
BLOCK
    WHEN SUM(fatt2), POP(fatt2) EXIT,
    fatt2: LIST(fatt2),
ENDBLOCK,
fat2:0,
LOOP
    WHEN EMPTY(t0:POP(fatt2)), EXIT,
    BLOCK
        WHEN FREE(t0,tt1), EXIT,
        fat2: fat2 + FACT3(t0), fatt: fatt - t0,
    ENDBLOCK,
ENDLOOP,
cont : 3,
LOOP
    WHEN ZERO(PREM(fat2,(1+K)^cont,K)), EXIT,
    cont : cont - 1,
ENDLOOP,
fat2: PQUOT(fat2,(1+K)^cont,K), st2: PQUOT(st,(1+K)^cont,K),
fatev: FCTR(fatev * fat2),
fatev/st2,
ENDFUN$

```

```

FUNCTION FACT3(t0,%local:% t1,fat1,fat2 % global: fatev %),
  fatev:1, POP(t0), fat1:1,
  LOOP
    WHEN EMPTY(t1:POP(t0)), fat1 EXIT,
  BLOCK
    WHEN INTEGER(t1) OR INTEGER(SECOND(t1)) OR NOT(FREE(t1,K)),
      fat1: fat1 * t1 EXIT,
      fatev:fatev * t1,
  ENDBLOCK,
  ENDLLOOP,
ENDFUN$

```

B: 'B\$

```

FUNCTION CORTA(FF,fat,t1,tm,u1,u2,u3,v1,v2),
  WHEN ZERO(FF), 0 EXIT,
  fat:1, POP(FF), FF:SUB(FF,KT^(1/2),( pi m T)^(1/2) a/B),
  LOOP
    WHEN EMPTY(t1:POP(FF)), SUB(fat,'I, a^2 m/4 K) EXIT,
  BLOCK
    WHEN NOT FREE(t1,'E),
      POP(t1),u1:POP(t1),u2:POP(t1),u3:POP(t1),
    BLOCK
      WHEN NOT FREE(FF,'p), ind:INDICES(FF),
    BLOCK
      WHEN (NOT(FREE(ind,u1)) AND NOT(FREE(ind,u2))) OR
          (NOT(FREE(ind,u1)) AND NOT(FREE(ind,u3))) OR
          (NOT(FREE(ind,u2)) AND NOT(FREE(ind,u3))),
        fat:0 EXIT,
    ENDBLOCK EXIT,
  ENDBLOCK,
  ctr:0,
  BLOCK
    WHEN NOT FREE(FF,u1), ctr: ctr + 1 EXIT,
  ENDBLOCK,
  BLOCK
    WHEN NOT FREE(FF,u2), ctr: ctr + 2 EXIT,
  ENDBLOCK,
  BLOCK
    WHEN NOT FREE(FF,u3), ctr: ctr + 4 EXIT,
  ENDBLOCK,
  BLOCK
    WHEN ctr = 0, fat: fat * LIST('E,u1,u2,u3) EXIT,
    WHEN ctr = 1, FF: EVSUB(FF,u1,r),
      fat: fat * E(r,u2,u3) EXIT,
    WHEN ctr = 2, FF: EVSUB(FF,u2,r),

```

```

        fat: fat * E(u1,r,u3) EXIT,
WHEN ctr = 3, FF: EVSUB(FF,u1,r),
        FF: EVSUB(FF,u2,n),
        fat: fat * E(r,n,u3) EXIT,
WHEN ctr = 4, FF: EVSUB(FF,u3,r),
        fat: fat * E(u1,u2,r) EXIT,
WHEN ctr = 5, FF: EVSUB(FF,u1,r),
        FF: EVSUB(FF,u3,n),
        fat: fat * E('r,u2,n) EXIT,
WHEN ctr = 6, FF: EVSUB(FF,u2,r),
        FF: EVSUB(FF,u3,n),
        fat: fat * E(u1,r,n) EXIT,
ENDBLOCK EXIT,
WHEN NOT (FREE(t1,'ms) AND FREE(t1,'Dq) AND FREE(t1,'Dv)
        AND FREE(t1,'Ds) AND FREE(t1,'Dh)) ,
        tm:POP(t1),u1:POP(t1),u2:POP(t1),
        ind: u1 * u2,POP(ind),v1:POP(ind),
BLOCK
    WHEN (u1 EQ u2), fat: fat * LIST(tm,r,r) EXIT,
    WHEN (u1 EQ v1) OR FREE(fat,'E),
        fat: fat * LIST(tm,u1,u2) EXIT,
    WHEN FREE(fat,u1) OR FREE(fat,u2),
        fat:fat * LIST(tm,u1,u2) EXIT,
    fat: fat * (-1) * LIST(tm,u2,u1),
ENDBLOCK EXIT,
WHEN NOT (FREE(t1,'Dms) AND FREE(t1,'Dp)),
        tm:POP(t1),u1:POP(t1),u2:POP(t1),u3:POP(t1),
BLOCK
    WHEN (u1 EQ u2), fat: fat * LIST(tm,r,r,u3) EXIT,
    WHEN (u1 EQ u3), fat: fat * LIST(tm,r,u2,r) EXIT,
    WHEN (u2 EQ u3), fat: fat * LIST(tm,u1,r,r) EXIT,
    ctr:0,
BLOCK
    WHEN (u1 EQ 'i) OR (u1 EQ 'j) OR (u1 EQ 'l), ctr:ctr+1 EXIT,
ENDBLOCK,
BLOCK
    WHEN (u2 EQ 'i) OR (u2 EQ 'j) OR (u2 EQ 'l), ctr:ctr+2 EXIT,
ENDBLOCK,
BLOCK
    WHEN (u3 EQ 'i) OR (u3 EQ 'j) OR (u3 EQ 'l), ctr:ctr+4 EXIT,
ENDBLOCK,
BLOCK
    WHEN FREE(fat,'E), fat:fat*LIST(tm,u1,u2,u3) EXIT,
    WHEN (ctr=1), ind:u2*u3, POP(ind), v1:POP(ind), v2:u2 EXIT,
    WHEN (ctr=2), ind:u1*u3, POP(ind), v1:POP(ind), v2:u1 EXIT,
    WHEN (ctr=4), ind:u1*u2, POP(ind), v1:POP(ind), v2:u1 EXIT,
    fat:fat*LIST(tm,u1,u2,u3),

```



```

ENDBLOCK,
BLOCK
  WHEN (v1 EQ v2), fat:fat*LIST(tm,u1,u2,u3) EXIT,
  WHEN (ctr = 1), fat:fat*(-1)*LIST(tm,u1,u3,u2) EXIT,
  WHEN (ctr = 2), fat:fat*(-1)*LIST(tm,u3,u2,u1) EXIT,
  WHEN (ctr = 4), fat:fat*(-1)*LIST(tm,u2,u1,u3) EXIT,
ENDBLOCK,
ENDBLOCK EXIT,
fat: fat * t1,
ENDBLOCK,
ENDLOOP,
ENDFUN$

```

```

FUNCTION INDICES(FF,%local:% t0),
  LOOP
    WHEN NOT FREE(t0:POP(FF),'p), REST(t0) EXIT,
  ENDLOOP
ENDFUN$

```

```

FUNCTION GRAVA lista,
  WRS(POP(lista),'RES','C,TRUE),
  LOOP
    WHEN EMPTY (lista),
      WRS() EXIT,
    PRTMATH(POP(lista)),
    NEWLINE(2)
  ENDLOOP
ENDFUN$

```

```

RDS()$

```

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] AERO, E. L.; BULYGIN, A. N. ; KUVSHINSKII, E. V. *Asymmetric hydromechanics*. Appl. Math. Mech. 29 (1965), 33.
- [2] BORN, M. *Über die Beweglichkeit der elektrolytischen Ionen*. Z. Phys. 1 (1920), 221-249.
- [3] CHAPMAN, S. & COWLING, T. G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press, Cambridge, 1970.
- [4] CONDIFF, D. W. & DAHLER, J. S. *Fluid mechanical aspects of antisymmetric stress*. Phys. Fluids 7 (1964), 842-854.
- [5] COSSERAT, E. & COSSERAT, F. *Sur la mécanique générale*. C. R. Acad. Sci. 145 (1907), 1139-1142.
- [6] COSSERAT, E. & COSSERAT, F. *Sur la théorie des corps minces*. C. R. Acad. Sci. 146 (1908), 169-172.
- [7] COSSERAT, E. & COSSERAT, F. *Théorie des corps déformables*. Hermann, Paris, 1909.
- [8] COWIN, S.C. *Mechanics of Cosserat continua*. Ph.D. Thesis. The Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania, 1962.
- [9] COWIN, S. C. *The Theory of Polar Fluids*. Adv. Appl. Mech., 14 (1974), 279-347.
- [10] DAHLER, J. S. & THEODOSOPULU, M. *The Kinetic Theory of Dense Polyatomic Fluids, in Non Simple Liquids*. edited by I. Prigogine and S. A. Rice, Advances in Chemical Physics Vol XXXI (1975), 155-229, John Wiley, New York, 1975
- [11] ENSKOG, D. *Kinetic Theory of Heat Conduction, Viscosity, and Self-Diffusion in Compressed Gases and Liquids*. Tradução de J. Kopp em *Kinetic Theory*, vol. III, editor S. G. Brush, 226-259, Pergamon Press, Oxford, 1972.
- [12] ERINGEN, A. C. *Theory of micropolar fluids*. J. Math Mech. 16 (1966), 1-18.
- [13] GRAD, M. *On the Kinetic Theory of Rarefied Gases*. Commun. Pure Appl. Math. 2 (1949), 331-407.
- [14] GRAD, M. *Statistical Mechanics, thermodynamics, and fluid dynamics of systems*. Commun. Pure Appl. Math. 5, (1952) 455-494.
- [15] IKENBERRY, E. & TRUESDELL, C. *On the Pressures and the Flux of Energy in a Gas According to Maxwell's Kinetic Theory I*. J. Rational Mech. Anal. 5 (1956), 1-54.
- [16] KREMER, G. M. *Kinetic Theory of a Rarefied Gas of Rough Spheres*. Rev. Bras. Fís. 17 (1987), 370-386.

- [17] KREMER, G. M. & CERCIGNANI, C. *Wave Propagation in a Rarefied Gas of Rough Spheres, in Proceedings of the 15<sup>th</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*. V. Boffi and C. Cercignani, (1986) 110-121, B. G. Teubner, Stuttgart.
- [18] KREMER, G. M. & ROSA JR., E. *On Enskog's Dense Gas Theory. I. The Method of Moments for Monatomic Gases*. J. Chem. Phys. 89 (1988), 3240-3247.
- [19] LESLIE, F. M. *On the Thermodynamics of Polar Fluids*. Arch. Rational Mech. Anal., 70 (1979), 189-202.
- [20] MCCOY, B. J.; SANDLER, S.I.; DAHLER, J.S. *Transport Properties of Polyatomic Fluids. IV. The Kinetic Theory of a Dense Gas of Perfectly Rough Spheres*. J. Chem. Phys., 45 (1966), 3485-3512.
- [21] POINTON, A. J. *An Introduction to Statistical Physics for Students*. Longman, London, 1967.
- [22] REID, R. C. & SHERWOOD, T. K. *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill, New York, 1966.
- [23] RESIBOIS, P. & DE LEENER, M. *Classical Kinetic Theory of Fluids*. Wiley, New York, 1977.
- [24] RODBARD, M.G. & KREMER, G. M. *Kinetic Theory for Mixtures of Polyatomic Gases of Rough Spherical Molecules*. Phys. Fluids A, 2 (1990) 1269-1280.