

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Formas Discretas da Equação de Boltzmann para a Magnetohidrodinâmica.

Tese submetida à

Universidade Federal de Santa Catarina

para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

EDUARDO DE CARLI DA SILVA

Florianópolis, abril de 2010

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PROGRAMA DE
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**Formas Discretas da Equação de Boltzmann para a
Magnetohidrodinâmica.**

EDUARDO DE CARLI DA SILVA

Esta tese foi julgada adequada para obtenção do título de

DOUTOR EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA

sendo aprovada em sua forma final.

Paulo Cesar Philippi, Dr. Ing. - Orientador

Luís Orlando Emerich dos Santos, Dr. Eng. - Co-orientador

Eduardo Alberto Fancello, D.Sc. - Coordenador do curso

BANCA EXAMINADORA

Paulo Cesar Philippi, Dr. Ing. - Presidente

Demétrio Bastos Netto, Ph.D. - Relator

Nilton da Silva Branco, Dr.

Paulo Cesar Facin, Dr.

Sidney dos Santos Avancini, Dr.

Mais importante do que vencer etapas em nossas vidas,
é empregar a experiência de cada conquista
na construção de um mundo mais justo.

À minha esposa Giséli,
Aos meus filhos Rafael e Gabriela.

Agradecimentos

A vida é feita muito mais pela intensidade das relações que estabelecemos com as pessoas do que de qualquer outra coisa, e o empenho de um doutorado é muito mais emocional do que intelectual, por isso os agradecimentos nunca serão o bastante às pessoas que deram suporte a este trabalho:

Ao professor Paulo César Philippi pela oportunidade de ingresso ao Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas - LMPT e pelo suporte ao início deste trabalho quando ingressei na empresa WEG Equipamentos Elétricos.

Ao professor Luís Orlando Emerich dos Santos, com quem aprendi muito mais do que uma técnica matemática, mas também por todas as discussões sobre ciência e atualidades.

Aos professores José Antônio Bellini da Cunha Neto, Celso Peres Fernandes e Alvaro Toubes Prata pelo apoio e postura profissional.

Aos amigos do LMPT Luiz Adolfo Hegele Jr, Rodrigo Surmas, Carlos Enrique Pico Ortiz, Fabiano G. Wolf, Diogo Nardelli Siebert, Alexandre Dutra Alves, Saulo Güths, Eduardo Mayer pelas intermináveis discussões sobre física pela amizade e pelos ótimos momentos compartilhados.

Aos meus pais Álvaro e Vera e meus irmãos Ricardo e Adriana pelo incalculável suporte emocional.

À Yamara, pela sensibilidade e profissionalismo, qualidades tão difíceis de se encontrar em uma pessoa e a quem devo grande parte da minha estabilidade emocional.

À minha inestimável esposa Giselli e aos meus queridos filhos Rafael e Gabriela, pela incrível aventura da Vida.

À Vera e Carlos pelos bons momentos e suporte nas horas difíceis.

À todo o Grupo WEG, em especial ao Sr. Umberto Gobatto pela iniciativa em financiar este trabalho, ao Sr. Ivo Gunter pelo suporte no desenvolvimento deste tema, ao Fábio Decker de Souza pelo apoio, amizade, interesse e por ter acompanhado tão de perto todas as etapas do desenvolvimento deste trabalho, ao Ricardo da Rocha Brando pela amizade e a todos os amigos da engenharia de desenvolvimento de componentes e do grupo WEG Automação.

Aos artistas, pois a vida seria insuportável sem a arte, mas em especial a um grande

artista, o Tio Chico.

À Agência Nacional de Petróleo - ANP, pelo financiamento de parte deste trabalho.

À família Luna, pelos bons momentos e amizade.

Em memória

Na infinita pequenez deste trabalho frente às grandes contribuições de personalidades excepcionais cito¹ Ludwig Boltzmann. Exemplo de uma personalidade a frente de seu tempo, com uma contribuição científica inestimável e o exemplo de que sempre vale a pena investir naquilo que se acredita.

É inacreditável como os resultados nos parecem naturais e simples uma vez descobertos, e quão difíceis são os caminhos que a eles conduzem enquanto ainda não descobertos. Do mesmo modo a dirigibilidade dos aeroplanos, uma vez conhecida, será facilmente obtida pelas mãos de técnicos. Inventada, porém ela só poderá ser por um gênio de primeira grandeza. E este inventor não deverá ser apenas um gênio, ele tem que ser também um herói. Só a duras penas poder-se-á desvendar os segredos dos elementos ainda não conquistados. Apenas aqueles que possuem a bravura de confiar sua vida a estes novos elementos e a arte de vagarosamente se esquivar de suas armadilhas terá a chance de derrotar o dragão que ainda hoje esconde do homem o segredo desta descoberta. O inventor do aeroplano manobrável obrigatoriamente seguirá o exemplo do maior de todos os descobridores, Cristóvão Colombo, que não apenas pela sua bravura, mas também pela sua intuição definiu o exemplo a ser seguido por todos os descobridores do futuro. "Se não colocares sua vida na empreitada, nunca atingirás grandes objetivos". Deixe que aqueles que não conhecem suficientemente as maravilhas da tecnologia do nosso século riam das tentativas de voar.

Palavras premonitórias pronunciadas por Ludwig Boltzmann em conferência de 1894. Infelizmente, Boltzmann morreu um pouco antes de Santos Dumont realizar o primeiro bem sucedido vôo com o 14-bis em 23 de outubro de 1906.

¹Extraído do editorial da edição especial da Revista Brasileira de Ensino de Física: Um tributo a Boltzmann no centenário de sua morte, ISSN 1806-1117

Lista de símbolos

\vec{B}	Campo magnético.
b_α	Componente α do campo magnético.
D	Número de graus de liberdade das partículas constituintes do gás.
\vec{E}	Campo elétrico.
e	Energia interna.
\vec{F}	Força total.
\vec{F}_e	Força de Coulomb.
\vec{F}_m	Força Magnética.
f	Função distribuição de velocidades.
$f^{(0)}$	Distribuição de Maxwell-Boltzmann.
f^{eq}	Distribuição de Maxwell-Boltzmann.
\vec{J}	Densidade de corrente.
k	Constante de Boltzmann.
p	Pressão termodinâmica.
\vec{q}	Fluxo de calor.
T	Campo de temperatura.
u_α	Componente α do campo de velocidade hidrodinâmico.
λ_D	Comprimento de Debye.
ϵ_0	Permissividade do vácuo.
μ_0	Permeabilidade do vácuo.

μ	Viscosidade dinâmica.
$\vec{\xi}$	Velocidade molecular no espaço contínuo.
$\vec{\xi}_i$	Velocidade molecular no espaço discreto, onde i indica direção espacial.
$\xi_{i\alpha}$	Componente α da velocidade molecular no espaço discreto na direção i .
σ	Condutividade elétrica.
η	Resistividade elétrica.
ρ_c	Densidade de cargas.
ρ	Densidade do fluido.
ν	Frequência de colisão.
τ	Tempo de relaxação.
λ_0	Condutividade térmica.
λ_{\perp}	Condutividade térmica perpendicular ao gradiente de temperatura.
λ_H	Condutividade térmica na direção do gradiente de temperatura.
ϵ	Número de Knudsen.
ϵ_{ijk}	Tensor de Levi-Civita.
δ	Tempo discreto.
$\delta_{\alpha\beta}$	Delta de Kronecker.

Sumário

Resumo	p. xiv
Abstract	p. xv
1 Motivação	p. 1
1.1 Fenomenologia e Aplicação	p. 1
1.2 Conceitos básicos em interrupção de correntes	p. 3
1.3 Modelos teóricos, experimentação e softwares comerciais	p. 8
2 Eletromagnetismo	p. 11
2.1 Lei de Gauss	p. 11
2.2 Corrente Elétrica	p. 13
2.3 Força magnética	p. 15
2.4 Não observância de monopolos magnéticos	p. 16
2.5 Lei de Ampère	p. 17
2.6 Indução Eletromagnética	p. 19
2.7 Equações de Maxwell	p. 20
3 Magnetohidrodinâmica: acoplamento entre as equações eletromagnéticas e hidrodinâmicas	p. 23
3.1 Reescrevendo $\vec{J} \times \vec{B}$ como um divergente total	p. 24
3.2 Dinâmica dos campos \vec{E} e \vec{B} no interior do plasma	p. 26
3.3 Modelos magnetohidrodinâmicos	p. 27

4	Conceitos gerais em teoria cinética	p. 29
4.1	Construção da equação de transporte de Boltzmann	p. 29
4.2	O operador de Bhatnagar Gross e Krook - BGK	p. 35
4.3	Conexão entre os estados macroscópicos e microscópicos	p. 37
4.4	Equação geral de transferência	p. 40
4.5	Equações de balanço macroscópicas	p. 42
4.6	Cálculo dos coeficientes de transporte baseado em uma expansão <i>Ad-Hoc</i> da função distribuição em velocidades moleculares	p. 45
4.6.1	Frequência de colisão muito maior que a frequência de oscilação do plasma $w_c \gg \nu$	p. 49
4.6.2	Frequência de colisão da mesma ordem de grandeza da frequência de oscilação do plasma $w_c \sim \nu$	p. 52
4.7	Cálculo dos coeficientes de transporte baseado em uma expansão assin- tótica de Chapman-Enskog	p. 57
5	Discretização da equação de Boltzmann	p. 66
5.1	Discretização espaço-temporal da equação de Boltzmann	p. 68
5.2	Projeção da função distribuição f no espaço de Hilbert	p. 69
5.3	Tratamento do termo de força $F_\alpha \partial_{\xi_\alpha} f$	p. 73
5.4	Discretização do espaço de velocidades	p. 75
5.5	Cálculo das distribuições no equilíbrio	p. 81
5.5.1	Modelo de segunda ordem $D2V9$	p. 81
5.5.2	Modelo de quarta ordem $D2V25$	p. 84
5.5.3	Modelo de quarta ordem $D3V59$	p. 90
5.6	Modelo magnetohidrodinâmico baseado na modificação do segundo mo- mento hidrodinâmico	p. 93
5.7	Discretização das equações eletromagnéticas	p. 96
6	Validação dos modelos discretos	p. 104

6.1	Escoamento de Hartmann	p. 105
6.1.1	Modelo baseado na mudança do segundo momento hidrodinâmico	p. 105
6.1.2	Modelo completo	p. 108
6.1.3	Modelo completo modificado	p. 116
7	Conclusões e trabalhos futuros	p. 119
	Referências	p. 121
	Apêndice A – Colisões Binárias	p. 123
	Apêndice B – Função Delta de Dirac	p. 126
	Apêndice C – Meios deformáveis	p. 127
C.1	Dilatação de um volume de controle	p. 127
C.2	Teorema de transporte de Reynolds	p. 129
	Apêndice D – Formas discretas da equação de Boltzmann	p. 130
D.1	Discretização segundo He e Luo	p. 130
D.2	Discretização por um processo de expansão em série Taylor	p. 134
	Apêndice E – Polinômios tensoriais de Hermite	p. 136
	Apêndice F – Ortogonalização de Gram-Schmidt no software Mathematica	p. 140
	Índice Remissivo	p. 142

Resumo

As aplicações da Magnetohidrodinâmica vão desde o controle de reações termonucleares ao desenvolvimento de ligas em reatores a plasma. Dentre as aplicações podemos destacar também o uso de modelos teóricos que possibilitam a simulação em computador da evolução do arco-elétrico em dispositivos de comando e proteção, como disjuntores e contadores. A previsão dos campos eletromagnéticos e hidrodinâmicos nos dispositivos citados é de fundamental importância para o entendimento da influência da geometria interna no decaimento da corrente com o tempo e a conseqüente extinção do arco-elétrico, colaborando com o desenvolvimento de dispositivos mais seguros e otimizados.

A proposta deste trabalho é a simulação de modelos em Magnetohidrodinâmica utilizando modelos cinéticos discretos capazes de recuperar o acoplamento entre as equações eletromagnéticas e hidrodinâmicas no contínuo. Baseado no trabalho de Paul Dellar [1], Philippi [2] e Shan [3] foi proposto uma equação de relaxação [1] capaz de recuperar a equação resistiva para o eletromagnetismo acoplada, via força de Lorentz, à equação discreta de Boltzmann. Construímos aqui dois modelos que diferem entre si pelo tipo e pela forma de introdução da força de Lorentz na equação discreta de Boltzmann capazes de recuperar sem termos espúrios a equação de Navier Stokes e a equação de balanço da energia interna para fluidos. A validação dos modelos foi feita através da comparação entre soluções simuladas e analíticas do escoamento de um fluido magnético em um canal, *Hartmann Flow*. Também foi estudada, utilizando os modelos propostos, a influência do campo magnético sobre os coeficientes de transporte.

Abstract

Magnetohydrodynamics is applicable from thermonuclear reactions to alloys development in plasma reactors. Among the applications we can also detach the use of theoretical models in order to have a computer simulation of the electrical-arch evolution in controlling and protection devices such as circuit breakers and electric meters. The prediction of the mentioned electromagnetic and hydrodynamic fields is of major importance to understanding the influence of internal geometry in current lapse with time and the consequent extinction of the electric arch, contributing to the development of safer and better optimized devices.

The plan of this work is to simulate models in Magnetohydrodynamics by using discrete kinetic models in order to recuperate the connection between the electromagnetic and hydrodynamic equations in the continuum. Based on the work of Paul Dellar [1], Phillip [2] and Shan [3] was proposed a relaxation equation [1] that could retrieve the resistive equation to the connected electromagnetism, via Lorentz force, the Boltzmann equation. Two different models in relation to the kind and form of introduction of the Lorentz force in the Boltzmann equation were built. The validation of the models was obtained by the comparison between both analytic and simulated solutions of the flowing of magnetic fluid in a channel, Hartmann Flow. It was also studied, using the proposed models, the influence of the magnetic field over the coefficient of transport.

1 *Motivação*

Neste capítulo iremos introduzir de forma fenomenológica os principais conceitos referente à física do plasma acarretando no entendimento qualitativo da criação e interrupção de descargas elétricas. Nosso objeto de estudo, as descargas elétricas, são produzidas pela interrupção de uma corrente estabelecida entre contatos elétricos. Estas descargas definem regiões com temperaturas entre 300K a 30.000K e ocorrem em ambiente atmosférico. Nas regiões de altas temperaturas o meio se ioniza tornando-se sensível à ação de campos elétricos e magnéticos. A evolução dos campos nestas regiões podem ser descritos através do acoplamento entre as equações da hidrodinâmica e do eletromagnetismo.

Levantaremos de forma simplificada os principais conceitos que caracterizam o gás em estudo.

1.1 Fenomenologia e Aplicação

O plasma propriamente dito é um gás ionizado constituído de partículas positivas, negativas e neutras em constante atividade de ionização e recombinação. Sem perda de generalidade, podemos apenas considerá-lo como um gás constituído de partículas positivas e negativas. Por ser um gás ionizado, o plasma é capaz de conduzir correntes elétricas e interagir com elas respeitando os vínculos impostos pelas equações eletromagnéticas e hidrodinâmicas. Podemos usar alguns parâmetros e conceitos para definir um pouco melhor a natureza física do plasma [4] [5]. São eles:

Neutralidade: Qualquer volume macroscópico no interior de um plasma apresenta carga elétrica efetiva nula. Isto se deve ao fato das cargas elétricas positivas e negativas estarem em contínuo equilíbrio, ou seja, uniformemente distribuídas no espaço.

Comprimento de Debye (λ_D): Uma característica importante do plasma é a sua capacidade de blindar qualquer potencial estático. Se algum potencial elétrico for introduzido em seu interior, por algum eletrodo positivamente carregado por exemplo, as

cargas negativas que se encontram livres tenderão a aproximar-se, blindando o potencial. A distância entre a origem do potencial e a região em que a neutralidade do plasma é recuperada é denominada de comprimento de Debye. Um dos requisitos para podermos chamar um fluido ionizado de plasma é ser o comprimento de Debye muito pequeno quando comparado a outras dimensões físicas de interesse como por exemplo, no nosso caso, a distância entre os contatos elétricos.

Parâmetro de Plasma (g): Define-se parâmetro de plasma g como sendo o inverso do número de partículas dentro de uma esfera de Debye¹. A descrição de um plasma tem significado estatístico apenas quando o número de partículas dentro da esfera de Debye for grande $g \ll 1$

Freqüência de Plasma (w_p): Seja um plasma em equilíbrio. Se colocarmos um eletrodo carregado em seu interior, isto induzirá, nas proximidades do mesmo, uma separação de cargas e um potencial entre elas. Se tirarmos esse eletrodo, as cargas tenderão a voltar às posições de equilíbrio pela ação do potencial criado entre elas. Assim quando retornarem às posições de equilíbrio, terão adquirido velocidade, o que induzirá uma nova separação entre as mesmas e assim por diante. Isto induzirá uma oscilação com uma freqüência bem definida que dependerá, entre outras coisas, da densidade de carga do plasma. Usualmente este tipo de fenômeno é utilizado para inferir indiretamente a densidade do plasma.

Esta oscilação pode deixar de ocorrer se a densidade de partículas neutras for aumentada gradativamente de forma que o número de colisões entre as partículas carregadas e neutras for maior que o número de colisões entre as partículas carregadas. Desta forma é natural exigir que a freqüência de oscilação do plasma seja maior que a freqüência de colisão do fluido $w_p > \nu$, ou $w_p \tau > 1$, onde $\tau = \frac{1}{\nu}$ é o tempo de relaxação² do fluido.

Os três parâmetros mencionados caracterizam bem o plasma, e de maneira geral podemos dizer que para um fluido ser considerado plasma deve satisfazer os seguintes requisitos:

1ª Quasi-Neutralidade³: $\lambda_D \ll l$

2ª Comportamento Coletivo: $g \ll 1$.

¹Esfera de Debye [6] caracteriza-se pela esfera definida pelo raio vetor com módulo igual ao comprimento de Debye

²O tempo de relaxação é dado pelo inverso da freqüência de colisão, ou seja, é o tempo médio entre duas colisões.

³Onde l é o comprimento característico.

3ª Colisões Infrequentes: $w_p \tau > 1$.

Todos esses conceitos são para delinear brevemente a natureza do plasma. Veremos nas seções e nos capítulos posteriores que o plasma é um fluido muito semelhante aos fluidos convencionais como o ar, por exemplo. A diferença básica está na sensibilidade que o fluido apresenta à aplicação de campos elétricos e magnéticos. Trabalharemos aqui com uma abordagem cinética da mecânica dos fluidos e do eletromagnetismo.

1.2 Conceitos básicos em interrupção de correntes

Vamos iniciar enunciando a lei de Lenz [5],

”No caso de uma variação em um sistema magnético, sucede algo que tende a se opor à variação”

A lei de Lenz nada mais é do que a lei de indução magnética e pode ser matematicamente descrita pela relação,

$$\varepsilon = -\frac{d\phi}{dt} \quad (1.1)$$

onde ε é a diferença de potencial induzida pela variação de um fluxo magnético $\phi = \int_A \vec{B} \cdot \hat{n} ds$ em um circuito de área A qualquer. De maneira geral podemos supor que $\phi = \phi(i)$ onde i é a corrente estabelecida sobre o circuito de área A , de forma que,

$$\varepsilon = -\frac{d\phi}{dt} = -\frac{d\phi}{di} \frac{di}{dt} = -L \frac{di}{dt} \quad L \equiv \frac{d\phi}{di} \quad (1.2)$$

onde L é definido como sendo a indutância do sistema e depende apenas das características geométricas de um circuito qualquer c .

É comum encontrarmos a analogia entre indutância e inércia em um sistema mecânico. Assim associa-se ”resistência” à interrupção de uma corrente, com a ”inércia” que a mesma estabelece sobre o sistema. Deve-se tomar cuidado com essa analogia para não associar esta aparente inércia ao fluxo de massa dos elétrons estabelecido pela corrente i . Deve-se entender a indutância como um efeito intrínseco do sistema magnético com origem na lei de Lenz. É importante entender que a lei de Lenz é um primeiro princípio, assim como a conservação da energia por exemplo, e portanto é uma lei empiricamente estabelecida não

podendo ser deduzida de nenhum outro primeiro princípio. Quando houver dúvidas, deve-se usar sempre a lei de Lenz em sua forma original para concluir sobre efeitos magnéticos induzidos.

Agora estamos de posse das principais idéias requeridas para o entendimento da criação e interrupção de descargas elétricas sobre contatos elétricos. Vamos imaginar uma corrente elétrica i estabelecida entre contatos elétricos fechados em um certo circuito qualquer c . Qualquer tentativa de interrupção da corrente pela abertura dos contatos elétricos⁴, segundo a lei de Lenz, sucederá algo que tenderá a se opor a esta variação⁵. Este "algo" é a tensão de arco, que é a diferença de potencial que se estabelece sobre os contatos elétricos a fim de reestabelecer a corrente de origem, mantendo deste modo o fluxo magnético do sistema constante. Neste caso, a abertura dos contatos é feita sob ambiente atmosférico, portanto o ar entre os contatos exercerá o papel de dielétrico. Quanto maior a rigidez dielétrica do ar maior será a resistência oferecida pelo mesmo ao reestabelecimento da corrente e portanto maior será o potencial elétrico induzido na tentativa de reestabelecer a corrente.

Neste jogo entre a tentativa do potencial de arco reestabelecer a corrente, e a rigidez dielétrica oferecida pelo ar, serão induzidas sobre as vizinhanças dos contatos elétricos pequenas correntes devido ao alto potencial que estarão submetidos os elétrons superficiais aos contatos elétricos, o que acabará por arrancá-los, gerando pequenas correntes que por efeito Joule ionizarão as regiões superficiais dos contatos. Deste modo serão libertados elétrons colaborando com uma reação em cascata que contribuirá com o restabelecimento gradativo da corrente original. Portanto o potencial de arco será tão mais intenso quanto mais abrupta⁶ for a interrupção da corrente.

A energia armazenada sob forma de potencial de arco pode ser associada ao conjunto do trabalho das forças externas sobre os contatos elétricos a fim de interromper a corrente estabelecida i pela abertura dos mesmos. Portanto quanto maior for o trabalho das forças externas sobre os contatos elétricos a fim de abri-los, maior será o potencial de arco estabelecido sobre os contatos elétricos.

Uma outra forma de visualizar o que acabamos de descrever é usar a analogia da

⁴A abertura pode ser forçada por sistemas mecânicos, como molas ou sistemas hidráulicos por exemplo, ou pela atuação de forças de natureza qualquer.

⁵A variação aqui diz respeito à variação da corrente com o tempo como exposto pela Equação (1.2), ou de maneira mais fundamental à variação do fluxo magnético ϕ em uma área ds qualquer definida sobre um circuito genérico c como mostra a Equação (1.1).

⁶Neste caso mais abrupta significa $\frac{di}{dt}$ cada vez mais elevado. Uma interrupção instantânea, segundo a Equação (1.2), induziria $\frac{di}{dt} \rightarrow \infty$ que induziria um potencial de arco $\varepsilon \rightarrow \infty$.

inércia devido à corrente estabelecida i . A partir do mesmo sistema descrito acima, ou seja, contatos fechados e corrente i estabelecida. Quando forçamos a abertura destes contatos, os elétrons que "escoam" de um lado ao outro encontrarão uma barreira, devido ao estabelecimento do ar dielétrico entre os contatos, e tenderão a se acumular em uma das extremidades do contato, e conseqüentemente do outro lado a densidade de cargas experimentará um declínio. Esta variação na densidade de cargas nas extremidades dos contatos elétricos é a origem do potencial de arco. Ela será tão intensa quanto mais abrupta for a variação da corrente durante a interrupção.

Em uma situação onde a interrupção da corrente é feita em ambiente de baixa pressão, é esperado um potencial de arco extremamente expressivo devido a maior capacidade dielétrica e portanto maior capacidade de interrupção em um tempo significativamente menor, ou seja, uma interrupção extremamente abrupta.

Nas regiões entre os contatos elétricos será criado um fluido com temperaturas de até $30.000K$ que goza das propriedades 1^a , 2^a e 3^a citadas na seção anterior. Este fluido, como discutimos, terá a capacidade de blindar potenciais externos. Portanto, nas regiões próximas aos contatos elétricos, o arco-elétrico⁷ experimentará uma região de não neutralidade, e de variação de potencial, devido ao acúmulo de cargas nas regiões próximas aos contatos, tentando blindar o potencial de arco que se estabelece sobre os contatos. Na literatura [7], estas regiões são denominadas de queda de potencial de ânodo e queda de potencial de cátodo respectivamente.

Uma vez estabelecido o arco-elétrico a corrente fluirá dos contatos elétricos pela coluna de arco até que, por algum motivo, sua temperatura caia a um valor tal que não teremos elétrons livres suficientes para manter a corrente. Portanto o mecanismo básico na interrupção do arco elétrico é aumentar ou restabelecer a rigidez dielétrica entre os contatos, aumentando a distância⁸ entre eles mais rapidamente do que o estabelecimento das regiões ionizadas e ou baixando a energia interna do arco.

O mecanismo base pelo qual o plasma perde energia⁹ interna é pela evaporação dos contatos elétricos e dos materiais metálicos introduzidos em seu interior. O conjunto desses materiais metálicos é denominado de câmara de extinção. A câmara de extinção é

⁷Estaremos usando as palavras "arco-elétrico", "arco" e "plasma" como sinônimos.

⁸A abertura de contato que experimentasse uma velocidade incrivelmente superior ao que os mecanismos atuais proporcionam seria suficiente para que a distância entre os contatos aumentasse mais rapidamente do que a capacidade que o sistema teria de favorecer o aparecimento de correntes superficiais induzidas aos contatos. O preço que se pagaria por isso seria a de um potencial de arco extremamente elevado em contrapartida a uma interrupção extremamente abrupta da corrente estabelecida i .

⁹Estamos desconsiderando perdas por radiação.

um conjunto de placas dispostas em torno da região em que o arco-elétrico é estabelecido. Devido aos efeitos magnéticos induzidos pela corrente que passa entre os contatos, e pela magnetização das placas da câmara, o arco é aprisionado e evapora o material que constitui a câmara até que sua energia interna não seja mais capaz de ionizar o meio, estabelecendo rigidez dielétrica e interrompendo a corrente.

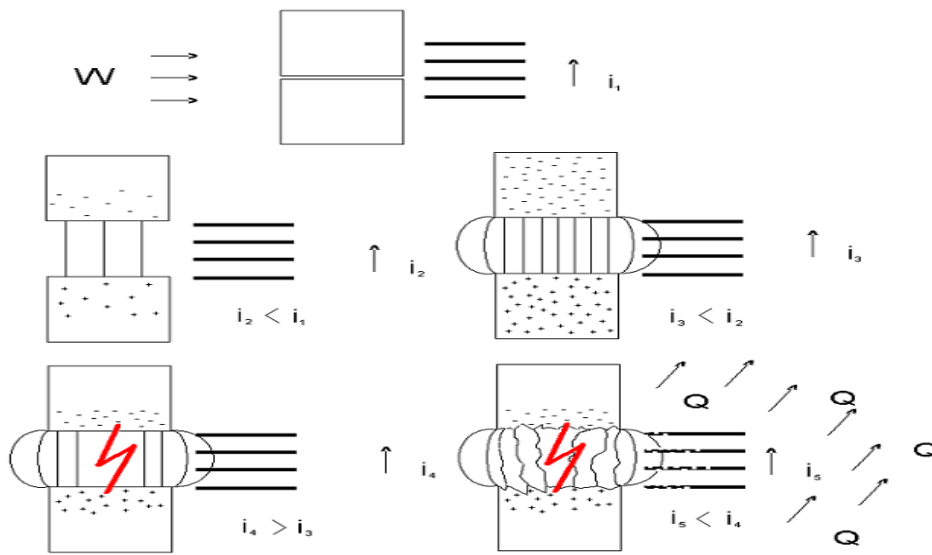


Figura 1: *Estágios envolvidos na criação e extinção do arco-elétrico.*

Para que o balanço de energia no processo de criação e extinção do arco-elétrico fique claro, observemos a Figura (1). Na figura os retângulos são representações dos contatos elétricos, as linhas estabelecidas entre eles representam o campo estabelecido devido ao potencial de arco, os símbolos + e - representam o acúmulo de cargas devido a separação dos contatos e as linhas horizontalmente dispostas representam a câmara de extinção, sendo W todo o trabalho exercido sobre os contatos forçando sua abertura e Q a dissipação de energia final provocando erosão sobre os contatos, placas de extinção e perdas de calor para o ambiente.

No passo zero, no topo da figura, os contatos encontram-se fechados e uma corrente

i_1 está estabelecida. Em seguida, da esquerda para a direita de cima para baixo, os contatos se abrem devido a aplicação de trabalho W sobre os mesmos, e neste instante, imediatamente após a aplicação de W , inicia-se o acúmulo de cargas na extremidade dos contatos devido a variação da corrente de um valor i_1 para um valor imediatamente inferior i_2 , e um leve potencial elétrico¹⁰ se estabelece entre os contatos. No passo seguinte a corrente continua com sua tendência de queda, devido aos valores crescentes de resistência que os elétrons experimentam em função da separação dos contatos, e mais cargas se acumulam, estabelecendo um alto potencial elétrico $\epsilon \sim \frac{di}{dt}$. No terceiro passo, penúltima figura da esquerda para a direita, o potencial elétrico experimenta valores suficientes para romper a rigidez dielétrica, e neste instante se estabelece uma descarga elétrica gerando energia suficiente para ionizar o meio diminuindo ainda mais a resistência à passagem da corrente. No último passo, toda a energia liberada pela descarga evapora parte dos contatos elétricos e sistema de câmara de extinção, fazendo com que o arco perca energia interna diminuindo a densidade de elétrons livres estabelecendo altos valores para a rigidez dielétrica e terminando por interromper a corrente.

O balanço de energia envolvido no processo pode ser descrito esquematicamente pela relação,

$$\underbrace{\delta W}_0 \rightarrow \underbrace{F\delta x}_1 \rightarrow \underbrace{\delta\epsilon \sim \frac{di}{dt}\delta t}_2 \rightarrow \underbrace{Ri^2\delta t}_3 \rightarrow \underbrace{\delta Q}_4 \quad (1.3)$$

0 *passo*: Contatos fechados e aplicação de trabalho W sobre os mesmos.

1^a *passo*: Contatos abrindo devido a aplicação de $w = F\delta x$ e estabelecimento de um tênue potencial de arco.

2^a *passo*: Contatos abertos e estabelecimento de forte potencial de arco.

3^a *passo*: Descarga elétrica e produção de efeito Joule.

4^a *passo*: Energia dissipada sob forma de calor, erodindo contatos e câmara de extinção.

Esta é a descrição básica dos mecanismos de criação e extinção do arco-elétrico. Entender a dinâmica do plasma na geometria interna aos mecanismos de proteção, como

¹⁰Potencial elétrico é equivalente a potencial de arco.

disjuntores, é fundamental para entender a relação entre o decaimento da corrente com o tempo, o potencial de arco e o desgaste experimentado por mecanismos, permitindo assim otimizar e desenvolver produtos menores e mais confiáveis.

1.3 Modelos teóricos, experimentação e softwares comerciais

É fundamental que a experimentação ande lado a lado com os modelos teóricos. A experimentação é usada na validação e na extração de parâmetros de ajuste para os modelos teóricos. Um exemplo é a queda de potencial experimentada pelo plasma, nas regiões próximas aos contatos elétricos, em função de um determinado potencial de arco. A queda de potencial experimentada pelo plasma nas regiões próximas aos contatos elétricos depende da capacidade de blindagem¹¹ do plasma, portanto dependerá basicamente da sua constituição como fluido e da sua capacidade de ionização e recombinação em função da temperatura. A capacidade de blindagem ou o conhecimento da queda de potencial é importante para podermos saber qual potencial o plasma estará submetido e assim, podermos inferir a corrente na coluna de plasma. O conhecimento deste fator é um exercício experimental e fornece os parâmetros de ajuste para a simulação.

A experimentação, de forma geral, contribui para a melhoria do entendimento da fenomenologia da interrupção, auxiliando o engenheiro na escolha dos parâmetros relevantes na execução da simulação.

O assunto plasma é extenso e abrange desde modelos quânticos usados para o entendimento da estabilidade em núcleos de estrelas, fusão nuclear controlada a aplicações como soldas ou no nosso caso, disjuntores. O mais importante a salientar é que, apesar de estarmos tratando com um gás extremamente quente, com temperaturas da ordem de $30.000K$, o foco de nossa fenomenologia está na evolução do plasma desde sua criação até sua extinção. A descrição dessa dinâmica passa por modelos que devem levar em conta variações de temperatura desde a temperatura ambiente $300K$ à temperatura de $30.000K$. Portanto as equações relevantes para a descrição em questão passam pelo acoplamento das equações da hidrodinâmica com às equações do eletromagnetismo. Neste caso a viscosidade desempenha um papel importante pois ao passarmos pelos valores de temperatura de $300K$ a $30.000K$ os efeitos viscosos não poderão ser desprezados. Caso diferente seria tratarmos sobre a estabilidade do plasma em um regime em que sua temperatura variasse

¹¹Depende do comprimento de Debye λ_D .

na região dos $30.000K$. Neste caso uma boa aproximação seria tratar o plasma como um fluido não viscoso como em modelos para núcleo de estrelas e em reações de fusão nuclear. Portanto nosso objetivo aqui é resolver o acoplamento entre as equações hidrodinâmicas e eletromagnéticas.

A abordagem convencional, na área de contatos elétricos, é tratar a magnetohidrodinâmica a partir das equações macroscópicas. Existe uma extensa literatura a respeito. Métodos bem estabelecidos para a solução destas equações são os métodos de volumes finitos, usados comumente para tratar as equações hidrodinâmicas e de elementos finitos, usados¹² comumente para as equações eletromagnéticas. A grande maioria dos modelos em magnetohidrodinâmica são modelos "engenheirados" por não tratar a solução das equações macroscópicas pela aplicação direta de algum método matemático, mas sim a partir de softwares comerciais. Esses modelos são baseados no acoplamento entre um primeiro software que resolve as equações da hidrodinâmica, e um segundo software que resolve as equações eletromagnéticas. As soluções de um conjunto de equações são as condições iniciais do outro conjunto de equações e vice-versa. Esse acoplamento é feito via construção de um terceiro software que gerencia a transmissão e recepção dessas soluções.

Nossa abordagem será a da teoria cinética dos gases a partir da discretização da equação de transporte de Boltzmann. Esses modelos são conhecidos como modelos de Lattice Boltzmann - LBM.¹³ É possível, como veremos ao longo desta tese, tratar as equações eletromagnéticas a partir da equação de Boltzmann. Modelos em teoria cinética objetivam a solução das equações macroscópicas da hidrodinâmica via solução da equação de Boltzmann. Isto significa que existe um procedimento bem definido que possibilita associar a solução dos campos da equação de Boltzmann aos campos vetoriais e escalares da hidrodinâmica. Este procedimento é conhecido como procedimento de Chapman-Enskog. Portanto quando falamos em solução das equações eletromagnéticas via teoria cinética, queremos dizer que é possível a partir da equação de Boltzmann, via procedimento de Chapman-Enskog, chegar as equações eletromagnéticas.

A vantagem de tratar a magnetohidrodinâmica, via volumes e elementos finitos, é a segurança de estar usando um método muito bem fundamentado e testado com uma imensa literatura a respeito. A desvantagem é de estar tratando o problema explicitamente do ponto de vista macroscópico. Tratar o problema do ponto de vista mesoscópico¹⁴, via equação de Boltzmann, possibilita uma visão mais fundamental da física que

¹²Não que os métodos não possam ser usados de forma inversa.

¹³Lattice, em inglês, se refere a grade, ou seja, são modelos cinéticos baseados na equação de Boltzmann feitos em um espaço discreto em forma de grade. LBM são as iniciais para Lattice Boltzmann Method.

¹⁴Mesoscópica se refere a escala que fica entre a escala atômica e a escala macroscópica.

rege a magnetohidrodinâmica. Este ponto de vista favorece por exemplo a imposição de condições de contorno genéricas, o que não é possível em modelos estritamente macroscópicos. Modelos mesoscópicos possibilitam tratar o plasma de maneira mais realista. Plasma essencialmente é um fluido miscível¹⁵ de um fluido neutro, um fluido eletrônico e um fluido iônico. O tratamento de fluidos miscíveis de duas fases ou mais é extremamente complicado via métodos de volumes e elementos finitos aplicados às equações macroscópicas. Tratar o plasma a partir de modelos baseados em três fluidos com condições de contorno genéricas é se aproximar de uma descrição mais rica do ponto de vista físico, o que acreditamos, possibilitará extrair mais informação e com melhor qualidade.

Uma outra vantagem do LBM é o tempo computacional e a paralelização direta do código. Em geral LBM possui um tempo computacional significativamente menor que modelos baseados na solução das equações macroscópicas via volumes e elementos finitos. Um exemplo bem sucedido da aplicação de LBM com fins comerciais é o da empresa EXA¹⁶ através do software Powerflow para a simulação da aerodinâmica. De maneira geral a indústria automobilística tem migrado¹⁷ dos softwares convencionais para o uso do Powerflow, em parte pelo ganho em tempo computacional e em riqueza de detalhes na solução dos campos hidrodinâmicos.

Modelos em LBM são relativamente recentes se comparados aos bem estabelecidos volumes e elementos finitos. Tratar o problema do arco via modelos LBM trará no mínimo uma visão diferente e, acreditamos, abrirá perspectiva para a construção de um modelo mais eficiente tanto do ponto de vista de tempo computacional como na qualidade e na abrangência das informações que são passíveis de serem extraídas.

O objetivo deste trabalho é mostrar a solidez do método para aplicações de interesse na área de contatos elétricos, apontando um caminho para a construção de modelos que de fato superem os resultados dos modelos convencionais.

¹⁵Fluidos miscíveis são aqueles que quando misturados formam uma fase homogênea.

¹⁶<http://www.exa.com>

¹⁷Ver portfólio de clientes em: <http://www.exa.com>

2 *Eletromagnetismo*

Neste capítulo [5] introduziremos os conceitos mais importantes para o entendimento das equações do eletromagnetismo.

2.1 Lei de Gauss

Consideremos o campo elétrico \vec{E} em um ponto \vec{r} de uma carga puntual q localizada na origem do sistema de coordenadas,

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{r^3}. \quad (2.1)$$

onde ϵ_0 é a permissividade do espaço livre e $r = |\vec{r}|$.

Seja uma superfície fechada qualquer s em torno da carga. A componente normal \hat{n} da integral de superfície sobre o campo \vec{E} é dada por,

$$\oint_s \vec{E} \cdot \hat{n} \, ds = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \oint_s \frac{\vec{r} \cdot \hat{n}}{r^3} \, ds = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \oint_s \frac{\hat{r} \cdot \hat{n}}{r^2} \, ds \quad (2.2)$$

Lembrando que o ângulo sólido Ω é definido pela fração da área perpendicular ao raio vetor com origem no centro de coordenadas dividido pelo raio ao quadrado ou seja,

$$d\Omega = \frac{d\vec{s} \cdot \hat{r}}{r^2} = \frac{\hat{n} \cdot \hat{r}}{r^2} \, ds \quad (2.3)$$

e para uma superfície fechada esfericamente simétrica, sem perda de generalidade,

$$\Omega = \int_s d\Omega = \int \frac{\hat{n} \cdot \hat{r}}{r^2} \, ds = \int_s \frac{r^2 \sin(\theta) \, d\theta \, d\phi}{r^2} = 4\pi \quad (2.4)$$

Voltando para a integral de superfície do campo elétrico,

$$\oint_s \vec{E} \cdot \hat{n} \, ds = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \oint_s \frac{\hat{n} \cdot \hat{r}}{r^2} \, ds = \frac{q}{\epsilon_0} \quad (2.5)$$

Levando em conta o princípio de superposição do campo elétrico, de que o campo elétrico total gerado por uma distribuição de cargas é igual à soma vetorial dos campos de cada carga sobre o ponto,

$$\vec{E}_{tot} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \cdots + \vec{E}_n \quad (2.6)$$

Neste sentido consideremos uma distribuição de N cargas encerradas em uma superfície s e o campo gerado por elas sobre esta superfície,

$$\oint_s (\vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \cdots + \vec{E}_n) \cdot \hat{n} \, ds = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \oint_s \left(\frac{\hat{r}_1}{r_1^2} + \frac{\hat{r}_2}{r_2^2} + \cdots + \frac{\hat{r}_n}{r_n^2} \right) \cdot \hat{n} \, ds \quad (2.7)$$

Para as cargas que estiverem internas à superfície S , o produto interno $\hat{r}_i \cdot \hat{n} > 0$ é maior que zero. Como o ângulo sólido é independente da superfície tomada,

$$\oint_s \frac{\hat{r}_i}{r_i^2} \cdot \hat{n} \, ds = 4\pi \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^N \oint_s \frac{\hat{r}_i}{r_i^2} \cdot \hat{n} = 4\pi N \quad (2.8)$$

ou seja,

$$\oint_S \vec{E}_{tot} \cdot \hat{n} \, ds = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} 4\pi N = N \frac{q}{\epsilon_0} \quad (2.9)$$

que é igual à carga líquida interna a superfície S . Ou seja,

$$\oint_s \vec{E} \cdot \hat{n} \, ds = \frac{q_{tot}}{\epsilon_0} \quad (2.10)$$

ou na forma diferencial,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.11)$$

onde ρ é a densidade de carga.

Portanto o fluxo total do campo elétrico sobre uma superfície fechada é igual a carga líquida dentro da mesma superfície. Esta é conhecida como lei de Gauss para o campo elétrico.

Considerando ainda o campo elétrico \vec{E} fixo para todo o instante de tempo t , per-

cebemos que este é um típico campo conservativo. Para visualizarmos isso consideremos um deslocamento qualquer $d\vec{l}$ no espaço em coordenadas esféricas, portanto $d\vec{l} = r d\theta \hat{\theta} + r \sin(\theta) d\phi \hat{\phi}$. Coloquemos a carga no centro dos eixos coordenados. Seja um circuito fechado c externo a carga q . A integral de linha sobre c ,

$$\oint_c \vec{E} \cdot d\vec{l} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \oint_c \frac{1}{r^2} \hat{r} \cdot (r d\theta \hat{\theta} + r \sin(\theta) d\phi \hat{\phi}) = 0 \quad (2.12)$$

Não precisamos considerar a componente radial do deslocamento pois, para voltar no mesmo ponto elas sempre se cancelarão. Usando a definição de rotacional [8],

$$\lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\oint_c \vec{E} \cdot d\vec{l}}{\Delta S} = (\vec{\nabla} \times \vec{E}) \cdot \hat{n} = 0 \quad (2.13)$$

onde ΔS é qualquer superfície definida pelo circuito c e \hat{n} o vetor unitário normal a área definida pelo circuito fechado c . E a Equação (2.12) também pode ser escrita como,

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = 0 \quad (2.14)$$

Lembramos que estas situações são para campos não dependentes do tempo.

2.2 Corrente Elétrica

Consideremos agora a natureza das cargas em movimento. A carga líquida transportada $Q(t)$ através da diferencial de área ds por unidade de tempo é definida como sendo a corrente elétrica,

$$I = \frac{dQ}{dt} \quad (2.15)$$

Seja um meio condutor com apenas um tipo de portador de carga ¹. O número desses portadores por unidade de volume será representado por N . Desconsiderando o efeito da temperatura sobre as velocidades, consideremos os portadores de cargas todos com a mesma velocidade $\vec{\xi}$. Durante um tempo δt cada portador percorrerá a distância $\delta x = \vec{\xi} \cdot \hat{n} \delta t$ na direção \hat{n} normal à diferencial de área ds . Uma diferencial de corrente portanto fica,

¹O portador de carga, neste caso, é o elétron. Em um meio ionizado estaremos considerando também os íons

$$dI = \frac{\delta Q}{\delta t} = \frac{q N \vec{\xi} \cdot \hat{n} \delta t ds}{\delta t} = Nq \vec{\xi} \cdot \hat{n} ds \quad (2.16)$$

e se mais de um tipo de portador de carga estiver presente,

$$dI = \left(\sum_i N_i q_i \vec{\xi}_i \right) \cdot \hat{n} ds \quad (2.17)$$

que é a corrente que flui através da diferencial de área ds . A quantidade vetorial entre parênteses tem dimensão de corrente por unidade de área e é definida como sendo a densidade de corrente \vec{J} ,

$$\vec{J} = \sum_i N_i q_i \vec{\xi}_i \quad (2.18)$$

e,

$$dI = \vec{J} \cdot \hat{n} ds \quad (2.19)$$

A densidade de corrente \vec{J} e a densidade de cargas ρ_c não são quantidades independentes e estão relacionadas pela equação da continuidade.

Considerando o princípio da conservação da carga, a variação total da distribuição de cargas $\rho_c dv$ no tempo sob um volume de controle V deverá ser nula,

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_c dv = 0 \quad (2.20)$$

Usando o teorema de transporte de Reynolds, apêndice C2 conseguimos [9],

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_c dv = \int_V \left(\frac{\partial \rho_c}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_c \vec{u}) \right) dv = 0 \quad (2.21)$$

onde \vec{u} é a velocidade dos portadores de carga ². Definindo $\vec{J} = \rho_c \vec{u}$ conseguimos,

$$\frac{\partial \rho_c}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (2.22)$$

que é a equação da continuidade para a corrente elétrica, onde ρ_c é a densidade de carga.

²No caso de estarmos trabalhando com a aproximação de um fluido para o plasma, a velocidade dos portadores de carga será a mesma do campo hidrodinâmico

2.3 Força magnética

A força de Coulomb sobre uma carga q localizada em \vec{r} devido à carga q_1 localizada na origem, é dada por,

$$\vec{F}_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qq_1\vec{r}}{r^3} \quad (2.23)$$

Isso se as cargas estiverem em repouso. Se as cargas estiverem em movimento, com velocidades $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$ haverá uma força magnética adicional exercida pela partícula com velocidade $\vec{\xi}$ sobre a partícula com velocidade $\vec{\xi}_1$ dada por,

$$\vec{F}_m = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{qq_1}{r^2} \vec{\xi} \times \left(\vec{\xi}_1 \times \frac{\vec{r}}{r} \right) \quad (2.24)$$

E o campo magnético \vec{B} pode ser definido como,

$$\vec{F}_m = q \left(\vec{\xi} \times \vec{B} \right) \quad (2.25)$$

O que nos permite definir o vetor indução magnética como sendo,

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q_1}{r^2} \vec{\xi}_1 \times \frac{\vec{r}}{r} \quad (2.26)$$

isso simplifica o entendimento de que toda carga elétrica em movimento gera um campo magnético que é proporcional ao produto vetorial da sua velocidade pelo raio do vetor no ponto de medida do campo \vec{B} . Se estiver presente um campo elétrico e magnético, a força total sobre a carga teste é dada por,

$$\vec{F} = q \left(\vec{E} + \vec{\xi} \times \vec{B} \right) \quad (2.27)$$

que é conhecida como força de Lorentz.

O campo magnético, Equação (2.26) e o campo elétrico, Equação (2.1), obedecem ambos ao mesmo princípio de superposição e seus módulos possuem o mesmo tipo de decaimento r^2 com a distância. Porém suas magnitudes são bem discrepantes,

$$\frac{F_m}{F_e} \leq \frac{\xi}{c} \frac{\xi_1}{c} \quad (2.28)$$

onde c , ξ , ξ_1 são respectivamente os módulos ³ da velocidade da luz, da velocidade da carga q e da velocidade da carga q_1 .

De posse da definição de indução magnética definiremos agora a lei de Ohm e a lei de Ohm generalizada.

Em alguns tipos de metais a temperatura constante, observa-se que a densidade de corrente é linearmente proporcional ao campo elétrico,

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (2.29)$$

onde σ é a condutividade elétrica e $\eta = \frac{1}{\sigma}$ é a resistividade elétrica. No caso geral $\sigma = \sigma(\vec{E})$. A relação Equação (2.29) é conhecida como Lei de Ohm .

No caso de um fluido condutor, como o plasma por exemplo, a densidade de corrente será proporcional ao produto $\vec{u} \times \vec{B}$, onde \vec{u} é a velocidade hidrodinâmica. Podemos assim sugerir a Lei de Ohm Generalizada ,

$$\vec{J} = \sigma (\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}) \quad (2.30)$$

onde \vec{E} é o campo elétrico externo sobre o plasma, e \vec{u} o campo de velocidades do fluido que é obtido através de um processo de média sobre as velocidades microscópicas $\vec{\xi}$.

2.4 Não observância de monopolos magnéticos

As inúmeras experimentações feitas por Oersted e Ampère podem ser generalizadas e entendidas através da lei de Biot e Savart . Seja $\vec{J}(\vec{r}_1)$ a densidade de corrente sobre um circuito c_1 localizado a partir de uma origem O sobre um ponto \vec{r}_1 , e seja $\vec{B}(\vec{r}_2)$ o campo magnético induzido pela densidade de corrente $\vec{J}(\vec{r}_1)$ no ponto \vec{r}_2 sobre um circuito c_2

$$\vec{B}(\vec{r}_2) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_v \frac{\vec{J}(\vec{r}_1) \times (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|^3} dv_1 \quad (2.31)$$

onde v_1 é um volume definido sobre o circuito c_1 , lembrando que,

$$-\vec{\nabla} \left(\frac{1}{r} \right) = -\hat{e}_r \partial_r \left(\frac{1}{r} \right) = \frac{1}{r^2} \hat{e}_r = \frac{\vec{r}}{r^3} \quad (2.32)$$

³Sempre quando nos referirmos ao módulo de alguma quantidade vetorial $\vec{\xi}$ faremos isso simplesmente suprimindo a notação vetorial $|\vec{\xi}| = \xi$.

onde r é o módulo de \vec{r} .

Queremos saber qual é o divergente de $\vec{B}(\vec{r}_2)$ em um ponto \vec{r}_2 sobre o circuito c_2 devido ao campo magnético induzido $\vec{B}(\vec{r}_2)$ para uma dada distribuição de densidade de corrente $\vec{J}(\vec{r}_1)$ definida sobre todo o domínio \vec{r}_1 no circuito c_1 . O domínio \vec{r}_1 ou o circuito c_1 tem um sentido genérico e refere-se a todo o domínio, excluindo o ponto \vec{r}_2 , que contribui de alguma forma para o campo magnético resultante $\vec{B}(\vec{r}_2)$ medido sobre o ponto \vec{r}_2 . Para facilitar os cálculos vamos definir $\phi(r_2) \equiv \frac{r_2 - r_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|^3}$ ⁴. Finalmente atuando com o divergente sobre a equação (2.31)

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_{r_2} \cdot \vec{B}(r_2) \propto \vec{\nabla}_{r_2} \cdot \left(\int_{v_1} \vec{J}(\vec{r}_1) \times \vec{\nabla} \phi(r_2) dv_1 \right) &= \int_{v_1} \cancel{(\partial_m J_k) \partial_l \phi \varepsilon_{klm}} dv_1 + \\ &+ \int_{v_1} (J_k \partial_m \partial_l \phi \varepsilon_{klm}) dv_1 = 0 \end{aligned}$$

onde o primeiro membro depois da igualdade na equação acima se anula pois $\vec{J}(\vec{r}_1)$ não depende de \vec{r}_2 , ou seja o campo magnético em cada ponto é a soma das contribuições do campo magnético gerado por cada partícula em todo o domínio, menos no ponto \vec{r}_2 . O segundo membro se anula devido a antisimetria do tensor ε_{klm} contraído na quantidade simétrica $\partial_m \partial_l$ de forma que,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.33)$$

Que é a representação matemática da observação experimental da Equação (2.31) feitas por Biot e Savart e indica a não existência de monopolos magnéticos. Ou seja, toda linha de campo magnético \vec{B} que sai de uma superfície fechada retorna à mesma. Percebemos que esse não é o mesmo caso do campo elétrico, Equação (2.11), que tem origem na carga e vai para o infinito com fluxo não nulo para qualquer superfície fechada sobre qualquer distribuição líquida de cargas.

2.5 Lei de Ampère

Continuemos a considerar campos que não dependem do tempo. Para correntes estacionárias,

⁴Estamos considerando $\phi(r_2)$ dependente apenas de \vec{r}_2 pois para fins de cálculo \vec{r}_1 está fixo

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (2.34)$$

e podemos obter uma importante relação para o campo magnético. Tirando o rotacional da Equação de Biot e Savart (2.31),

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \times \vec{B}(\vec{r}_2) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_v \vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \times \left(\frac{\vec{J}(\vec{r}_1) \times (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|^3} \right) dv_1 \quad (2.35)$$

Observemos que $\vec{\nabla}_{\vec{r}_2}$ não opera sobre $\vec{J}(\vec{r}_1)$. E para facilitar os cálculos

$$\vec{w} \equiv \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|^3} \quad (2.36)$$

Retornando ao rotacional da Equação (2.35)

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \int_v \vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \times (\vec{J}(\vec{r}_1) \times \vec{w}(\vec{r}_2)) dv_1 = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_v (\vec{J}(\vec{r}_1) \vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \cdot \vec{w} - (\vec{J}(\vec{r}_1) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_2}) \vec{w}) dv_1 \quad (2.37)$$

E o primeiro membro depois da igualdade pode ser reescrito em termos da função delta de Dirac, Equação B.5,

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \times \vec{B}(\vec{r}_2) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_v \vec{J}(\vec{r}_1) 4\pi \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) dv_1 - \frac{\mu_0}{4\pi} \int_v (\vec{J}(\vec{r}_1) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_2}) \vec{w} dv_1 \quad (2.38)$$

O último termo da Equação (2.37) pode ser integrado por partes. Simultaneamente faremos a mudança de variável $\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|^3} = \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|^3}$

Integrando o último termo da Equação (2.37) por partes,

$$\int_v \vec{J}(\vec{r}_1) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \vec{w} dv_1 = \int_v \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \cdot (\vec{J}(\vec{r}_1) \vec{w}) dv_1 - \int_v \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \cdot \vec{J}(\vec{r}_1) \vec{w} dv_1 \quad (2.39)$$

Integrando o divergente que vem logo em seguida da igualdade na equação acima para uma região onde $\vec{J} = 0$,

$$\int_v \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \cdot (\vec{J}(\vec{r}_1) \vec{w}) dv_1 = 0 \quad (2.40)$$

e podemos concluir que,

$$\int_v \vec{J}(\vec{r}_1) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \vec{w} dv_1 = 0 \quad (2.41)$$

Substituindo os últimos resultados na Equação (2.38) podemos reescrever a Equação (2.35),

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \times \vec{B}(\vec{r}_2) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_v \vec{J}(\vec{r}_1) 4\pi \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) dv_1 = \mu_0 \vec{J}(\vec{r}_2) \quad (2.42)$$

ou seja,

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \times \vec{B}(\vec{r}_2) = \mu_0 \vec{J}(\vec{r}_2) \quad (2.43)$$

que é conhecida como a forma diferencial da Lei de Ampère

2.6 Indução Eletromagnética

Até agora estivemos considerando campos que não mudam com o tempo. A equação que caracteriza a eletrostática é,

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = 0 \quad (2.44)$$

que é uma consequência direta da lei de Coulomb. Ou seja, o campo elétrico estático é irrotacional.

Para o caso de campos não conservativos, podemos definir a força eletromotriz sobre um circuito c fechado,

$$\oint_c \vec{E} \cdot d\vec{l} = \varepsilon \quad (2.45)$$

A origem da força eletromotriz pode ser de natureza diversa. Em especial, sabemos pela experiência que a variação de fluxo magnético sobre um caminho fechado c gera uma força eletromotriz induzida, que pode ser escrita como,

$$\varepsilon = -\frac{d\varphi}{dt} \quad (2.46)$$

onde φ

$$\varphi = \int_S \vec{B} \cdot \hat{n} \, ds \quad (2.47)$$

é o fluxo do campo magnético sobre a área S definida pelo caminho fechado c .

Este resultado é conhecido como a lei de indução eletromagnética de Faraday. A lei, Equação (2.46) é independente da maneira com que o fluxo magnético varia e é um princípio fundamental independente, não podendo ser obtido de outros princípios fundamentais como o princípio da conservação da energia por exemplo.

Unindo os resultados da Equação (2.46) e Equação (2.45) podemos escrever

$$\oint_c \vec{E} \cdot d\vec{l} = -\frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot \hat{n} \, ds \quad (2.48)$$

Se a área S do circuito c for fixa e não variar com o tempo, podemos passar a derivada temporal para dentro da integral, e usando o teorema de Stokes reescrevemos a Equação (2.48) como,

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.49)$$

que é a forma diferencial da lei de Faraday.

Com base no resultado da Equação (2.49) podemos enunciar a Lei de Lenz :

Lei de Lenz 2.6.1 *No caso de uma variação em um sistema magnético, sucede algo que tende a se opor à variação.*

2.7 Equações de Maxwell

Para encontrarmos o conjunto de equações conhecidas como equações de Maxwell precisaremos analisar um pouco mais a Equação de Ampère (2.43). Perceberemos que em algumas situações ela falha, e assim Maxwell propôs sua generalização.

Imaginemos um capacitor de placas paralelas sendo carregado por uma corrente I . Segundo a equação de Ampère, para uma distribuição de densidade de corrente \vec{J} a integral de linha do campo magnético sobre um circuito fechado c é dada por,

$$\oint_c \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 \int_S \vec{J} \cdot \hat{n} \, ds = \mu_0 I \quad (2.50)$$

onde S é a superfície definida pelo circuito fechado c que corta a seção reta do fio que carrega o capacitor. E a integral de linha do campo magnético \vec{B} sob um circuito fechado c é igual a toda a corrente que passa pela superfície S . Calculando a mesma integral de linha, Equação (2.50) sobre o mesmo circuito c porém considerando uma superfície s_1 que passa entre os capacitores, teremos que,

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 \int_{s_1} \vec{J} \cdot \hat{n} ds_1 = 0 \quad (2.51)$$

pois entre as placas do capacitor a densidade de corrente \vec{J} é nula. Esta é uma incoerência da lei de Ampère pois o resultado deve ser independente da superfície S tomada.

Se observarmos a equação de Amperè na sua forma diferencial,

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} \quad (2.52)$$

tirando o divergente da equação acima e lembrando que estamos carregando um capacitor de placas paralelas, portanto $\frac{\partial \rho}{\partial t} \neq 0$

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \mu_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (2.53)$$

que é inconsistente com a conservação da carga. Deste modo precisamos introduzir algum termo do lado direito da Equação (2.52) para que o divergente de \vec{J} não seja nulo.

Pela equação da conservação da carga,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho_c}{\partial t} = 0 \quad (2.54)$$

e então,

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \mu_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = -\frac{\partial \rho_c}{\partial t} \quad (2.55)$$

ou utilizando (2.11)

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \mu_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho_c}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \left(\mu_0 \vec{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) \quad (2.56)$$

E a lei de Ampère generalizada pode ser escrita como,

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.57)$$

O conjunto conhecido como equações de Maxwell pode ser escrito como,

Lei de Ampère generalizada,

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.58)$$

Lei de Faraday,

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.59)$$

Lei de Gauss,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (2.60)$$

E a não observância da existência de monopolos magnéticos ou lei de Biot e Savart,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.61)$$

Podemos observar a simetria das equações acima, onde a variação temporal de um campo é a variação espacial do outro campo e vice-versa. A simetria só não é perfeita pela não existência de monopolos magnéticos.

Para simplificar as contas, estaremos usando nos capítulos seguintes unidades em que as constantes μ_0 , ε_0 sejam iguais a 1.

3 *Magnetohidrodinâmica: acoplamento entre as equações eletromagnéticas e hidrodinâmicas*

Como discutimos no capítulo de introdução, plasma é um fluido constituído por elétrons, íons e partículas neutras. Os modelos aqui tratados serão simplificados e terão o objetivo de entender o escoamento de um fluido sob a ação de campos magnéticos e campos elétricos induzidos.

A equação consagrada da mecânica dos fluidos é conhecida como equação de Navier Stokes [9]

$$\partial_t(\rho u_\beta) + \partial_\alpha(\rho u_\alpha u_\beta + p\delta_{\alpha\beta}) - \mu\partial_\alpha \left[\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta}\vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] = 0 \quad (3.1)$$

A descrição da dinâmica de um fluido pela Equação de Navier Stokes 3.1 assume a hipótese de que o fluido pode ser descrito por campos vetoriais e escalares contínuos dependentes da posição \vec{x} e do tempo t , como a densidade $\rho(\vec{x}, t)$, a quantidade de movimento por unidade de volume $\rho\vec{u}$, onde $\vec{u} = \vec{u}(\vec{x}, t)$ e a pressão $p(\vec{x}, t)$, onde μ é a viscosidade.

Vamos denotar como fluido magnético qualquer fluido que por algum motivo seja capaz de responder a campos elétricos e magnéticos externos e induzir campos internos.

Para modelar tal fluido, vamos introduzir na equação de Navier Stokes um termo fonte $\vec{J} \times \vec{B}$ igual a força de Lorentz,

$$\partial_t(\rho u_\beta) + \partial_\alpha(\rho u_\alpha u_\beta + p\delta_{\alpha\beta}) - \mu\partial_\alpha \left[\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta}\vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] = \rho(\vec{E} + \vec{J} \times \vec{B})_\beta + \rho\vec{F}, \quad (3.2)$$

Neste caso, a hidrodinâmica, regida pela equação de Navier Stokes, fica sob a influência dos campos \vec{E} e \vec{B} e da densidade de corrente \vec{J} , onde \vec{F} é uma força de corpo. Estes

campos podem ser a soma dos campos externos mais campos induzidos. Para cada modelo iremos clarificar se os mesmos são induzidos ou externos.

Além da equação de Navier Stokes, precisamos de mais duas relações de campo, que são a equação da conservação da massa,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (3.3)$$

e de uma equação que relacione a densidade de corrente \vec{J} com os campos \vec{E} , \vec{B} e \vec{u} . Esta relação é a equação constitutiva conhecida como equação de Ohm generalizada,

$$\vec{J} = \sigma (\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}) \quad (3.4)$$

A evolução espaço-temporal dos campos \vec{E} e \vec{B} serão dadas pela solução das equações de Maxwell conjuntamente com a equação constitutiva para a densidade de corrente. Portanto os três grupos de equações, hidrodinâmica (3.2), (3.3), eletromagnéticas (2.58), (2.59), (2.60), (2.61) mais a relação constitutiva para a densidade de corrente (3.4) deverão ser resolvidas simultaneamente para assim obter a evolução espaço-temporal de todos os campos envolvidos.

Devemos ressaltar que não existe acoplamento explícito entre os campos eletromagnéticos induzidos ou externos ¹ e a equação da energia. A influência desses campos sobre a equação da energia será resultado de uma análise que abordaremos no capítulo 3.

Nos tópicos seguintes iremos expor dois modelos com os quais trabalharemos nos capítulos seguintes.

3.1 Reescrevendo $\vec{J} \times \vec{B}$ como um divergente total

A forma com que trataremos o termo de acoplamento $\vec{J} \times \vec{B}$ e a equação constitutiva para a densidade de corrente, resultará em modelos magnetohidrodinâmicos distintos. Nesta seção iremos reescrever o termo de acoplamento de maneira a interpretar os campos \vec{J} e \vec{B} em forma de pressão magnética. Para isso vamos reescrever o termo fonte $\vec{J} \times \vec{B}$ na Equação (3.2) como um divergente total.

Sendo o plasma um fluido ionizado com carga efetiva nula, onde as cargas positivas e

¹Para não ficarmos escrevendo o tempo todo "campos eletromagnéticos induzidos ou externos", iremos apenas nos referir aos campos como eletromagnéticos.

negativas estão em equilíbrio, podemos desconsiderar² o termo $\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \sim 0$ na Equação (2.58),

$$-\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{\nabla} \times \vec{B} = \vec{J}, \quad (3.5)$$

o que implica,

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \vec{J} \quad (3.6)$$

E a força de corpo pode ser reescrita como,

$$\vec{J} \times \vec{B} = -\vec{B} \times \vec{J} = -\vec{B} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) \quad (3.7)$$

Usando a identidade vetorial

$$\frac{1}{2} \vec{\nabla} (\vec{B} \cdot \vec{B}) = \vec{B} \cdot \vec{\nabla} \vec{B} + \vec{B} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) \quad (3.8)$$

podemos reescrever a força de corpo,

$$\vec{J} \times \vec{B} = \vec{B} \cdot \vec{\nabla} \vec{B} - \frac{1}{2} \vec{\nabla} (\vec{B} \cdot \vec{B}) \quad (3.9)$$

Precisamos agora trabalhar o termo $\vec{B} \cdot \vec{\nabla} \vec{B}$ e transformá-lo em um divergente total. Usando $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ conseguimos escrever,

$$\vec{B} \cdot \vec{\nabla} \vec{B} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{B} \vec{B}) \quad (3.10)$$

E o termo de acoplamento fica,

$$(\vec{J} \times \vec{B})_\beta = \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{B} \vec{B} - \frac{1}{2} B^2 \vec{\bar{I}} \right)_\beta = \partial_\alpha \left(b_\alpha b_\beta - \frac{1}{2} b^2 \delta_{\alpha\beta} \right) \quad (3.11)$$

onde $\vec{\bar{I}} \equiv \delta_{\alpha\beta} \hat{e}_\alpha \hat{e}_\beta$ é o tensor identidade.

Utilizando o resultado, Equação (3.11), podemos reescrever a Equação (3.2),

²Estamos construindo um modelo que desconsidera campos externos. A preocupação aqui é com a geração de campos eletromagnéticos internos ao plasma. Neste sentido para qualquer rearranjo de cargas elétricas, pela propriedade de neutralidade discutida no capítulo Motivação, qualquer tentativa de estabelecimento de potenciais estáticos, as cargas sofrerão rearranjo interno que tenderá a blindar tal potencial, de forma que o aparecimento do termo $\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$ pode ser desprezado para qualquer ponto no interior do fluido.

$$\partial_t(\rho u_\beta) + \partial_\alpha \left(\rho u_\alpha u_\beta - b_\alpha b_\beta + \left(p + \frac{1}{2} b^2 \right) \delta_{\alpha\beta} \right) - \mu \partial_\alpha \left[\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] - \rho F_\beta = 0, \quad (3.12)$$

E o campo magnético é reinterpretado como uma contribuição aos termos de pressão termodinâmica e pressão hidrodinâmica.

Para este modelo tratamos a densidade de corrente \vec{J} na Equação (3.2) através da lei de Ampère $\vec{J} = \vec{\nabla} \times \vec{B}$.

Precisamos ainda introduzir a informação fenomenológica da geração dos campos eletromagnéticos induzidos pelo escoamento do fluido. Esta informação está na Equação de Ohm generalizada (3.4).

O acoplamento fenomenológico entre os campos induzidos e hidrodinâmicos será tratado na seção seguinte.

3.2 Dinâmica dos campos \vec{E} e \vec{B} no interior do plasma

Consideremos a Equação de indução eletromagnética (3.6) e a Equação constitutiva para a densidade de corrente (3.4),

$$\vec{J} = \vec{\nabla} \times \vec{B} \quad (3.13)$$

$$\vec{J} = \sigma (\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}). \quad (3.14)$$

Igualando as duas últimas equações,

$$\sigma (\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}) = \vec{\nabla} \times \vec{B}, \quad (3.15)$$

e,

$$\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B} = \eta (\vec{\nabla} \times \vec{B}) \quad (3.16)$$

onde $\eta = \frac{1}{\sigma}$, ou seja,

$$\vec{E} = -\vec{u} \times \vec{B} + \eta (\vec{\nabla} \times \vec{B}). \quad (3.17)$$

Substituindo a Equação (3.17) na Equação (2.59) conseguimos

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \vec{\nabla} \times \left(-\vec{u} \times \vec{B} + \eta(\vec{\nabla} \times \vec{B}) \right) = 0 \quad (3.18)$$

que resume a dinâmica dos campos eletromagnéticos no plasma.

A igualdade, Equação (3.15), e a obtenção do campo elétrico induzido, Equação (3.17), garante a introdução da informação fenomenológica entre os campos eletromagnéticos induzidos e hidrodinâmicos na evolução do campo \vec{B} através da Equação (3.18) que é o suficiente para a obtenção da evolução dos campos envolvidos.

Aplicando o divergente sobre a Equação (3.18),

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = \left(\vec{\nabla} \times (\vec{u} \times -\eta \vec{\nabla} \times \vec{B}) \right) \quad (3.19)$$

que implica

$$\frac{\partial \vec{\nabla} \cdot \vec{B}}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} \times (\vec{u} \times \vec{B} - \eta \vec{\nabla} \times \vec{B}) \right) = 0 \quad (3.20)$$

concluindo com,

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (3.21)$$

garantindo a manutenção da Equação (2.61) na evolução do campo \vec{B} na Equação (3.18)

De maneira definitiva, a equação de evolução dos campos eletromagnéticos para o plasma pode ser resumida por,

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{\nabla} \times \left(\vec{u} \times \vec{B} - \eta(\vec{\nabla} \times \vec{B}) \right) |_{\vec{\nabla} \cdot \vec{B}=0} \quad (3.22)$$

onde $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ é condição de contorno.

3.3 Modelos magnetohidrodinâmicos

Em resumo, destacamos aqui o conjunto de equações que caracterizam dois modelos magnetohidrodinâmicos distintos:

Modelo baseado em uma modificação do segundo momento hidrodinâmico,

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) &= 0 \\ \partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha \left(\rho u_\alpha u_\beta - b_\alpha b_\beta + \left(p + \frac{1}{2} b^2 \right) \delta_{\alpha\beta} \right) - \mu \partial_\alpha \left[\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] - \rho F_\beta &= 0 \\ \partial_t (\rho e) + \vec{\nabla} \cdot (p \vec{u}) + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - \mu \left[(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) - \frac{D}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \delta_{\alpha\beta} \right] \partial_\alpha u_\beta &= 0 \\ \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \vec{\nabla} \times \left(-\vec{u} \times \vec{B} + \eta (\vec{\nabla} \times \vec{B}) \right) &= 0\end{aligned}$$

Modelo completo,

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) &= 0 \\ \partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta + p \delta_{\alpha\beta}) - \mu \partial_\alpha \left[\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] - \rho F_\beta - \rho (\vec{u} \times \vec{B}) &= 0 \\ \partial_t (\rho e) + \vec{\nabla} \cdot (p \vec{u}) + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - \mu \left[(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) - \frac{D}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \delta_{\alpha\beta} \right] \partial_\alpha u_\beta &= 0 \\ \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \vec{\nabla} \times \left(-\vec{u} \times \vec{B} + \eta (\vec{\nabla} \times \vec{B}) \right) &= 0\end{aligned}$$

que são as equações da conservação da massa, balanço de quantidade de movimento, balanço de energia interna e , e equação resistiva para o campo magnético \vec{B} , onde \vec{q} é o vetor fluxo de calor.

O modelo baseado na modificação do segundo momento hidrodinâmico é construído pela introdução da Equação de Ampère (2.58) diretamente no termo de acoplamento $\vec{J} \times \vec{B}$ na equação de Navier Stokes, enquanto o modelo completo trata explicitamente a ação do campo magnético \vec{B} sobre o campo hidrodinâmico através da introdução do termo de acoplamento $\vec{u} \times \vec{B}$ na equação de Navier Stokes.

Em resumo podemos dizer que a diferença básica entre os dois modelos está na forma com que tratam a densidade de corrente no acoplamento $\vec{J} \times \vec{B}$. No modelo clássico $\vec{J} = \vec{\nabla} \times \vec{B}$ e no modelo convencional $\vec{J} = \rho \vec{u}$, construindo dois termos de acoplamento distintos $\vec{J} \times \vec{B} = (\vec{\nabla} \times \vec{B}) \times \vec{B} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{b}\vec{b} - \frac{1}{2} b^2 \vec{I})$ e $\vec{J} \times \vec{B} = \rho \vec{u} \times \vec{B}$

Os capítulos seguintes têm por objetivo recuperar os modelos completo e o baseado na modificação do segundo momento hidrodinâmico através de modelos cinéticos apropriados. Os modelos cinéticos que serão desenvolvidos serão para a aproximação de um fluido. Isso justifica a não introdução do efeito Joule na equação de balanço para a energia interna.

4 *Conceitos gerais em teoria cinética*

Neste capítulo iremos construir e recuperar os principais resultados da teoria cinética dos gases. Partindo de uma construção mecânica para um sistema de N partículas definidas sobre o espaço $(6N + 1)$ dimensional, $3N$ dimensões de espaço $N\vec{x}$, $3N$ dimensões de velocidade $N\vec{\xi}$ e tempo t , denominado espaço de fase μ , daremos um sentido estatístico a este sistema definindo sobre ele uma função distribuição de partículas $f = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ que nos dará a distribuição, ou o estado configuracional do sistema de N partículas para cada ponto $(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ deste espaço. Em seguida construiremos a equação que governa a dinâmica desta função e a relação dela com as quantidades e equações de transporte macroscópicas.

4.1 Construção da equação de transporte de Boltzmann

Considere um gás monoatômico constituído de N partículas de massa m limitado a um volume V do espaço [10] [11]. As colisões entre as partículas deste gás acontecem aos pares de forma que o caminho percorrido pelas partículas antes de sofrerem uma colisão, livre caminho médio, é muito maior que o diâmetro das partículas. A função distribuição de velocidades $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$, em um dado volume infinitesimal ¹ $d\mu \equiv dx_1 dx_2 dx_3 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 dt$, especificará o número de partículas $N(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ que se encontram em uma região do espaço entre \vec{x} e $\vec{x} + d\vec{x}$ com velocidades entre $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi} + d\vec{\xi}$ em um dado instante de tempo t através de

$$N(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\mu \equiv f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) dx_1 dx_2 dx_3 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 dt \quad (4.1)$$

Portanto a evolução temporal da função distribuição $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ nos trará o conhecimento completo do estado configuracional do sistema de N partículas. A medida em

¹Escolheremos de acordo com a conveniência umas das notações $d\mu = d^3x d^3\xi dt = d\vec{x} d\vec{\xi} dt = dx_1 dx_2 dx_3 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 dt$ para indicar volume no espaço de fase μ

que o tempo passa, e com a atuação de alguma força externa \vec{F} , tanto as posições como as velocidades das N partículas mudarão, ou seja, para uma dada variação de tempo $t \rightarrow t + \delta t$ cada posição e cada momento das N partículas sofrerão as respectivas atualizações $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \delta\vec{x}$ e $\vec{\xi} \rightarrow \vec{\xi} + \vec{\xi}\delta t$, ou seja,

$$f(\vec{x} + \vec{\xi}\delta t, \vec{\xi} + \frac{\vec{F}}{m}\delta t, t + \delta t) = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} \quad (4.2)$$

onde $\vec{\xi}$ é a velocidade das partículas limitadas ao volume $d\mu$, e $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col}$ é o operador de colisão, de forma que na ausência de colisões ou em algum estado de equilíbrio $^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} = 0$ e $f(\vec{x} + \vec{\xi}\delta t, \vec{\xi} + \frac{\vec{F}}{m}\delta t, t + \delta t) = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ de forma que a função distribuição permanecerá invariante no tempo.

Expandindo série de Taylor o lado esquerdo da Equação (4.2) conseguimos,

$$(\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_r + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_\xi + \frac{\partial}{\partial t})f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} \quad (4.3)$$

Para expandir em série de Taylor a função distribuição de velocidades $f(\vec{x} + \vec{\xi}\delta t, \vec{\xi} + \frac{\vec{F}}{m}\delta t, t + \delta t)$, estamos considerando que a variação da função distribuição ao longo de um intervalo de tempo δt é muito pequena, onde δt é grande comparado ao tempo médio de uma colisão e pequeno comparado ao tempo médio entre duas colisões. Desta forma, estamos assumindo que a função distribuição permanecerá constante ao longo de uma distância da ordem do tamanho das partículas, e variável ao longo de uma distância da ordem do livre caminho médio, de forma que o tempo médio para se percorrer essa distância é muito maior do que δt .

Antes de avaliarmos o termo de colisão propriamente dito deveremos ter em mente algumas hipóteses relacionadas as colisões entre partículas, citando [11].

1ª Hipótese: Para um gás rarefeito somente as interações entre os pares de partículas são levadas em consideração.

2ª Hipótese: O efeito das forças externas sobre as partículas durante a colisão é pequeno em comparação com as forças que agem entre as partículas.

3ª Hipótese: Em qualquer posição \vec{x} e tempo t as velocidades de duas partículas não estão correlacionadas, ou seja $f(\vec{\xi}, \vec{\xi}_1) = f(\vec{\xi})f(\vec{\xi}_1)$ são funções independentes. Esta suposição é conhecida como *suposição do caos molecular*.

²Entende-se que em um estado de equilíbrio a entropia é máxima e as colisões não poderão mais alterar o estado macroscópico do sistema

Levando em conta as hipóteses acima, para avaliarmos o termo de colisão devemos relacionar o fluxo de estados no espaço de fase μ com a mudança de estados de velocidades pré-colisionais $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$ para estados de velocidades pós-colisionais $\vec{\xi}'$ e $\vec{\xi}'_1$ em função do parâmetro de impacto definido pelo potencial existente entre as N partículas.

Desta forma, imaginemos duas partículas com velocidades assintóticas ³ pré-colisionais $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$, onde a velocidade relativa é definida por $\vec{g} \equiv \vec{\xi}_1 - \vec{\xi}$, onde $|\vec{g}| \equiv g$, e após a colisão assumem estados pós-colisionais $\vec{\xi}'$ e $\vec{\xi}'_1$ conforme mostra a Figura 2

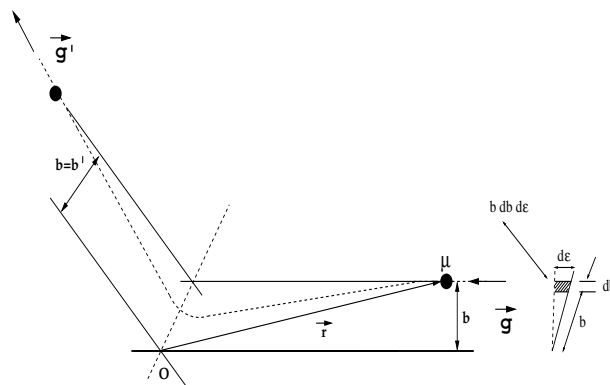


Figura 2: Partícula com velocidade $\vec{\xi}_1$ colidindo com partícula de velocidade $\vec{\xi}$ centrada no ponto O . De forma que $\vec{g} = \vec{\xi}_1 - \vec{\xi}$ é a velocidade relativa.

Fixando a partícula com velocidade $\vec{\xi}$ no ponto O , consideremos o cilindro de base $b db d\epsilon$ e de comprimento $g \Delta t$. O número de partículas com velocidades entre $\vec{\xi}_1$ e $\vec{\xi}_1 + d\vec{\xi}_1$ contidas neste cilindro de colisão é dado por

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) d\vec{\xi}_1 g \Delta t b db d\epsilon \quad (4.4)$$

onde b é o parâmetro de colisão e ϵ o ângulo de rotação para fora do plano de colisão. As partículas contidas neste cilindro irão colidir com todas as $N = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}$ partículas com velocidades entre $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi} + d\vec{\xi}$ centradas em um ponto O qualquer do espaço em qualquer instante t , anulando estados pré-colisionais $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$ criando novos estados pós-colisionais $\vec{\xi}'$ e $\vec{\xi}'_1$.

Portanto o número de partículas contidas no cilindro de colisão vezes o número de partículas centradas no ponto O dará o número de colisões que anularão pontos do espaço de fase ⁴ com estados $\vec{\xi}$,

³Ver discussão sobre colisões binárias no apêndice *A*

⁴Na quantidade abaixo suprimimos as diferenciais $d\vec{x}$ e $d\vec{\xi}$ pois estamos interessados no número de colisões que anulam pontos do espaço de fase com estados de velocidade $\vec{\xi}$ para qualquer ponto \vec{x} e $\vec{\xi}$ do espaço de fase

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) d\vec{\xi}_1 g \Delta t b db d\epsilon \cdot f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \quad (4.5)$$

Se dividirmos a Equação (4.5) por Δt e integrarmos sobre todos os valores de velocidade $\vec{\xi}_1$ variando de $-\infty$ a $+\infty$, sobre o ângulo azimutal ϵ variando de 0 a 2π e sobre o parâmetro de impacto b variando de 0 a b ou seja,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col}^- = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) d\vec{\xi}_1 g b db d\epsilon f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \quad (4.6)$$

obteremos o número de estados pós-colisionais $\vec{\xi}'$ e $\vec{\xi}'_1$ criados, ou o número de estados pré-colisionais $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$ anulados em um certo instante de tempo t .

Neste raciocínio levamos em conta as colisões que anulam estados pré-colisionais $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$, porém devemos levar em conta também as colisões que criam estes mesmos estados pré-colisionais, e o balanço entre as colisões que criam e anulam estes estados nos dará o fluxo total de estados no espaço de fase μ

Valendo-se das hipóteses anteriores onde as colisões binárias entre partículas com velocidades assintóticas pré-colisionais $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$ as levavam a um estado de velocidade pós-colisional $\vec{\xi}'$ e $\vec{\xi}'_1$, podemos inferir, em um raciocínio inverso e levando em conta a simetria dos sistemas mecânicos sobre reversão temporal, que partículas com velocidades assintóticas pré-colisionais $\vec{\xi}'$ e $\vec{\xi}'_1$, após uma colisão inversa terão velocidades assintóticas pós-colisionais $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$, de forma que estas serão as colisões que criarão pares de partículas em um estado de velocidade $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$ no espaço de fase. Portanto o número de colisões que criam partículas em um estado de velocidade $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$ para qualquer região do espaço \vec{x} e tempo t é,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col}^+ = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f(\vec{x}, \vec{\xi}'_1, t) d^3\xi'_1 g \Delta t b db d\epsilon f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \quad (4.7)$$

onde o jacobiano da transformação de coordenadas é unitário, de modo que $d\xi'_1 d\xi'_1 = d\xi d\xi_1$

Portanto, de acordo com as equações (4.3), (4.6) e (4.7), a evolução da função distribuição de velocidades no espaço de fase é dada por,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_\xi f = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b (f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\xi_1 \quad (4.8)$$

é conhecida como equação de transporte de Boltzmann, onde $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \equiv f$, $f(\vec{x}, \vec{\xi}', t) \equiv$

$$f', f(\vec{x}, \vec{\xi}_1, t) \equiv f_1 \text{ e } f(\vec{x}, \vec{\xi}'_1, t) \equiv f'_1.$$

Na ausência de forças externas,

$$\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\partial f}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b (f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.9)$$

Ou para simplificar a notação, iremos nos referenciar a equação de Boltzmann como,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_\xi f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} \quad (4.10)$$

A busca da teoria cinética é a síntese de modelos físicos com base na simplificação do operador de colisão,

$$\Omega[f] = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b (f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.11)$$

E de forma geral, podemos escrever o operador de colisão como,

$$\Omega[f] = -f \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1 g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f'_1 f' g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.12)$$

ou

$$\Omega[f] = -f\nu(\vec{\xi}) + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f'_1 f' g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.13)$$

onde,

$$\nu(\vec{\xi}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1 g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.14)$$

representa a frequência de colisão. A frequência de colisão depende explicitamente da velocidade relativa das partículas $g = |\vec{\xi}_1 - \vec{\xi}|$, portanto estará ligada diretamente à temperatura do gás.

A função f no primeiro membro do lado direito da Equação (4.12) não depende do processo de integração pois no momento anterior a colisão as partículas alvo $\vec{\xi}$ não dependem da velocidade das partículas incidentes, portanto pode ser tirada da integral.

A partir deste ponto e para facilitar a notação, trataremos o conjunto de integrais

$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b$ apenas como uma integral simples \int de maneira que as integrais e seus limites estarão definidas por suas diferenciais db $d\epsilon$ $d\vec{\xi}_1$ e qualquer mudança nos limites sugeridos acima será previamente comentada.

Uma importante informação que pode ser extraída da equação de Boltzmann é relativa a situação de equilíbrio macroscópica. Nesta condição, sob o ponto de vista mesoscópico, o sistema experimenta o número máximos de estados acessíveis de forma que as colisões não alteram mais o estado macroscópico do sistema, tornando o lado direito da equação (4.9), ou seja

$$f'_1 f' = f_1 f \quad (4.15)$$

Operando com logaritmo de ambos os lados⁵ da Equação (4.15),

$$\ln f_1^{0'} + \ln f^{0'} = \ln f_1^0 + \ln f^0 \quad (4.16)$$

Levando em conta a preservação da massa, quantidade de movimento e energia respectivamente representadas pelas quantidades 1 , $\vec{\xi}$ e ξ^2 , a forma mais geral possível para $\ln f$ será uma combinação linear dos invariantes colisionais 1 , $\vec{\xi}$ e ξ^2 ,

$$\ln f^{(0)} = M_1 \xi^2 V^0 + M_2 \xi V + \xi^0 V^2 \quad (4.17)$$

Onde M_1 , M_2 e V são constantes a serem determinadas⁶ pelos vínculos,

$$\begin{aligned} \int f^{(0)} d^3 \xi &= \rho \\ \int f^{(0)} \vec{\xi} d^3 \xi &= \rho \vec{u} \\ \int f^{(0)} \frac{mc^2}{2} d^3 \xi &= \frac{D}{2} \rho kT \end{aligned} \quad (4.18)$$

onde D é o número de graus de liberdade das N partículas livres. E conclui-se com a obtenção da consagrada distribuição de equilíbrio de Maxwell Boltzmann,

⁵Os índices 0 nas funções f abaixo, são para evidenciar o estado de equilíbrio macroscópico

⁶A Equação (4.17) pode ser convenientemente escrita como $\ln f^{(0)} = -W_1 (\vec{\xi} + V)^2 + \ln W_2$ onde continuamos com 3 constantes a determinar em uma combinação linear dos invariantes colisionais 1 , $\vec{\xi}$ e ξ^2

$$f^{(0)} = \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{D/2} e^{-\frac{(\vec{\xi}-\vec{u})^2}{2kT/m}} \quad (4.19)$$

Fica evidente a não dependência de $f^{(0)}$ em \vec{x} . Portanto um fluido em equilíbrio pode ser representado ponto a ponto pela função distribuição de velocidades de Maxwell Boltzmann.

4.2 O operador de Bhatnagar Gross e Krook - BGK

O modelo de colisão conhecido como BGK [6] ⁷ [12] ⁸ é frequentemente utilizado na representação do operador de colisão $\Omega[f]$ por sua simplicidade e pelos resultados que proporciona na recuperação das equações macroscópicas conforme veremos no capítulo seguinte.

O ponto central na construção do modelo BGK é supor que o fluido pode ser representado por sucessivos estados de equilíbrio locais. Neste sentido cada ponto do fluido ⁹ pode ser aproximado por uma função Maxwelliana. Valendo do raciocínio anterior na construção da equação de Boltzmann e do fato de que o estado das partículas poderá ser localmente representado por funções Maxwellianas podemos dizer que o número de colisões que restituem estados de velocidade $\vec{\xi}$ no cilindro de colisão, Equação (4.7), podem ser representadas por,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1' f' g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1^{0'} f^{0'} g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.20)$$

Levando em conta que

$$\Omega[f^{(0)}] = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b (f_1^{0'} f^{0'} - f_1^{(0)} f^{(0)}) g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 = 0 \quad (4.21)$$

Podemos aproximadamente dizer que o estado final f das partículas incidentes tenderão ao estado Maxwelliano e que o estado final das partículas alvo não dependerão da velocidade das partículas incidentes de forma que podemos reescrever a Equação (4.20) aproximadamente como,

⁷Ver página 295 da referência citada.

⁸Ver página 40 da referência citada.

⁹Por ponto de fluido entendemos que o fluido pode ser representado por um campo contínuo, associando a cada ponto funções escalares e vetoriais

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f'_1 f' g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \simeq f^0 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1^0 g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.22)$$

Substituindo a Equação (4.22) na Equação (4.12) conseguimos,

$$\Omega[f] = -f \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1 g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 + f^0 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1^0 g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.23)$$

Como estamos supondo estados de equilíbrio local, vamos impor localmente a igualdade entre os primeiros momentos,

$$\int \begin{pmatrix} 1 \\ \vec{\xi} \\ \vec{\xi} \cdot \vec{\xi} \end{pmatrix} f d\vec{\xi} = \int \begin{pmatrix} 1 \\ \vec{\xi} \\ \vec{\xi} \cdot \vec{\xi} \end{pmatrix} f^{(0)} d\vec{\xi} \quad (4.24)$$

que nos permite escrever que os estados das partículas incidentes f_1 poderão ser localmente representados por estados Maxwellianos na média,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1 g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1^0 g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.25)$$

Substituindo a Equação (4.25) no primeiro membro da Equação (4.23),

$$\Omega[f] = -f \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1^0 g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 + f^0 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1^0 g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.26)$$

que é conhecido como operador de Krook-Bhatnager-Gross ou BGK. De maneira mais simples podemos reescreve-lo como,

$$\Omega[f] = \nu(\vec{\xi}) [f^{(0)}(\vec{\xi}) - f(\vec{\xi})] \quad (4.27)$$

onde,

$$\nu(\vec{\xi}) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b f_1^0 g b db d\epsilon d\vec{\xi} \quad (4.28)$$

é a frequência de colisão.

4.3 Conexão entre os estados macroscópicos e microscópicos

Nesta seção [13] vamos fazer a conexão entre a função f definida sobre o espaço de fase μ e as funções macroscópicas da densidade ρ , da quantidade de movimento por unidade de volume $\rho\vec{u}$ e energia por unidade de volume ρe , onde e é a energia interna do sistema; a equação de transporte de Boltzmann e as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento e do transporte de energia.

Primeiramente definiremos a relação entre f e ρ , $\rho\vec{u}$ e ρe ,

Nível de descrição mesoscópico:

$$\boxed{f}$$

↓

Nível de descrição macroscópico:

$$\boxed{\rho \quad \rho\vec{u} \quad \rho e}$$

Em seguida a conexão entre as equações de transporte,

Nível de descrição mesoscópico: Equação de Boltzmann

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_\xi f = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b (f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1}$$

↓

Nível de descrição macroscópico: Equação de Navier Stokes

$$\boxed{\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \vec{u} \right) = -\vec{\nabla} p + \rho \frac{\vec{F}}{m} + \mu \left(\nabla^2 \vec{u} + \frac{1}{3} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) \right)}$$

e

Nível de descrição macroscópico: Equação da Energia

$$\boxed{\rho^{\frac{5}{3}} \left(\frac{\partial p}{\partial t} \rho^{-\frac{5}{3}} \right) - \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + \frac{2}{3} \eta_0 \left(\frac{2}{3} \delta_{ij} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} - \frac{\partial u_j}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = 0}$$

É natural entendermos a partir da definição de f que as quantidades macroscópicas deverão ser tomadas por um processo de média sobre a função f . Neste sentido podemos

definir a densidade do fluido para cada ponto (\vec{x}, t) do espaço como sendo a soma de todas as partículas com velocidade entre menos infinito e mais infinito que estão sobre o ponto \vec{x} no tempo t , ou seja,

$$\rho(\vec{x}, t) = \int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} \quad (4.29)$$

Analogamente definimos a velocidade por unidade de massa de um ponto de fluido como sendo a média das velocidades microscópicas pela densidade de partículas em um ponto \vec{x} em um certo instante de tempo t ,

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{\int \vec{\xi} f d\vec{\xi}}{\int f d\vec{\xi}} \quad (4.30)$$

A construção das quantidades, Equação (4.29) e Equação (4.30) nos permite escrever,

$$\rho \vec{u} = \int \vec{\xi} f d\vec{\xi} \quad (4.31)$$

Para a construção de algumas quantidades macroscópicas precisamos definir velocidade peculiar ,

$$\vec{c} = \vec{\xi} - \vec{u} \quad (4.32)$$

que descreve o desvio da média das velocidades microscópicas. No equilíbrio termodinâmico as velocidades peculiares coincidem com as velocidades microscópicas. Usando os resultados, Equação (4.29), Equação (4.30) e Equação (4.32) podemos concluir que,

$$\int c_\alpha f d\vec{\xi} = \int \xi_\alpha f d\vec{\xi} - u_\alpha \int f d\vec{\xi} = \rho u_\alpha - u_\alpha \rho = 0 \quad (4.33)$$

Considerando o fluxo de quantidade de movimento microscópico e considerando os resultados, Equação (4.29), Equação (4.30) e Equação (4.32) podemos escrever,

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int \xi_\alpha \xi_\beta f d\vec{\xi} = \rho u_\alpha u_\beta + \int c_\alpha c_\beta f d\vec{\xi} \quad (4.34)$$

Podemos reconhecer o último termo da Equação (4.34) como sendo o tensor tensão,

$$p_{\alpha\beta} = \int c_\alpha c_\beta f d\vec{\xi} \quad (4.35)$$

Analogamente a energia cinética total do gás pode ser escrita como,

$$\frac{1}{2} \int m \xi^2 f d\vec{\xi} = \frac{1}{2} \rho u^2 + \frac{1}{2} \int m c^2 f d\vec{\xi} \quad (4.36)$$

E o último termo da Equação (4.36) pode ser identificado como a energia interna por unidade de volume,

$$\rho e = \frac{1}{2} m \int c^2 f d\vec{\xi} \quad (4.37)$$

O fluxo de energia pode também ser escrito como,

$$\frac{1}{2} \int \xi_\alpha \xi^2 d\vec{\xi} = u_\alpha \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) + u_j p_{\alpha j} + \frac{1}{2} m \int c_\alpha c^2 f d\vec{\xi} \quad (4.38)$$

De forma análoga, o último termo da Equação (4.38) pode ser identificado com o fluxo de calor,

$$q_\alpha = \frac{1}{2} m \int c_\alpha c^2 f d\vec{\xi} \quad (4.39)$$

Deve-se tomar cuidado com a identificação da Equação (4.39) como sendo produzida por um gradiente de temperatura. É intuitivo pensar assim e na maioria dos casos a quantidade q_α estará sempre ligada ao fluxo de calor em alguma direção α devido a um gradiente de temperatura nesta mesma direção. Mas de maneira genérica devemos entender a Equação (4.39) como estando associada a um fluxo não convectivo de energia. Isto ficará claro nos capítulos seguintes quando no caso da aplicação de um campo magnético perpendicular um fluxo de um fluido iônico tivermos $\vec{q} \neq 0$ entre dois pontos de mesma temperatura.

Do ponto de vista fenomenológico e em geral para fluidos e gases existem dois modelos bem conhecidos,

Fluido de Euler, ou fluido não viscoso: Para fluidos com essa classificação estaremos desprezando efeitos de viscosidade, condutividade térmica e efeitos associados a transferência de energia por colisões. Para esses fluidos,

$$p_{jk} = p \delta_{jk} \quad q_j = 0 \quad (4.40)$$

Fluido de Navier-Stokes, ou fluidos viscosos: Neste caso estaremos considerando efeitos viscosos,

$$\begin{aligned} p_{jk} &= \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) + \lambda \frac{\partial u_n}{\partial x_n} \delta_{jk} - p \delta_{jk} \\ q_j &= -K \frac{\partial T}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (4.41)$$

Portanto tanto a informação viscosa quanto a não viscosa estão contidas no tensor p_{jk} . Para evidenciarmos os efeitos viscosos vamos subtrair de p_{jk} a contribuição não viscosa. Definimos assim o tensor tensão viscoso P_{jk} ,

$$P_{jk} = p_{jk} - p \delta_{jk} \quad (4.42)$$

Usaremos o tensor tensão viscoso quando quisermos evidenciar efeitos viscosos.

4.4 Equação geral de transferência

Nesta seção estamos interessados na obtenção, a partir da Equação de Boltzmann (4.9), das equações de conservação da massa, transporte de quantidade de movimento e energia. Para isso [14]¹⁰ [11]¹¹ vamos multiplicar a Equação de Boltzmann (4.10) por uma função arbitrária $Q(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ com decaimento no infinito mais rápido do que f , e proceder com um processo de média,

$$\int Q \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{\xi} + \int Q \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f d\vec{\xi} + \int Q \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{\xi}} f d\vec{\xi} = \int Q \Omega[f] d\vec{\xi} \quad (4.43)$$

Eliminando as derivadas sobre a função f , caracterizando assim o processo de média,

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial t} Q d\vec{\xi} &= \frac{\partial}{\partial t} \int f Q d\vec{\xi} - \int f \frac{\partial Q}{\partial t} d\vec{\xi} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \langle Q \rangle - \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle \\ \int \xi_j \frac{\partial f}{\partial x_j} Q d\vec{\xi} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \int \xi_j f Q d\vec{\xi} - \int \xi_j f \frac{\partial Q}{\partial x_j} d\vec{\xi} \end{aligned}$$

¹⁰página 166 da referência citada.

¹¹página 44 da referência citada.

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \xi_j Q \rangle - \left\langle \xi_j \frac{\partial Q}{\partial x_j} \right\rangle \\
\int F_j \frac{\partial f}{\partial \xi_j} Q d\vec{\xi} &= \int \frac{\partial}{\partial \xi_j} (F_j f Q) d\vec{\xi} - \int \frac{\partial F_j}{\partial \xi_j} f Q d\vec{\xi} - \int F_j f \frac{\partial Q}{\partial \xi_j} d\vec{\xi} \\
&= - \left\langle F_j \frac{\partial Q}{\partial \xi_j} \right\rangle
\end{aligned} \tag{4.44}$$

onde

$$\int \frac{\partial}{\partial \xi_j} (F_j f Q) d\vec{\xi} = F_j f Q \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0 \tag{4.45}$$

pois f possui decaimento no infinito com ξ mais rápido que qualquer função com dependência nas velocidades $\vec{\xi}$.

E a equação geral de transporte fica,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q \rangle - \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \xi_i Q \rangle - \left\langle \xi_i \frac{\partial Q}{\partial x_i} \right\rangle - \left\langle F_i \frac{\partial Q}{\partial \xi_i} \right\rangle = \hat{I}(Q) \tag{4.46}$$

onde,

$$\hat{I}(Q) = \int Q \Omega[f] d\vec{\xi} \quad \langle * \rangle = \int * f d\vec{\xi} \tag{4.47}$$

e índice repetido indica soma. Chamando a atenção para o fato de que no resultado, Equação (4.46) usamos,

$$\frac{\partial F_i}{\partial \xi_i} = 0 \tag{4.48}$$

o que pode a princípio gerar alguma dúvida quando F é a força de Lorentz,

$$\vec{F} = \vec{\xi} \times \vec{B} \tag{4.49}$$

mas devemos lembrar que F_x é independente de ξ_x ,

$$F_x = \xi_y B_z - \xi_z B_y \tag{4.50}$$

e o resultado, Equação (4.48) fica garantido.

4.5 Equações de balanço macroscópicas

Para recuperarmos a equação da conservação da massa fazemos $Q = m \equiv 1$ na Equação (4.46) e cada um dos seus termos fica,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \langle Q \rangle &= \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \langle Q \xi_j \rangle &= \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_j \\ \left\langle \xi_j \frac{\partial Q}{\partial x_j} \right\rangle &= 0 \\ \left\langle F_j \frac{\partial Q}{\partial \xi_j} \right\rangle &= 0 \\ \hat{I}(1) &= 0\end{aligned}$$

E obtemos a equação de conservação da massa,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (4.51)$$

Para a equação de balanço de quantidade de movimento $Q = m c_k \equiv c_k$. Calculando termo a termo a Equação (4.46),

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \langle Q_k \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \langle c_k \rangle = 0 \\ \left\langle \frac{\partial Q_k}{\partial t} \right\rangle &= \left\langle -\frac{\partial u_k}{\partial t} \right\rangle = \rho \frac{\partial u_k}{\partial t} \\ \frac{\partial \langle Q_k \xi_j \rangle}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \langle c_k \xi_j \rangle = \frac{\partial}{\partial x_j} \langle c_k c_j - c_k u_j \rangle \\ &= \frac{\partial p_{kj}}{\partial x_j} \\ \left\langle \xi_j \frac{\partial Q_k}{\partial x_j} \right\rangle &= \left\langle (c_j + u_j) \frac{\partial c_k}{\partial x_j} \right\rangle = -\rho u_j \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \\ \left\langle F_j \frac{\partial Q_k}{\partial \xi_j} \right\rangle &= \langle F_j \rangle \\ \hat{I}(c_k) &= \hat{I}_k\end{aligned} \quad (4.52)$$

e conseguimos a equação de balanço de quantidade de movimento,

$$\rho \frac{D}{Dt} u_k = \langle F_k \rangle - \frac{\partial p_{jk}}{\partial x_j} + \hat{I}_k \quad (4.53)$$

onde,

$$\frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (4.54)$$

e

$$\hat{I}_k = \int c_k \Omega[f] d\vec{\xi} \quad (4.55)$$

Os valores assumidos por \hat{I}_k dependerão da escolha do operador de colisão $\Omega[f]$

Para a equação de balanço de energia interna colocamos $Q = \frac{1}{2} m c^2$. E novamente, calculando termo a termo a Equação (4.46),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle Q \rangle}{\partial t} &= \frac{1}{2} \frac{\partial \langle c^2 \rangle}{\partial t} = \frac{\partial \rho e}{\partial t} = \frac{3}{2} \frac{\partial p}{\partial t} \\ \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle &= \left\langle c_k \frac{\partial u_k}{\partial t} \right\rangle = 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \langle Q \xi_j \rangle &= \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{1}{2} \langle \xi_j c^2 \rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} \langle c^2 c_j \rangle + \frac{1}{2} \langle c^2 u_j \rangle \right) = \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j p) \\ \left\langle \xi_j \frac{\partial Q}{\partial x_j} \right\rangle &= \left\langle \xi_j c_k \left(-\frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) \right\rangle = \frac{\partial u_k}{\partial x_j} p_{kj} \\ \left\langle F_j \frac{\partial Q}{\partial \xi_j} \right\rangle &= \left\langle F_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} \left(\frac{1}{2} c^2 \right) \right\rangle = \langle F_j c_j \rangle \\ &= \langle ((\vec{c} + \vec{u}) \times \vec{B}) \cdot \vec{c} \rangle = 0 \\ \hat{I}(c^2) &= \hat{I}_0 \end{aligned} \quad (4.56)$$

E obtemos a equação da energia interna,

$$\frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} p + \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + \frac{3}{2} \vec{\nabla} \cdot (\vec{u} p) + p_{kj} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} = \hat{I}_0 \quad (4.57)$$

Utilizando a Equação (4.58),

$$P_{jk} = p_{jk} - p\delta_{jk} \quad (4.58)$$

podemos reescrever os últimos dois termos do lado esquerdo da Equação (4.57),

$$\frac{3}{2}\vec{\nabla} \cdot (\vec{u}p) + p_{kj}\frac{\partial u_k}{\partial x_i} = \frac{5}{2}p\vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \frac{3}{2}\vec{u} \cdot \vec{\nabla}p + P_{kj}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j}\right) \quad (4.59)$$

Utilizando a Equação (4.59) podemos reescrever a Equação (4.57) como,

$$\frac{Dp}{Dt} + \frac{5}{3}p\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = \frac{2}{3}\left[\hat{I}_0 - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - P_{jk}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j}\right)\right] \quad (4.60)$$

Utilizando a equação da conservação da massa,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = -\frac{1}{\rho}\frac{D\rho}{Dt} \quad (4.61)$$

Substituindo a Equação (4.61) na Equação (4.60),

$$\frac{Dp}{Dt} - \frac{5}{3}\frac{p}{\rho}\frac{D\rho}{Dt} = \frac{2}{3}\left[\hat{I}_0 - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - P_{jk}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j}\right)\right] \quad (4.62)$$

Levando em conta que,

$$\rho^{\frac{5}{3}}\frac{D}{Dt}\left(p\rho^{-\frac{5}{3}}\right) = \frac{Dp}{Dt} - \frac{5}{3}\frac{k}{\rho}\frac{D\rho}{Dt} \quad (4.63)$$

Substituindo a Equação (4.63) na Equação (4.62),

$$\rho^{\frac{5}{3}}\frac{D}{Dt}\left(p\rho^{-\frac{5}{3}}\right) = \frac{2}{3}\left[\hat{I}_0 - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - P_{jk}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j}\right)\right] \quad (4.64)$$

que é a equação da energia interna. Se ao invés de $Q = c^2$ tivéssemos recuperado a equação da energia por $Q = \xi^2$ teríamos obtido a equação da energia total.

4.6 Cálculo dos coeficientes de transporte baseado em uma expansão *Ad-Hoc* da função distribuição em velocidades moleculares

Estamos interessados na construção de uma equação de evolução para o tensor tensão viscoso P_{jk} e para a condução de calor q_k . Lembrando da equação geral de transporte [14],

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q \rangle - \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle Q \xi_j \rangle - \left\langle \xi_j \frac{\partial Q}{\partial x_j} \right\rangle - \left\langle F_j \frac{\partial Q}{\partial \xi_j} \right\rangle = \hat{I}(Q) \quad (4.65)$$

Calcularemos a equação de transporte para a quantidade $Q = m c_k c_j \equiv c_k c_j$ e definindo $p_{i,j,\dots,k} = \langle c_i c_j \dots c_k \rangle$ termo a termo a Equação (4.65) fica,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle Q_{kj} \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \langle c_k c_j \rangle = \frac{\partial}{\partial t} p_{kj} \\ - \left\langle \frac{\partial Q_{kj}}{\partial t} \right\rangle &= - \left\langle - \frac{\partial u_k}{\partial t} c_j - \frac{\partial u_j}{\partial t} c_k \right\rangle = 0 \quad \text{onde } \langle c_k \rangle = 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \xi_j Q_{kj} \rangle &= \frac{\partial}{\partial x_l} \langle c_l c_j c_k \rangle + \frac{\partial}{\partial x_l} \langle u_l c_j c_k \rangle = \frac{\partial}{\partial x_l} (p_{lj k} + u_l p_{jk}) \\ - \left\langle \xi_l \frac{\partial Q_{kj}}{\partial x_l} \right\rangle &= \left\langle \xi_l \frac{\partial u_k}{\partial x_l} c_j + \xi_l \frac{\partial u_j}{\partial x_l} c_k \right\rangle = \frac{\partial u_k}{\partial x_l} p_{lj} + \frac{\partial u_j}{\partial x_l} p_{lk} \\ - \left\langle F_l \frac{\partial Q_{kj}}{\partial \xi_l} \right\rangle &= - \left\langle F_l \left[c_j \left(\delta_{kl} - \frac{\partial u_k}{\partial \xi_l} \right) + c_k \left(\delta_{lj} - \frac{\partial u_l}{\partial \xi_j} \right) \right] \right\rangle = - \langle F_k c_j - F_j c_k \rangle \equiv M_{kj} \\ \hat{I}(Q_{kj}) &= -\nu \int (f - f^{(0)}) c_k c_j d^3 \xi = -\nu (p_{kj} - p \delta_{kj}) = -\nu P_{jk} \end{aligned} \quad (4.66)$$

Somando os resultados, equações (4.66) a equação de transporte para o tensor tensão viscoso fica,

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{jk} + \frac{\partial}{\partial x_l} (p_{lj k} + u_l p_{jk}) + \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} p_{lj} + \frac{\partial u_j}{\partial x_l} p_{lk} \right) - M_{jk} = -\nu P_{jk} \quad (4.67)$$

Seguindo o mesmo procedimento iremos calcular a equação de transporte para o calor q_k , onde $Q_k = \frac{1}{2} c^2 c_k$ com a força de Lorentz $F_l = - (\vec{E} + \vec{\xi} \times \vec{B})_l$,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q_k \rangle = \frac{\partial}{\partial t} q_k$$

$$\begin{aligned}
-\left\langle \frac{\partial}{\partial t} Q_k \right\rangle &= \frac{\partial u_l}{\partial t} p_{lk} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_k}{\partial t} p_{ll} = \frac{\partial u_l}{\partial t} p_{lk} + \frac{3}{2} \frac{\partial u_l}{\partial t} \delta_{lk} p \\
\frac{\partial}{\partial x_j} \langle Q_k \xi_j \rangle &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\int f \frac{1}{2} c^2 c_k c_j d^3 \xi + \int f c^2 c_k u_j d^3 \xi \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} p_{jkll} + u_j q_k \right) \\
-\left\langle \xi_l \frac{\partial Q_k}{\partial x_l} \right\rangle &= \frac{\partial u_m}{\partial x_n} p_{nmk} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} q_l + u_l \frac{\partial u_n}{\partial x_l} \left(p_{nk} + \frac{1}{2} \delta_{nk} p_{jj} \right) \\
&= \frac{\partial u_m}{\partial x_n} p_{nmk} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} q_l + u_l \frac{\partial u_n}{\partial x_l} \left(p_{nk} + \frac{3}{2} \delta_{nk} p \right) \\
-\left\langle F_l \frac{\partial Q_k}{\partial \xi_l} \right\rangle &= -\left\langle F_l \left(c_l c_k + \frac{1}{2} c^2 \delta_{kl} \right) \right\rangle = \left\langle \left[\vec{E} + \vec{\xi} \times \vec{B} \right]_l \left(c_l c_k + \frac{1}{2} c^2 \delta_{kl} \right) \right\rangle \\
&= \left\langle \left(E_l + \epsilon_{lmn} c_m B_n + \epsilon_{lmn} u_m B_n \right) \left(c_l c_k + \frac{1}{2} c^2 \delta_{kl} \right) \right\rangle \\
&= \left[\left(\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B} \right)_j \left(p_{jk} + \frac{3}{2} p \delta_{jk} \right) + \left(\vec{q} \times \vec{B} \right)_k \right] \\
\hat{I}(Q)_k &= -\nu \int (f - f^{(0)}) \frac{1}{2} c^2 c_k d^3 \xi = -\nu \int f \frac{1}{2} c^2 c_k d^3 \xi = -\nu q_k \quad (4.68)
\end{aligned}$$

Unindo os termos, equações (4.68) e desconsiderando a ação de campos externos \vec{E} a equação de transporte para o calor fica,

$$\begin{aligned}
\left(p_{jk} + \frac{3}{2} p \delta_{jk} \right) \overbrace{\left(\frac{\partial u_j}{\partial t} + u_l \frac{\partial u_j}{\partial x_l} + \left(\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B} \right)_j \right)}^{\frac{Du_k}{Dt} = -\left(\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B} \right)_k - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p_{jk}}{\partial x_j}} + \frac{\partial q_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} p_{jknn} + u_j q_k \right) \\
+ p_{mnk} \frac{\partial u_n}{\partial x_m} + q_j \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + \left(\vec{q} + \vec{B} \right)_k = -\nu q_k
\end{aligned}$$

E finalmente,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial q_k}{\partial t} - \left(p_{jk} + \frac{3}{2} p \delta_{jk} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial p_{nj}}{\partial x_n} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} p_{jknn} + u_j q_k \right) \\
+ p_{mnk} \frac{\partial u_n}{\partial x_m} + q_j \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + \left(\vec{q} + \vec{B} \right)_k = -\nu q_k \quad (4.69)
\end{aligned}$$

Precisamos colocar as equações de transporte viscosas, Equação (4.67) e Equação (4.69) na dependência completa dos termos de viscosidade p_{jk} e condução de calor q_k . Levando em conta a aproximação de equilíbrio local, vamos expandir f em série de potência e calcular as quantidades p_{jkl} e M_{jk} em função das quantidades p_{jk} e q_k .

$$\begin{aligned}
\rho &= \int f d^3\xi = \int f^{(0)} (1 + A_j c_j + B_{jk} c_j c_k + C_j c^2 c_j) d^3\xi = \\
&= \int f^{(0)} d^3\xi + A_j \int f^{(0)} c_j d^3\xi + B_{jk} \int f^{(0)} c_j c_k d^3\xi + C_j \int f^{(0)} c^2 c_j d^3\xi \\
&= \rho + kT \rho B_{jk} \delta_{jk}
\end{aligned}$$

e isto implica que $B_{jj} = \text{tr}(B) = 0$

Para calcularmos A_j usaremos a identidade $\langle c_k \rangle = 0$,

$$\begin{aligned}
\langle c_k \rangle &= \int f c_k d^3\xi = \int f^{(0)} (1 + A_j c_j + B_{jk} c_j c_k + C_j c^2 c_j) c_k d^3\xi \\
&= A_j p \delta_{jk} + p 5kT C_j \delta_{jk} = 0
\end{aligned}$$

e isto implica que,

$$C_j = -\frac{A_j}{5kT} \quad (4.70)$$

Precisamos ainda calcular B_{jk} e A_k , e sabendo A_k saberemos C_j . Seguindo com nosso objetivo, vamos calcular p_{jk} e concluiremos por calcular B_{jk} ,

$$\begin{aligned}
p_{jk} &= \int f c_j c_k d^3\xi = \int f^{(0)} (1 + A_n c_n + B_{mn} c_n c_m + C_n c^2 c_n) c_j c_k d^3\xi \\
&= \int f^{(0)} c_j c_k d^3\xi + \int f^{(0)} c_j c_k d^3\xi + B_{mn} \int f^{(0)} c_m c_n c_j c_k d^3\xi = \\
&= p \delta_{jk} + kT p (B_{nn} \delta_{jk} + 2B_{jk}) = p \delta_{jk} + 2kT B_{jk}
\end{aligned} \quad (4.71)$$

Usando a Equação (4.42),

$$P_{jk} = p_{jk} - p \delta_{jk} \quad (4.72)$$

podemos concluir da Equação (4.71),

$$B_{jk} = \frac{P_{jk}}{2kT p} \quad (4.73)$$

Para calcularmos A_k seguiremos com o cálculo de q_k ,

$$\begin{aligned}
q_k &= \frac{1}{2} \int f c^2 c_k d^3 \xi = \frac{1}{2} \int f^{(0)} \left(1 + A_j c_j + B_{jm} c_j c_m + C_j c^2 c_j \right) c^2 c_k d^3 \xi \\
&= \frac{1}{2} A_j \int f^{(0)} c_j c^2 c_k d^3 \xi + \frac{1}{2} C_j \int f^{(0)} c^2 c_j c^2 c_k d^3 \xi = \\
&= \frac{1}{2} \left[k T p A_j (3 \delta_{jk} + \delta_{jk} + \delta_{jk}) + \frac{35}{4} C_j p (2 k T)^2 \delta_{jk} \right] \\
&= \frac{5}{2} k T p (A_k + 7 k T C_k)
\end{aligned}$$

E utilizando a Equação (4.70) conseguimos,

$$A_k = -\frac{q_k}{p k T} \quad (4.74)$$

De posse dos resultados, Equação (4.74), Equação (4.73) e Equação (4.70) podemos finalmente concluir,

$$\begin{aligned}
p_{jlk} &= \int f^{(0)} \left(A_n c_n c_j c_l c_k + C_n c^2 c_n c_j c_l c_k \right) d^3 \xi \\
&= -q_n (\delta_{jn} \delta_{kl} + \delta_{jk} \delta_{nl} + \delta_{jl} \delta_{nk}) + q_n \frac{7}{5} (\delta_{jn} \delta_{kl} + \delta_{jk} \delta_{nl} + \delta_{jl} \delta_{nk}) \\
&= \frac{2}{5} (q_j \delta_{kj} + q_l \delta_{jk} + q_k \delta_{jl})
\end{aligned} \quad (4.75)$$

da mesa forma,

$$p_{lkjj} = \int f c_l c_k c^2 d^3 \xi = k T (5 p \delta_{lk} + 7 P_{lk}) \quad (4.76)$$

E também podemos calcular M_{jk} ,

$$\begin{aligned}
M_{jk} &= \langle F_j c_k - F_k c_j \rangle = \left\langle \left[\vec{E} + \vec{c} \times \vec{B} \right]_j c_k - \left[\vec{E} + \vec{c} \times \vec{B} \right]_k c_j \right\rangle \\
&= \langle \epsilon_{jmn} c_m B_n c_k \rangle + \langle \epsilon_{kmn} c_m B_n c_j \rangle
\end{aligned} \quad (4.77)$$

Definindo $w_j = -B_j$ podemos reescrever a Equação (4.77),

$$\begin{aligned}
M_{jk} &= w_n (\epsilon_{jmn} \langle c_m c_k \rangle + \epsilon_{kmn} \langle c_m c_j \rangle) \\
&= w_n [\epsilon_{jmn} (p \delta_{mk} + P_{mk}) + \epsilon_{kmn} (p \delta_{mj} + P_{mj})]
\end{aligned}$$

$$= \epsilon_{jmn} w_n P_{mk} + \epsilon_{kmn} w_n P_{mj} \quad (4.78)$$

De posse dos resultados, Equação (4.78), Equação (4.75), Equação (4.76) e Equação (4.58), podemos reescrever a Equação de transporte viscosa (4.67)

$$\frac{\partial}{\partial t} p_{jk} + \frac{\partial}{\partial x_l} (p_{lj} + u_l p_{jk}) + \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} p_{lj} + \frac{\partial u_j}{\partial x_l} p_{lk} \right) - M_{jk} = -\nu P_{jk}$$

como,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (p \delta_{jk} + P_{jk}) &+ \frac{2}{5} \frac{\partial}{\partial x_l} (q_l \delta_{kj} + q_j \delta_{lk} + q_k \delta_{jl}) + \frac{\partial}{\partial x_l} [u_l (p \delta_{jk} + P_{jk})] \\ &+ \frac{\partial u_k}{\partial x_l} (p \delta_{jl} + P_{jl}) + \frac{\partial u_j}{\partial x_l} (p \delta_{lk} + P_{lk}) \\ &+ w_m (\epsilon_{jnm} P_{mk} + \epsilon_{knm} P_{mj}) = -\nu P_{jk} \end{aligned} \quad (4.79)$$

E a Equação de transporte para o calor (4.69),

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_k}{\partial t} - \left(p_{jk} + \frac{3}{2} p \delta_{jk} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial p_{nj}}{\partial x_n} &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} p_{jknn} + u_j q_k \right) \\ &+ p_{mnk} \frac{\partial u_n}{\partial x_m} + q_j \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + (\vec{q} + \vec{B})_k = -\nu q_k \end{aligned}$$

como,

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_k}{\partial t} - \left(p \delta_{jk} + P_{jk} + \frac{3}{2} p \delta_{jk} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_n} (p \delta_{nj} + P_{nj}) &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{5}{2} k T p \delta_{jk} + \frac{7}{2} k T P_{jk} + u_j q_k \right) \\ &+ \frac{2}{5} (q_n \delta_{jk} + q_j \delta_{nk} + q_k \delta_{nj}) \frac{\partial u_j}{\partial x_n} + q_j \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + (\vec{q} \times \vec{B})_k = -\nu q_k \end{aligned} \quad (4.80)$$

4.6.1 Freqüência de colisão muito maior que a freqüência de oscilação do plasma $w_c \gg \nu$

O objetivo, de na seção anterior, calcularmos as equações de transferência para o tensor tensão viscoso e para o calor é justamente entender a relação entre eles P_{jk} , q_k e as quantidades p , ρ , T e \vec{u} . Para chegarmos nessas relações vamos supor que a freqüência

de colisão¹² $\nu = \frac{1}{\tau}$ é suficientemente grande, como é natural de se intuir em gases, de forma que podemos expandir o tensor tensão viscoso e o fluxo não convectivo de energia na seguinte forma,

$$P_{jk} = Z_{jk}^0 + \frac{Z_{jk}^1}{\nu} + \frac{Z_{jk}^2}{\nu^2} + \dots \quad (4.81)$$

$$q_k = D_k^0 + \frac{D_k^1}{\nu} + \frac{D_k^2}{\nu^2} + \dots \quad (4.82)$$

Podemos agora substituir respectivamente as expansões, Equação (4.81) e Equação (4.82) nas equações de transporte viscosa, Equação (4.79) e de transporte de calor, Equação (4.80) e coletar os termos de potência ν^0 , ν^{-1} e ν^{-2} . A justificativa de tratarmos os coeficientes P_{jk} e q_k separadamente é de que são estes termos independentes, ou seja, a coexistência de ambos colabora com termos fontes independentes nas equações hidrodinâmicas e de transporte. Podemos portanto tratar fenômenos hidrodinâmicos viscosos isotérmicos ou, não isotérmicos e não viscosos.

Seguindo este raciocínio, e desprezando os termos que dependem de q_k , vamos substituir a expansão, Equação (4.81) na Equação de transporte viscosa (4.79),

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(p\delta_{lk} + Z_{lk}^0 + \frac{Z_{lk}^1}{\nu} + \frac{Z_{lk}^2}{\nu^2} \right) &+ \delta_{lk} p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \delta_{lk} u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[u_j \left(Z_{lk}^0 + \frac{Z_{lk}^1}{\nu} + \frac{Z_{lk}^2}{\nu^2} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial u_l}{\partial x_j} \left(p\delta_{jk} + Z_{jk}^0 + \frac{Z_{jk}^1}{\nu} + \frac{Z_{jk}^1}{\nu^2} \right) \\ &+ \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \left(p\delta_{jl} + Z_{jl}^0 + \frac{Z_{jk}^1}{\nu} + \frac{Z_{jk}^1}{\nu^2} \right) + \\ &+ \underbrace{w_m \left[\epsilon_{lmn} \left(Z_{mk}^0 + \frac{Z_{mk}^1}{\nu} + \frac{Z_{mk}^1}{\nu^2} \right) + \epsilon_{kmn} \left(Z_{ml}^0 + \frac{Z_{ml}^1}{\nu} + \frac{Z_{ml}^1}{\nu^2} \right) \right]}_{l \neq k} \\ &= -\nu Z_{jl}^0 - Z_{lk}^1 - \frac{Z_{lk}^1}{\nu} \end{aligned}$$

Agrupando os termos¹³ em ν e considerando campos magnéticos de baixa intensidade, ou seja $\frac{w_m}{\nu} \ll 1$,

¹² τ é o tempo de relaxação

¹³Na consideração acima, onde $l \neq k$ implicará na nulidade de um dos termos sublinhados, pois para esta escolha teremos P_{lk} para $l = k$ o que implica como vimos $P_{ll} = 0$

$$\begin{aligned}
\nu^1 : \quad Z_{lk}^0 &= 0 \\
\nu^0 : -Z_{lk}^1 &= \left(\frac{\partial}{\partial t} p \delta_{lk} \right) + \delta_{lk} p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \delta_{lk} u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + p \frac{\partial u_l}{\partial x_j} \delta_{jk} + p \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \delta_{jl} \\
&= \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \delta_{lk} + p \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \\
&= \left(\frac{Dp}{Dt} + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right) \delta_{lk} + p \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \tag{4.83}
\end{aligned}$$

Levando em conta respectivamente a equação da conservação da massa e a equação da energia independente de q_k ,

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \tag{4.84}$$

$$\rho^{\frac{5}{3}} \frac{D}{Dt} \left(p \rho^{-\frac{5}{3}} \right) = 0 \tag{4.85}$$

podemos concluir que,

$$\frac{Dp}{Dt} = \frac{5}{3} \frac{p}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = -\frac{5}{3} p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \tag{4.86}$$

Substituindo a Equação (4.86) na Equação (4.83),

$$-Z_{lk}^1 = p \left(-\frac{2}{3} \delta_{lk} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \tag{4.87}$$

Usando a Equação (4.87) e Equação (4.81) conseguimos o tensor tensão viscoso,

$$P_{lk} = \mu \left(\frac{2}{3} \delta_{lk} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} - \frac{\partial u_l}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \quad \mu = \frac{p}{\nu} = p\tau \tag{4.88}$$

Portanto quando $\frac{w_m}{\nu} \ll 1$ recuperamos a equação de Navier Stokes.

Seguindo o mesmo raciocínio, desprezando termos proporcionais a P_{lk} e substituindo a Equação (4.82) na Equação de transporte do calor,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(D_k^0 + \frac{D_k^1}{\nu} + \frac{D_k^2}{\nu^2} \right) - \left(p \delta_{jk} + P_{jk} + \frac{2}{3} p \delta_{jk} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_n} (p \delta_{nj} + P_{nj})$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{5}{2} k T p \delta_{nk} + \frac{7}{2} P_{nk} + u_n D_k^0 + \frac{u_n D_k^1}{\nu} + \frac{u_n D_k^2}{\nu^2} \right) \\
& + \frac{2}{5} \sum_{[nk]} \left(D_n^0 + \frac{D_n^1}{\nu} + \frac{D_n^2}{\nu^2} \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_n} \\
& + \frac{\partial u_k}{\partial x_n} \left(D_n^0 + \frac{D_n^1}{\nu} + \frac{D_n^2}{\nu^2} \right) \\
& + \epsilon_{kmn} \left(D_m^0 + \frac{D_m^1}{\nu} + \frac{D_m^2}{\nu^2} \right) B_n = -\nu D_k^0 - D_k^1 - \frac{D_k^2}{\nu}
\end{aligned}$$

(4.89)

Agrupando os termos em potência¹⁴ de ν e considerando campos magnéticos de baixa intensidade $\frac{w_m}{\nu} \ll 1$,

$$\begin{aligned}
D_k^0 & = 0 \\
-D_k^1 & = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_n} \delta_{nj} \left(p \delta_{jk} + \frac{3}{2} p \delta_{jk} \right) + \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{5}{2} k T p \delta_{nk} \right) \\
& = \frac{5}{2} \left[-\frac{p}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{p^2}{\rho} \right) \right] \\
& = -\frac{5}{2} p \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{p}{\rho} \right) = -\frac{5}{2} p k \frac{\partial T}{\partial x_k}
\end{aligned}$$

(4.90)

Substituindo a Equação (4.90) na Equação (4.82),

$$q_k = -\frac{5}{2} \frac{p}{\nu} k \frac{\partial T}{\partial x_k} = -\lambda_0 \frac{\partial T}{\partial x_k} \quad \lambda_0 = \frac{5kp}{2\nu} = \frac{5kp}{2} \tau \quad (4.91)$$

4.6.2 Freqüência de colisão da mesma ordem de grandeza da freqüência de oscilação do plasma $w_c \sim \nu$

Os resultados obtidos na seção anterior foram obtidos no limite da não influência do campo magnético $\frac{w_m}{\nu} \ll 1$. Em outras palavras, quando a freqüência de giro de uma partícula livre submetida a um campo magnético externo, conhecida como freqüência de ciclotron, é muito menor do que a freqüência de colisão o campo magnético exerce apenas

¹⁴Onde $\sum_{[nk]}$ indica permutação e soma simétrica nos índices n e k , ou seja, $\sum_{nk} A_n \frac{B_k}{C_n} \equiv A_n \frac{B_k}{C_n} + A_k \frac{B_n}{C_n} + A_n \frac{B_n}{C_k}$

um efeito de força de corpo tanto a nível mesoscópico quanto a nível macroscópico, como veremos na seção seguinte. Nesta aproximação o efeito do campo magnético se limita a equação de balanço de quantidade de movimento. A medida que a frequência de ciclotron se aproxima da frequência de colisão $\frac{w_m}{\nu} \sim 1$ efeitos magnéticos começam a influenciar os coeficientes de viscosidade η_0 e condutividade térmica λ_0 [14]. Se pensarmos em uma partícula livre em um campo magnético constante, a frequência de ciclotron w_m definirá a frequência de oscilação das partículas carregadas em suas trajetórias circulares. Transpondo essa idéia para o nível molecular perceberemos que o campo magnético terá ação na deflexão das partículas durante suas trajetórias pelo livre caminho médio influenciando portanto os coeficientes de transporte. Quando $\frac{w_m}{\nu} \ll 1$ as partículas colidem entre si muitas vezes, antes de sofrerem a influência de um ciclo de ciclotron. Desta forma o efeito magnético sobre as partículas é percebido apenas através do termo de força de corpo na equação de Navier Stokes $\vec{u} \times \vec{B}$ e não influencia os coeficientes de transporte.

Considerando a Equação de transporte para o calor (4.69) sob a expansão, Equação (4.82), a Equação (4.89) no limite $\frac{w_c}{\nu} \sim 1^{15}$. Coletando os termos proporcionais a $\nu \sim w_c$ e fazendo $\vec{B} = b_0 \hat{e}_z$ com $w_c = b_0$

$$\begin{aligned} D_0 &= 0 \\ -D_k^1 &= -w_c (\vec{q} \times \hat{e}_z)_k + \frac{5}{2} p \left[\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{p}{\rho} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.92)$$

Substituindo a Equação (4.92) na Equação (4.82),

$$q_k = \frac{w_c}{\nu} (\vec{q} \times \hat{e}_z)_k - \lambda_0 \frac{\partial T}{\partial x_k} \quad \lambda_0 = \frac{5pk}{2\nu} \quad (4.93)$$

Explicitamente a condutividade térmica pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} q_x &= \frac{\lambda_0 \nu^2}{\nu^2 + w_c} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\lambda_0 \nu w_c}{\nu^2 + w_c} \frac{\partial T}{\partial y} = \lambda_{\perp} \frac{\partial T}{\partial x} + \lambda_H \frac{\partial T}{\partial y} \\ q_y &= -\frac{\lambda_0 \nu w_c}{\nu^2 + w_c} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\lambda_0 \nu^2}{\nu^2 + w_c} \frac{\partial T}{\partial y} = -\lambda_H \frac{\partial T}{\partial x} + \lambda_{\perp} \frac{\partial T}{\partial y} \\ q_z &= -\lambda_0 \frac{\partial T}{\partial z} \end{aligned}$$

E de forma matricial,

¹⁵Estamos denotando w_c como sendo a frequência de ciclotron

$$\begin{bmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_{\perp} & \lambda_H & 0 \\ -\lambda_H & \lambda_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial T / \partial x \\ \partial T / \partial y \\ \partial T / \partial z \end{bmatrix} \quad (4.94)$$

onde,

$$\lambda_{\perp} \equiv \frac{\lambda_0 \nu^2}{\nu^2 + w_c} \quad \lambda_H \equiv \frac{\lambda_0 \nu w_c}{\nu^2 + w_c} \quad (4.95)$$

Que pode ser entendido como um efeito similar ao efeito Hall eletrônico porém térmico. Em outras palavras o campo magnético provoca uma assimetria na condutividade térmica, transformando λ_0 em um tensor,

$$q_k = \lambda_{kj} (\vec{\nabla} T)_j \quad (4.96)$$

De forma que,

$$q_k = \lambda_{kj} (\vec{\nabla} T)_j \quad \xrightarrow[\nu \ll 1]{w_c} \quad q_k = \lambda_0 (\vec{\nabla} T)_k \quad (4.97)$$

que colabora com o entendimento de ser q_k o fluxo de energia não convectivo, pois neste caso teremos $q_k \neq 0$ em uma região de gradiente de temperatura nulo.

Considerando o mesmo processo de análise, levando em conta a Equação de transporte viscosa (4.67) sob a expansão, Equação (4.81) no limite $\frac{w_c}{\nu} \sim 1$, e agrupando termos da ordem de $w_c \sim \nu$,

$$\begin{aligned} Z_{lk}^0 &= 0 \\ -Z_{lk}^1 &= -M_{lk} + \frac{\partial u_l}{\partial x_j} p \delta_{jk} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} p \delta_{jl} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j p \delta_{lk}) + \frac{\partial}{\partial t} p \delta_{lk} \\ &= -M_{lk} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} p + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} p + \frac{\partial u_j}{\partial x_j} p \delta_{lk} + \underbrace{u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} \delta_{lk} + \frac{\partial p}{\partial t} \delta_{lk}}_{\frac{Dp}{Dt} \delta_{lk} = -\frac{5}{3} p \delta_{lk} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}} \\ &= -M_{lk} + p \left[\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} - \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \delta_{lk} \right] \end{aligned} \quad (4.98)$$

Substituindo a Equação (4.98) na Equação (4.81),

$$\begin{aligned}
P_{kj} &= \nu^{-1}M_{kj} - \frac{p}{\nu} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \delta_{kj} \right) \\
&= \nu^{-1}M_{kj} + \eta_0 f_{kj}
\end{aligned} \tag{4.99}$$

onde,

$$f_{kj} = \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \delta_{kj} \tag{4.100}$$

Utilizando a Equação (4.78),

$$\begin{aligned}
M_{xy} &= w_c (P_{yy} - P_{xx}) & M_{xx} &= -2w_c P_{xy} \\
M_{yy} &= -2w_c P_{xy} & M_{zz} &= 0 \\
M_{yz} &= -w_c P_{xz} & M_{xz} &= w_c P_{yz}
\end{aligned} \tag{4.101}$$

Substituindo a Equação (4.101) na Equação (4.99) podemos reescrever o tensor tensão como,

$$\begin{aligned}
P_{xz} - \nu^{-1}w_c P_{yz} &= \eta_0 f_{xz} & P_{yz} + \nu^{-1}w_c P_{xz} &= \eta_0 f_{yz} \\
P_{zz} &= \eta_0 f_{zz} & P_{xx} - \frac{2w_c}{\nu} P_{xy} &= \eta_0 f_{xx} \\
P_{xy} + \frac{w_c}{\nu} P_{xx} - \frac{w_c}{\nu} P_{yy} &= \eta_0 f_{xy} & 2\frac{w_c}{\nu} P_{xy} + P_{yy} &= \eta_0 f_{yy}
\end{aligned} \tag{4.102}$$

Usando a identidade $f_{xx} + f_{yy} = -f_{zz}$ podemos facilmente determinar P_{xx} , P_{xy} e P_{yy} através do sistema,

$$\begin{aligned}
P_{xx} - \frac{2w_c}{\nu} P_{xy} + 0P_{yy} &= \eta_0 f_{xx} \\
\frac{w_c}{\nu} P_{xx} + P_{xy} - \frac{w_c}{\nu} P_{yy} &= \eta_0 f_{xy} \\
0P_{xx} + \frac{2w_c}{\nu} P_{xy} + P_{yy} &= \eta_0 f_{yy} = -\eta_0 f_{xx} - \eta_0 f_{zz}
\end{aligned} \tag{4.103}$$

Que tem como solução,

$$\begin{aligned}
P_{xx} &= \frac{\eta_0 \left(f_{xx} + \frac{2w_c}{\nu} f_{xy} - 2 \left(\frac{w_c}{\nu} \right)^2 f_{zz} \right)}{1 - 4 \left(\frac{w_c}{\nu} \right)^2} \\
P_{xy} &= \frac{\eta_0 \left(f_{xy} - \frac{2w_c}{\nu} f_{xx} - \frac{w_c}{\nu} f_{zz} \right)}{1 - 4 \left(\frac{w_c}{\nu} \right)^2} \\
P_{yy} &= \frac{\eta_0 \left(f_{xx} + \frac{2w_c}{\nu} f_{xy} + \left(1 + 2 \left(\frac{w_c}{\nu} \right)^2 \right) f_{zz} \right)}{1 - 4 \left(\frac{w_c}{\nu} \right)^2}
\end{aligned} \tag{4.104}$$

A análise da influência do campo magnético sobre o tensor tensão é um pouco menos intuitiva do que a análise feita sobre a condutividade térmica. Para facilitar podemos ver a influência de \vec{B} sobre P_{jk} nos limites em que $\vec{B} \rightarrow 0$ e $\vec{B} \rightarrow \infty$.

Analisando a Equação (4.104) na situação onde $\vec{B} \rightarrow 0$ podemos concluir sobre a forma convencional do tensor tensão,

$$P_{jk} = \eta_0 f_{jk} \tag{4.105}$$

E na situação onde $\vec{B} \rightarrow \infty$ podemos concluir que,

$$\begin{aligned}
P_{xx} &= -\frac{1}{2} \eta_0 f_{xx} & P_{yy} &= -\frac{1}{2} \eta_0 f_{zz} \\
P_{xy} &= 0 & P_{zz} &= \eta_0 f_{zz}
\end{aligned} \tag{4.106}$$

O que torna P_{jk} levemente diferente para campos magnéticos intensos $w_c \gg \nu$

4.7 Cálculo dos coeficientes de transporte baseado em uma expansão assintótica de Chapman-Enskog

Nas seções anteriores com base em um processo de média da quantidade Q sobre a equação de Boltzmann pudemos escrever a Equação geral de transporte (4.46),

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q \rangle - \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \xi_i Q \rangle - \left\langle \xi_i \frac{\partial Q}{\partial x_i} \right\rangle - \left\langle F_i \frac{\partial Q}{\partial \xi_i} \right\rangle = \hat{I}(Q)$$

A partir desta equação é possível com a devida escolha da função Q construir qualquer equação de transporte macroscópica. Porém quantidades como o fluxo de calor q_k e o tensor tensão viscoso P_{jk} devem ser obtidas de forma fenomenológica como feita através da análise, Equação (4.81) e Equação (4.82). Nesta seção estaremos interessados na obtenção dos mesmos coeficientes q_k e P_{jk} com base nas hipóteses do equilíbrio termodinâmico local e de que a frequência de colisão ν seja suficientemente pequena para que o gás possa ser descrito pelo operador BGK. Assumiremos também, como feito durante todo o desenvolvimento até aqui, que a força externa F_j na equação de Boltzmann seja a força de Lorentz,

$$F_j = \left(\vec{E} + \vec{\xi} \times \vec{B} \right)_j \quad (4.107)$$

O **primeiro passo** no procedimento de Chapman-Enskog [6] se baseia essencialmente na hipótese do equilíbrio termodinâmico local, o que nos permite expandir f em série de potência $\epsilon \ll 1$,

$$f = f^{(0)} + \epsilon^1 f^1 + \epsilon^2 f^2 + \dots \quad (4.108)$$

e identificar o primeiro termo com a distribuição de equilíbrio de Maxwell Boltzmann. O equilíbrio termodinâmico local implica para os momentos,

$$\begin{aligned} \int f d\vec{\xi} &= \int f^{(0)} d\vec{\xi} = \rho \\ \int f \vec{\xi} d\vec{\xi} &= \int f^{(0)} \vec{\xi} d\vec{\xi} = \rho \vec{u} \\ \int f c^2 d\vec{c} &= \int f^{(0)} c^2 d\vec{c} = 2\rho e \\ p_{jk} &= \int f^{(0)} c_j c_k d\vec{c} = p \delta_{jk} \end{aligned} \quad (4.109)$$

O que implica,

$$\begin{aligned}
\int f^{(n)} d\vec{\xi} &= 0 \\
\int f^{(n)} \vec{\xi} d\vec{\xi} &= 0 & n > 0 \\
\int f^{(n)} c^2 d\vec{c} &= 0
\end{aligned}
\tag{4.110}$$

E os termos de não equilíbrio são identificados com as ordens superiores na expansão, Equação (4.108),

$$\begin{aligned}
q_k &= \sum_n \epsilon^n q_k^n = \frac{1}{2} \int f^{(n)} c^2 c_k d\vec{c} \\
p_{jk} &= \sum_n \epsilon^n \Pi_{jk}^n = \int f^{(n)} c_j c_k d\vec{c}
\end{aligned}
\tag{4.111}$$

O **segundo passo** consiste em relacionar os coeficientes de expansão ϵ^n com os tempos característicos de fenômenos físicos. Assim, de forma fenomenológica, podemos identificar dois tempos característicos,

$$\begin{aligned}
t_0 &= \epsilon^0 t = t \\
t_1 &= \epsilon^1 t = \epsilon t
\end{aligned}
\tag{4.112}$$

que são escalas associadas aos efeitos de pressão ϵ^0 e efeitos difusivos ϵ^1 .

Os termos da expansão, Equação (4.108) são conhecidos como número de Knudsen e possuem uma interpretação de escala na forma,

$$\epsilon \equiv \frac{\delta}{T_c} \equiv \frac{h}{L_c} \ll 1
\tag{4.113}$$

onde δ é o tempo na escala mesoscópica, h escala espacial mesoscópica, T_c tempo característico e L_c espaço característico.

Sabemos da fenomenologia que os tempos mesoscópicos δ e característico T_c se manifestam na escala macroscópica de forma independente sob efeitos dominados pela pressão termodinâmica p , termos viscosos P_{jk} e condução de calor q_k . Portanto as equações

macroscópicas devem levar em conta a independência nas escalas temporais de forma a podermos definir,

$$\frac{\partial}{\partial t} \equiv \epsilon^0 \frac{\partial}{\partial t_0} + \epsilon^1 \frac{\partial}{\partial t_1} = \frac{\partial}{\partial t_0} + \epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} \quad (4.114)$$

Ou partindo exclusivamente da relação, Equação (4.112),

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial t_0}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t_0} + \frac{\partial t_1}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t_1} = \frac{\partial}{\partial t_0} + \epsilon^1 \frac{\partial}{\partial t_1} \quad (4.115)$$

Substituindo a relação, Equação (4.108) nas equações macroscópicas, Equação (4.51), Equação (4.53) e Equação (4.64), e usando o operador BGK, Equação (4.27) o que implica $\hat{I}_k = \hat{I}_0 = 0$ ¹⁶,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) &= 0 \\ \rho \frac{D}{Dt} u_k &= \langle F_k \rangle - \frac{\partial p_{jk}}{\partial x_j} + \hat{I}_k \\ \rho^{\frac{5}{3}} \frac{D}{Dt} (p \rho^{-\frac{5}{3}}) &= \frac{2}{3} \left[\hat{I}_0 - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - P_{jk} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) \right] \end{aligned}$$

Substituindo agora a Equação (4.114), separando os termos por ordem em ϵ^n e usando a Equação(4.42), obteremos o conjunto de equações,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t_0} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) &= 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial t_n} &= 0 \quad n > 0 \\ \rho \frac{\partial u_k}{\partial t_0} + u_j \frac{\partial u_k}{\partial x_j} &= \langle F_k \rangle - \frac{\partial p_{jk}^0}{\partial x_j} \\ \rho \frac{\partial u_k}{\partial t_n} + \frac{\partial p_{jk}^n}{\partial x_j} &= 0 \quad n > 0 \\ \rho^{\frac{5}{3}} \frac{\partial}{\partial t_0} (p \rho^{-\frac{5}{3}}) + \rho^{\frac{5}{3}} u_j \frac{\partial}{\partial x_j} (p \rho^{-\frac{5}{3}}) &= \frac{2}{3} p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \\ \rho^{\frac{5}{3}} \frac{\partial}{\partial t_n} (p \rho^{-\frac{5}{3}}) &= -\frac{2}{3} \left(\frac{\partial q_j^n}{\partial x_j} + p_{jk}^n \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) \quad n > 0 \end{aligned} \quad (4.116)$$

¹⁶Ver resultados (4.52), (4.55) e (4.56)

As equações de ordem ϵ^0 ou $n = 0$ são as equações de conservação da massa, Euler e de energia não convectiva. Efeitos viscosos serão percebidos em potências de ϵ^n para $n > 0$. Para recuperar as equações viscosas convencionais precisamos da ordem $n = 1$. Para isso precisamos da relação $f^{(1)} = f^{(1)}(f^{(0)})$. O **terceiro passo** no procedimento de Chapman-Enskog é adimensionalizar a equação Boltzmann dividi-la em ordens ϵ^n e obter a relação $f^{(1)} = f^{(1)}(f^{(0)})$

Partindo da equação de Boltzmann,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}} = \Omega[f] \quad (4.117)$$

Para adimensionalizar a Equação (4.117) devemos ter em mente que os termos envolvidos na força de Lorentz $F_j = (\vec{E} + \vec{\xi} \times \vec{B})_j$ estão na escala macroscópica, pois \vec{B} e \vec{E} são macroscópicos e $\vec{\xi}$ no termo de força é proporcional à densidade de corrente \vec{J} , o que nos leva a concluir que $[F_j] = \frac{Kg}{s^2}$, onde $[*]$ indica unidade.

Desta forma a adimensionalização dos termos fica:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^*}{\partial x} &= L_c \frac{\partial}{\partial x} & \vec{F}^* &= \frac{T_c^2}{L_c} \vec{F} \\ \frac{\partial^*}{\partial t} &= T_c \frac{\partial}{\partial t} & \frac{\partial^*}{\partial \vec{\xi}} &= \frac{h}{\delta} \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} \\ \vec{\xi}^* &= \frac{\delta}{h} \vec{\xi} & \Omega^* &= \delta \Omega \end{aligned} \quad (4.118)$$

E a Equação de Boltzmann (4.117) pode ser escrita,

$$\frac{1}{T_c} \frac{\partial^* f}{\partial t} + \frac{h}{\delta} \frac{1}{L_c} \vec{\xi}^* \cdot \frac{\partial^* f}{\partial \vec{x}} + \frac{L_c}{T_c^2} \frac{\delta}{h} \vec{F}^* \cdot \frac{\partial^* f}{\partial \vec{\xi}} = \frac{1}{\delta} \Omega^*[f] \quad (4.119)$$

Multiplicando por δ a Equação (4.119), substituindo a Equação (4.113) na Equação (4.119) e suprimindo os índices $*$ para simplificar a notação, obteremos a equação de Boltzmann adimensionalizada,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}} = \frac{1}{\epsilon} \Omega[f] \quad (4.120)$$

Agora de posse da equação adimensionalizada, podemos de forma coerente, usar as relações, Equação (4.108) e Equação (4.114) separando a equação de Boltzmann em ordens de ϵ^n . No entanto precisamos primeiro saber como será a expansão em $\Omega[f]$ em função da expansão Equação (4.108) e a escolha do operador BGK. Substituindo a Equação (4.108) em $\Omega[f]$,

$$\Omega[f] \equiv \hat{J}[f|f] = \int (f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \quad (4.121)$$

Ou seja,

$$\begin{aligned} \Omega \left[\sum_j \epsilon^j f^j \right] &= \hat{J} \left(\sum_m \epsilon^n f^m \middle| \sum_n \epsilon^n f^{(n)} \right) \\ &= \int \left(\sum_n \epsilon^n f'_1 f'^{(n)} \sum_m \epsilon^m f'^{(m)} - \sum_n \epsilon^n f_1 f^{(n)} \sum_m \epsilon^m f^{(m)} \right) g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \\ &= \sum_{nm} \epsilon^{n+m} \int (f_1'^{(n)} f'^{(m)} - f_1^{(n)} f^{(m)}) g b db d\epsilon d\vec{\xi}_1 \\ &= \sum_{nm} \epsilon^{n+m} \hat{J} (f^{(n)} | f^m) \\ &= \epsilon^0 \hat{J} (f^{(0)} | f^{(0)}) \\ &+ \epsilon^1 [\hat{J} (f^{(0)} | f^{(0)}) + \hat{J} (f^{(0)} | f^{(1)}) + \hat{J} (f^{(1)} | f^{(0)})] \\ &+ \epsilon^2 [\hat{J} (f^{(0)} | f^{(0)}) + \hat{J} (f^{(0)} | f^{(1)}) + \hat{J} (f^{(0)} | f^{(2)}) + \hat{J} (f^{(1)} | f^{(0)}) + \hat{J} (f^{(2)} | f^{(0)})] \\ &= \sum_s \epsilon^s \hat{J}^s (f^{(0)}, f^{(1)}, \dots, f^{(s)}) \end{aligned}$$

de maneira que,

$$\Omega[f] = \sum_n \epsilon^n \hat{J}^s (f^{(0)}, f^{(1)}, \dots, f^{(n)}) \quad (4.122)$$

onde,

$$\hat{J}^n (f^{(0)}, f^{(1)}, \dots, f^{(n)}) = \sum_{jk} \hat{J} (f^{(j)} | f^{(k)}) \quad j + k \leq n \quad (4.123)$$

De forma que,

$$\begin{aligned}
\hat{J}^0 &= \hat{J}(f^{(0)}|f^{(0)}) = 0 \\
\hat{J}^1 &= \hat{J}(f^{(0)}|f^{(1)}) + \hat{J}(f^{(0)}|f^{(1)}) \\
\hat{J}^2 &= \hat{J}(f^{(0)}|f^{(1)}) + \hat{J}(f^{(0)}|f^{(2)}) + \hat{J}(f^{(1)}|f^{(0)}) + \hat{J}(f^{(2)}|f^{(0)}) \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{4.124}$$

Substituindo o operador BGK, Equação (4.27), na Equação (4.122),

$$\begin{aligned}
-\nu(f - f^{(0)}) &= \sum_n \epsilon^n J^n(f^{(0)}, f^{(1)}, \dots, f^{(n)}) \\
-\nu(f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} - f^{(0)}) &= J^{(0)}(f^{(0)}) + \epsilon J^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) + \epsilon^2 J^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)})
\end{aligned}$$

O que nos permite concluir,

$$\begin{aligned}
J^{(0)} &= 0 \\
J^{(1)} &= -\nu f^{(1)} \\
J^{(2)} &= -\nu f^{(2)}
\end{aligned} \tag{4.125}$$

Finalmente substituindo a Equação (4.125), Equação (4.108) e equação (4.114) na Equação (4.120), e separando em ordens de ϵ^n conseguimos,

$$\begin{aligned}
J^{(0)}(f^{(0)}) &= 0 \\
J^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) &= \frac{\partial f^{(0)}}{\partial t_0} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{x}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{\xi}} \\
J^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) &= \frac{\partial f^{(0)}}{\partial t_0} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \vec{x}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \vec{\xi}} + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial t_1} \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Nos resta agora calcular,

$$f^{(1)} = \tau \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + \xi_j \frac{\partial}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right) f^{(0)} \tag{4.126}$$

Para facilitar o cálculo da Equação (4.126), e fazendo $m = 1$ vamos definir,

$$f^{(0)} = \frac{\rho}{(2\pi kT)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(\xi-\bar{u})^2}{2kT}} = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta c^2} \quad \beta = \frac{1}{2kT} \quad (4.127)$$

E a Equação (4.126) fica,

$$\begin{aligned} f^{(1)} &= \tau \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t_0} + \xi_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial \rho}{\partial \xi_j} \right) \\ &+ \tau \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \beta} \left(\frac{\partial \beta}{\partial t_0} + \xi_j \frac{\partial \beta}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial \beta}{\partial \xi_j} \right) \\ &+ \tau \frac{\partial f^{(0)}}{\partial c_k} \left(\frac{\partial c_k}{\partial t_0} + \xi_j \frac{\partial c_k}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial c_k}{\partial \xi_j} \right) \end{aligned} \quad (4.128)$$

Calculando separadamente cada uma das derivadas em $f^{(0)}$,

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \rho} = \frac{1}{\rho} \quad \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \beta} = f^{(0)} \left(\frac{3}{2} \beta^{-1} - c^2 \right) \quad \frac{\partial f^{(0)}}{\partial c_j} = -2\beta c_j f^{(0)} \quad (4.129)$$

Usando a relação $c_j = \xi_j - u_j$ podemos reescrever a Equação (4.128) como,

$$\begin{aligned} f^{(1)} &= \tau \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \rho} \left(\frac{D}{Dt_0} + c_j \frac{\partial}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right) \rho \\ &+ \tau \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \beta} \left(\frac{D}{Dt_0} + c_j \frac{\partial}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right) \beta \\ &+ \tau \frac{\partial f^{(0)}}{\partial c_k} \left(\frac{D}{Dt_0} + c_j \frac{\partial}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right) c_k \end{aligned} \quad (4.130)$$

Calculando separadamente cada um dos operadores entre parênteses na Equação (4.130),

$$\begin{aligned} \left(\frac{D}{Dt_0} + c_j \frac{\partial}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right) \rho &= -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + c_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \\ \left(\frac{D}{Dt_0} + c_j \frac{\partial}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right) \beta &= \frac{\beta}{T} \left(\frac{2}{3} T \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + c_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \\ \left(\frac{D}{Dt_0} + c_j \frac{\partial}{\partial x_j} + F_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right) c_k &= \frac{1}{\rho} \delta_{kj} \frac{\partial p}{\partial x_j} + \left(F_k - \frac{1}{\rho} \langle F_k \rangle \right) - c_j \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \end{aligned}$$

$$(4.131)$$

Substituindo os resultados, Equação (4.131) e Equação (4.129) na Equação (4.130),

$$\begin{aligned} -\nu \frac{f^1}{f^{(0)}} = & \frac{1}{\rho} \left(-\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + c_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) + \frac{\beta}{T} \left(\frac{3}{2} \beta^{-1} - c^2 \right) \left(\frac{2}{3} T \vec{\nabla} \cdot \vec{u} - c_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \\ & - 2\beta c_n \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_n} + \left(F_n - \frac{1}{\rho} \langle F_n \rangle \right) - c_k \frac{\partial u_n}{\partial x_k} \right] \end{aligned} \quad (4.132)$$

Tendo em mente que $F_n = (\vec{E} + \vec{\xi} \times \vec{B})_n$ e usando $\vec{c} = \vec{\xi} - \vec{u}$ podemos concluir que,

$$c_n \left(F_n - \frac{1}{\rho} \langle F_n \rangle \right) = 0 \quad (4.133)$$

Utilizando a Equação (4.133) e trabalhando um pouco os termos da Equação (4.132),

$$f^{(1)} = -\tau \left[\frac{1}{kT} \left(c_j c_k - \frac{c^2}{3} \delta_{jk} \right) \frac{\partial u_j}{\partial x_k} - \left(\frac{1}{2kT} c^2 - \frac{5}{2} \right) \frac{c_j}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] \quad (4.134)$$

De posse da relação, Equação (4.134) podemos calcular as quantidades,

$$\begin{aligned} p_{jk}^1 &= \int f^{(1)} c_j c_k d\vec{c} \\ q_k^1 &= \frac{1}{2} \int f^{(1)} c^2 c_k d\vec{c} \end{aligned} \quad (4.135)$$

E as integrais a serem determinadas são,

$$\begin{aligned} \int f^{(0)} c_m c_j c_k c_n d\vec{c} &= kT p (\delta_{mj} \delta_{nk} + \delta_{km} \delta_{nj} + \delta_{kj} \delta_{nm}) \\ \int f^{(0)} c^2 c_j c_k d\vec{c} &= 5kT p \delta_{jk} \\ \int f^{(0)} c_n c_k c_j d\vec{c} &= 0 \end{aligned} \quad (4.136)$$

Usando a Equação (4.136) podemos calcular as quantidades q_k^1 e p_{jk}^1 ,

$$\begin{aligned}
p_{jk}^1 &= \nu \left(\frac{2}{3} \delta_{jk} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) & \nu &= \tau p \\
q_k^1 &= -\tau \frac{5}{2} k p \frac{\partial T}{\partial x_k} = -\lambda_0 \frac{\partial T}{\partial x_k} & \lambda_0 &= \tau \frac{5}{2} k p
\end{aligned} \tag{4.137}$$

E o conjunto de equações macroscópicas, equações (4.116) para $n = 1$ ficam determinadas.

É interessante notar neste ponto, que a introdução do campo magnético via força de Lorentz no termo de força externa \vec{F} na equação de Boltzmann não contribui com termos extras na equação da energia e introduz um termo de força de corpo $\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}$ na equação de Navier Stokes. O não aparecimento de termos extras na equação da energia está coerente com a aproximação de um fluido assumida para o plasma, pois a força de campo externa \vec{B} deflete as partículas na direção perpendicular a aplicação do campo \vec{B} de forma a não contribuir com a geração de trabalho. O termo de trabalho, ou melhor, de potência, na equação da energia será percebido na construção de um modelo de dois fluidos, e estará ligado a transferência de energia cinética ¹⁷ dos constituintes eletrônicos para os constituintes iônicos.

¹⁷A transferência de energia cinética dos constituintes eletrônicos para os constituintes iônicos é a que domina o processo de efeito Joule. Isto está ligado à mobilidade que os constituintes eletrônicos têm em relação aos iônicos, portanto estes respondem mais rapidamente à aplicação de um campo elétrico externo convertendo energia de campo em energia interna, gerando efeito Joule.

5 *Discretização da equação de Boltzmann*

Como nosso foco são modelos computacionais, precisamos de uma versão discreta para a equação de Boltzmann. Para motivar a forma com que iremos fazer a discretização faremos uso da Hipótese do Equilíbrio Termodinâmico Local - HETL. Segundo a HETL o fluido ou o gás em questão constituído por N partículas definidas sobre o espaço de fase μ com $6N$ coordenadas $(N\vec{x})$, $(N\vec{\xi})$ e t independentes pode ser aproximado em cada ponto por uma sucessão de estados de equilíbrio. Por estado de equilíbrio termodinâmico local entendemos um ponto do espaço de fase μ que possua representação em termos da função distribuição de equilíbrio de Maxwell Boltzmann $f^{eq}(\vec{\xi})$,

$$f^{eq}(\vec{\xi}) = \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{D}{2}} \exp \left(- \frac{(\vec{\xi} - \vec{u})^2}{(2kT)/m} \right) \quad (5.1)$$

portanto cada ponto do espaço μ poderá ser aproximado por uma sucessão de estados de equilíbrio $f^{eq}(\vec{\xi})$ onde macroscopicamente o estado de equilíbrio termodinâmico local será definido pelo conjunto de estados macroscópicos $\rho = \rho(\vec{x}, t)$, $\vec{u} = \vec{u}(\vec{x}, t)$ e $T = T(\vec{x}, t)$ com uma distribuição f^{eq} fixa nas velocidades microscópicas $\vec{\xi}$ para todo ponto do espaço \vec{x} e t . Neste sentido um sistema fora do equilíbrio pode ser representado por uma sucessão de estados perturbados em torno do equilíbrio termodinâmico local como,

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = f^{eq}(\vec{\xi}) + \phi \quad (5.2)$$

onde

$$\frac{\phi}{f^{eq}} \ll 1 \quad (5.3)$$

A função ϕ é entendida como uma pequena perturbação em torno do equilíbrio termodinâmico local f^{eq} com a mesma distribuição de velocidades microscópicas $\vec{\xi}$ porém

com pequenas variações nas quantidades macroscópicas ρ , \vec{u} e \vec{T} . Este tipo de idealização nos sugere a fixação de um conjunto discreto de velocidades microscópicas $\vec{\xi}$ para todos os pontos do espaço, com as quantidades macroscópicas ρ , \vec{u} e \vec{T} variando suavemente no espaço e no tempo. Para termos acesso a todos os estados de equilíbrio precisamos viajar ponto a ponto no espaço. Isto sugere uma discretização espaço-temporal parametrizada $\vec{x} = \vec{x}(t)$ em conjunto com a discretização nas velocidades $\vec{\xi} \rightarrow \vec{\xi}_i$, de forma que a parte espaço-temporal fica,

$$\begin{aligned} t &\rightarrow t + \delta \\ \vec{x} &\rightarrow \vec{x} + \delta\vec{\xi} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Este tipo de procedimento caracteriza a chamada etapa de propagação. Nesta etapa do processo de discretização, a equação de Boltzmann assumirá a forma,

$$f(\vec{x}, t) - f(\vec{x} + \delta\vec{\xi}, t + \delta) - \Omega(\vec{\xi}) \quad (5.5)$$

que relaciona pontos distintos do espaço para parâmetros discretos de tempo δ .

A chamada etapa de colisão será caracterizada pelo processo de discretização das velocidades $\vec{\xi} \rightarrow \vec{\xi}_i$, onde i indica direção espacial. O número de velocidades discretas será dada pelo conjunto $(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \dots, \vec{\xi}_n)$

Para a versão espaço-temporal discreta da equação de Boltzmann (5.5) não nos preocuparemos com o conjunto discreto de velocidades $\vec{\xi}_i$, e para efeito de cálculo manteremos as velocidades $\vec{\xi}$ no contínuo e fixas, carregando o termo de força explícito,

$$\frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}} \quad (5.6)$$

como um parâmetro fixo na equação discreta. Este termo será tratado no processo de discretização das velocidades $\vec{\xi}$.

Do ponto de vista físico, vale lembrar que a parametrização da variável $\vec{x} = \vec{x}(t)$ evidencia vínculos impostos pelo sistema físico sobre as N partículas e em nenhum momento fere a independência entre as variáveis \vec{x} , $\vec{\xi}$ e t requerida na construção do espaço de fase e na construção da equação de Boltzmann. Portanto uma discretização espaço temporal em conjunto com a discretização de velocidades possibilitará o acesso a todos os estados de equilíbrio termodinâmico segundo um esquema de propagação e colisão. Variações

abruptas nas quantidades macroscópicas $\rho(\vec{x}, t)$, $\vec{u}(\vec{x}, t)$ e $T(\vec{x}, t)$ ferem a HETL tornando o modelo impraticável para fortes gradientes nas quantidades citadas. Este tipo de problema poderá ser vencido pelo refinamento da malha entre pontos de forte gradiente.

5.1 Discretização espaço-temporal da equação de Boltzmann

Nesta etapa do processo de discretização estamos interessados em saber quais os valores assumidos por uma função distribuição propagada $f(\vec{x} + \delta\vec{\xi}, t + \delta)$ a partir de uma função $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ conhecida, ou seja,

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \rightarrow f(\vec{x} + \delta\vec{\xi}, t + \delta) \quad (5.7)$$

Tendo como base a equação de transporte de Boltzmann,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}} = \Omega, \quad (5.8)$$

absorvendo o termo de força $\frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}}$ no operador de colisão,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = \Omega \quad (5.9)$$

onde para o operador BGK

$$\Omega = -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq}) - \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}} \quad (5.10)$$

Fazendo uma expansão em série de Taylor [15] [16] com erro da ordem de $O(\delta^2)$ em torno da origem na função distribuição de velocidades $f(\vec{x}, t)$,

$$f(\delta) - f = \delta \left(\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} f + \frac{\partial f}{\partial t} \right) + O(\delta^2) \quad (5.11)$$

Substituindo a Equação (5.1) na Equação (5.11),

$$f(\delta) - f = \delta\Omega + O(\delta^2) \quad (5.12)$$

que é conhecida como equação explícita com erro da ordem $O(\delta^2)$.

Se levarmos a ordem da expansão para $O(\delta^3)$ encontraremos outra forma discreta conhecida como equação implícita. Detalhes dos cálculos da expansão para $O(\delta^3)$ em Taylor e uma maneira alternativa de discretizar a equação de Boltzmann, podem ser encontradas no apêndice *D*

O desenvolvimentos dos modelos discretos estarão sob o ponto de vista da Equação explícita (5.12), porém as formas deduzidas no apêndice *D* são igualmente aplicáveis.

5.2 Projeção da função distribuição f no espaço de Hilbert

Quando construímos a equação de Boltzmann usamos argumentos puramente físicos, definindo uma função f sobre o espaço de fase μ de coordenadas \vec{x} , $\vec{\xi}$ e t , onde $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ era a função distribuição de partículas que nos dava a informação da probabilidade de encontrar partículas em um certo estado de velocidade $\vec{\xi}$, em um certo ponto \vec{x} para cada instante de tempo t . Construímos assim a equação de transporte de Boltzmann como uma equação de fluxo de estados no espaço de fase,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_\xi f = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^b (f'_1 f' - f_1 f) g b d\epsilon d\xi_1 \quad (5.13)$$

relacionando a variação das coordenadas \vec{x} , $\vec{\xi}$ e t , lado esquerdo da Equação (5.13), com o fluxo de estados no espaço de fase, proveniente da mudança de estado das partículas devido a colisões, lado direito da Equação (5.13). Desta maneira através de um processo de média feito sobre a equação de Boltzmann pudemos relacionar a evolução das quantidades macroscópicas ρ , $\rho\vec{u}$ e ρe à evolução dos fluxos de estado no espaço μ

Neste sentido a equação de transporte (5.13) nos dá toda a informação termodinâmica do sistema macroscópico de N partículas. Posto o modelo físico, nos restaria resolver a Equação (5.13) e obter toda e qualquer informação termo-hidrodinâmica do sistema avaliado. O problema de fazer isso no espaço de fase, é lidar com uma equação de natureza integro diferencial não linear. A única solução completa que se conhece para a Equação (5.13) é a solução de equilíbrio de Maxwell Boltzmann (4.19). Mais uma vez devemos recorrer à física e através das propriedades da função f propormos aproximações que nos levem à solução da equação de transporte sem comprometer a informação termo-hidrodinâmica a ser extraída do sistema de N partículas.

Sabemos que a conexão entre os estados mesoscópicos e macroscópicos são feitas

através dos processos de média,

$$\begin{aligned}
 \rho(\vec{x}, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^3\xi \\
 \rho\vec{u}(\vec{x}, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{\xi} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^3\xi \\
 \rho e(\vec{x}, t) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{\xi} - \vec{u}|^2 f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^3\xi
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

Para que as integrais (5.14) façam sentido, a função f deve decair mais rapidamente no infinito que qualquer potência dos momentos,

$$\xi^n = \xi_{i_1, i_2, \dots, i_n} = \xi_{i_1} \xi_{i_2} \cdots \xi_{i_n} \tag{5.15}$$

de forma que,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^n f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^3\xi < \infty \tag{5.16}$$

A propriedade (5.16) nos garante a não divergência das integrais (5.14) o que é coerente com a física. Se pensarmos na possibilidade da função f convergir com uma combinação das enésimas potências de ξ , podemos entender as integrais (5.14) como uma projeção de f na base polinomial ξ^n e os momentos hidrodinâmicos ρ , $\rho\vec{u}$ e ρe coincidirão com os coeficientes da expansão.

Estas propriedades [8]¹ coincidem com as propriedades de funções definidas sobre o espaço de Hilbert, que é um espaço vetorial normado de dimensão infinita com decaimento no infinito. As funções da física matemática, harmônicos esféricos, polinômios de Legendre, polinômios de Hermite, polinômios de Laguerre podem ser vistas como base para o espaço de funções de Hilbert. Os polinômios de Hermite são funções definidas neste espaço e gozam das propriedades acima. Seus coeficientes de expansão coincidem com os momentos hidrodinâmicos, portanto são base conveniente para tratarmos a função distribuição f . Outras bases sobre o espaço de Hilbert que possuem as propriedades citadas acima com coeficientes de expansão coincidindo com os momentos hidrodinâmicos podem também ser encontradas [6]². Conforme [6] podemos colocar aqui, entre outras possibilidades, duas formas de expansão para a função f ,

¹Para uma explanação completa sobre funções definidas sobre o espaço de Hilbert, ver capítulo 5 página 212 da referência citada.

²Página 224 da referência citada.

$$\begin{aligned}
f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) &= \sum_{n,l,m} \frac{n!}{\Gamma(n+l+(3/2))} a_{nlm}(\vec{x}, t) e^{-\vec{\xi}} S_{l+(1/2)}^{(n)} \xi^2 \xi^l Y_l^m(\theta, \phi) \\
f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) &= \sum_n \frac{1}{n!} a_j^n(\vec{x}, t) w(\vec{\xi}) \mathcal{H}_j^{(n)}(\vec{\xi})
\end{aligned} \tag{5.17}$$

onde $S_{l+(1/2)}^{(n)}$ são os polinômios de Sonie, $Y_l^m(\theta, \phi)$ os harmônicos esféricos, $H_j^{(n)}(\vec{\xi})$ os polinômios de Hermite e Γ a função gama. Os fatores $a_{nlm}(\vec{x}, t)$ e $a_j^n(\vec{x}, t)$ são os coeficientes da expansão.

Podemos dizer que a expansão em polinômios de Hermite $\mathcal{H}(\xi)$ é conveniente quando desejamos colocar as velocidades microscópicas em uma base com simetria cartesiana, e os polinômios de Sonie $S(\xi^2)Y(\theta, \phi)$ quando desejamos colocar as velocidades microscópicas em uma base com simetria esférica. Esta conveniência pode ser sugerida pela escolha do potencial intermolecular considerada no operador de colisão Ω .

Os modelos considerados aqui são baseados no fluxo de estados no espaço de fase que evoluem por colisões binárias de esferas rígidas, portanto os polinômios de Hermite são base conveniente para descrevermos a função f .

Desta maneira, seja $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ a função distribuição assumindo uma expansão em termos de polinômios tensoriais ³ de Hermite,

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = w(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) \tag{5.18}$$

Usando o resultado (E.14) podemos concluir,

$$a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) d^3\xi \tag{5.19}$$

Substituindo (E.17) em (5.19) podemos calcular cada ordem dos coeficientes de expansão $a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t)$,

$$\begin{aligned}
a^{(0)} &= \rho \\
a_{\alpha}^{(1)} &= \rho u_{\alpha} \\
a_{\alpha\beta}^{(2)} &= S_{\alpha\beta} - \rho \delta_{\alpha\beta}
\end{aligned}$$

³Ver apêndice E

$$a_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} = S_{\alpha\beta\gamma} - \rho u_\alpha \delta_{\beta\gamma} - \rho u_\beta \delta_{\alpha\gamma} - \rho u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \quad (5.20)$$

Onde $S_{\alpha\beta\dots}$ são os momentos de não equilíbrio,

$$S_{\alpha\beta\dots} = \int_{-\infty}^{+\infty} f \xi_\alpha \xi_\beta \cdots d^3 \xi \quad (5.21)$$

Escrevendo convenientemente a distribuição Maxwelliana,

$$f^{(0)} = \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{D/2}} \exp^{-\frac{1}{2\theta}(\vec{\xi}-\vec{u})^2} \quad (5.22)$$

onde

$$\begin{aligned} \theta &= kT \\ p &= \frac{2}{D}\rho e = \rho kT = \rho\theta \end{aligned} \quad (5.23)$$

e D é o número de graus de liberdade dos constituintes do gás.

Podemos calcular os coeficientes de equilíbrio,

$$a_{0\ i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^{(0)}(\xi) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) d^3 \xi \quad (5.24)$$

São eles,

$$\begin{aligned} a_0^{(0)} &= \rho \\ a_{0\ \alpha}^{(1)} &= \rho u_\alpha \\ a_{0\ \alpha\beta}^{(2)} &= \rho u_\alpha u_\beta + \rho(\theta - 1)\delta_{\alpha\beta} \\ a_{0\ \alpha\beta\gamma}^{(3)} &= \rho u_\alpha u_\beta u_\gamma + \rho(\theta - 1)u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + \rho(\theta - 1)u_\gamma \delta_{\alpha\beta} + \rho(\theta - 1)u_\beta \delta_{\gamma\alpha} \end{aligned}$$

Usando a relação (5.18) e (E.17), podemos expandir a distribuição Maxwelliana para qualquer ordem n ,

$$f^{(0)}(\vec{\xi}) = w(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{0\ i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) \quad (5.25)$$

E para um modelo de terceira ordem ($n = 0, \dots, 3$) teremos,

$$\begin{aligned}
f^{(0)}(\vec{\xi}) &= w(\xi)\rho[\underbrace{1}_{0^a \text{ ordem}} + \underbrace{\vec{\xi} \cdot \vec{u}}_{1^a \text{ ordem}} + \underbrace{\frac{1}{2}[(\vec{\xi} \cdot \vec{u})^2 - u^2 + (\theta - 1)(\xi^2 - D)]}_{2^a \text{ ordem}} \\
&\quad + \underbrace{\frac{\vec{\xi} \cdot \vec{u}}{6}[(\vec{\xi} \cdot \vec{u})^2 - 3u^2 + 3(\theta - 1)(\xi^2 - D - 2)]}_{3^a \text{ ordem}}] \quad (5.26)
\end{aligned}$$

Na seção 7.2 veremos como discretizar a base polinomial de Hermite mantendo os momentos Maxwellianos inalterados.

5.3 Tratamento do termo de força $F_\alpha \partial_{\xi_\alpha} f$

De posse dos resultados [3] obtidos na última seção, estamos em condições de avaliar o termo de força $F_\alpha \partial_{\xi_\alpha} f$ da equação de Boltzmann expandindo f em polinômios tensoriais de Hermite. Com base na expansão (5.18), (5.25) e nas definições (E.15), (E.16), podemos calcular explicitamente o termo $\partial_\xi f$,

$$\begin{aligned}
\partial_\xi f &= \partial_\xi \left(w(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) \right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t) \partial_\xi \left(w(\xi) \frac{(-1)^n}{w(\xi)} \partial_{\xi_{i_1, i_2, \dots, i_n}}^{(n)} w(\xi) \right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t) \partial_{\xi_{i_1, i_2, \dots, i_n, i_{(n+1)}}}^{(n+1)} w(\xi) \\
&= -w(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t)}{n!} \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n, i_{n+1}}^{(n+1)}(\xi) \quad (5.27)
\end{aligned}$$

Reescalando o índice n ,

$$n + 1 \rightarrow n \quad n = 1, \dots, \infty \quad (5.28)$$

e a Equação (5.27) fica,

$$\partial_\xi f = -w(\xi) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{n!} a_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}}^{(n-1)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}, i_n}^{(n)}(\xi) \quad (5.29)$$

Finalmente podemos concluir sobre o produto escalar $-\vec{F} \cdot \vec{\nabla} f$,

$$-\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_\xi f = -w(\xi) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{n!} F_i a_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}}^{(n-1)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}, i_n}^{(n)}(\xi) \quad (5.30)$$

Sabemos pelos resultados expostos na seção 4.8 que na expansão de Chapman Enskog apenas o termo de ordem zero em f para o termo de força $-\vec{F} \cdot \vec{\nabla} f$ é que contribui para a recuperação dos termos de acoplamento corretos. Neste sentido a forma que nos interessa para a Equação (5.30) é,

$$-\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_\xi f^{(0)} = -w(\xi) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{n!} F_i a_{0 i_1, i_2, \dots, i_{n-1}}^{(n-1)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}, i_n}^{(n)}(\xi) \quad (5.31)$$

Nas seções seguintes estaremos considerando modelos até quarta ordem, pois estaremos interessados na preservação dos momentos Maxwellianos de quarta ordem. Portanto vamos expandir a função $f^{(0)}$ da Equação (5.31) até quarta ordem e assim calcularmos os termos relativos à contribuição da Equação (5.31). Em quarta ordem a Equação (5.31) para a força de Lorentz $F_i = \epsilon_{imn} \xi_m b_n$ fica,

$$\begin{aligned} -\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_\xi f^{(0)} &= -w(\xi) \sum_{n=1}^4 \frac{n}{n!} F_i a_{0 i_1, i_2, \dots, i_{n-1}}^{(n-1)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}, i_n}^{(n)}(\xi) \\ &= -w(\xi) \left[F_i a^{(0)} \mathcal{H}_i^{(1)} + F_i a_{0 j}^{(1)} \mathcal{H}_{ji}^{(2)} + \frac{1}{2} F_i a_{0 jk}^{(2)} \mathcal{H}_{jki}^{(3)} + \frac{1}{6} F_i a_{0 jkl}^{(3)} \mathcal{H}_{jkli}^{(4)} \right] \\ &= -w(\xi) \rho \epsilon_{imn} \xi_m b_n u_i \left[1 + \vec{u} \cdot \vec{\xi} + \frac{1}{2} \left(u^2 - (\vec{u} \cdot \vec{\xi})^2 - \theta \xi^2 + \frac{15}{3} \theta \right) \right] \end{aligned} \quad (5.32)$$

Por conveniência poderemos absorver o termo (5.32) na distribuição de equilíbrio do modelo BGK.

5.4 Discretização do espaço de velocidades

Como desenvolvido até aqui, nosso modelo cinético consiste, em uma primeira aproximação, no tratamento do operador de colisão integro não linear pelo operador de colisão BGK,

$$\Omega[f] = -\frac{1}{\tau} (f - f^{(0)}) \quad (5.33)$$

Lembrando da discretização temporal, adicionamos ao operador de colisão o termo de força $F_\alpha \partial_{\xi_\alpha} f$. Portanto até o momento possuímos um modelo temporalmente discreto na forma,

$$f(\delta) - f = \delta\Omega = \delta \left(-\frac{1}{\tau} (f - f^{(0)}) - F_\alpha \partial_{\xi_\alpha} f \right) \quad (5.34)$$

Conforme discussão e resultados da seção 6.2.5 para recuperarmos os termos corretos de acoplamento, nos interessa apenas a ordem zero na expansão de Chapman Enskog da função f no termo de força $F_\alpha \partial_{\xi_\alpha} f$, e nosso modelo discreto (5.34) pode ser reescrito como,

$$f(\delta) - f = \delta\Omega = \delta \left(-\frac{1}{\tau} (f - f^{(0)}) - F_\alpha \partial_{\xi_\alpha} f^{(0)} \right) \quad (5.35)$$

Para completarmos o processo de discretização, e baseado no trabalho de Philippi e colaboradores [2], precisamos discretizar o espaço de velocidades $\vec{\xi}$, o que possibilitará encontrar uma forma discreta para o termo de força $F_\alpha \partial_{\xi_\alpha} f^{(0)}$ e para a distribuição Maxwelliana $f^{(0)}$.

Usando os resultados (5.31), (5.25), e (5.18) podemos escrever, a partir da equação de Boltzmann, uma equação de transporte para a evolução dos coeficientes de expansão $a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t)$,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} w(\xi) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial t} a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_r a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} = -\frac{1}{\tau} \left(a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} - a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} \right) - F_{i_n} a_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}}^{(n-1)} \right)$$

O que nos permite concluir com uma equação de evolução para os momentos hidro-

dinâmicos $a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} = a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t)$,

$$\frac{\partial}{\partial t} a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_r a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} + F_{i_n} a_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}}^{(n-1)} = -\frac{1}{\tau} \left(a_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} - a_{0 i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} \right) \quad (5.36)$$

Isto nos sugere que o truncamento da função f e da função $f^{(0)}$ em uma ordem N que preserve os momentos hidrodinâmicos manterá preservado também a informação termo-hidrodinâmica do sistema.

Neste sentido propomos o truncamento de f e $f^{(0)}$ em uma ordem N que recupere os momentos de interesse. Como estamos interessados em modelos térmicos, e lembrando dos resultados do capítulo 5, onde para recuperarmos a equação da energia necessitamos do momento de quarta ordem, portanto truncaremos f e $f^{(0)}$ na quarta ordem.

Condição necessária e suficiente para a preservação da informação termo hidrodinâmica através da evolução dos momentos hidrodinâmicos na Equação (5.36) é a manutenção da condição de norma no espaço de Hilbert entre os momentos no espaço contínuo e discreto para algum truncamento de ordem N ,

$$f^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \sim f^{(0)N}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = w(\xi) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_0^{(n)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\xi) \quad (5.37)$$

onde,

$$a_{0 i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^{(0)N}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) d^3 \xi$$

E a preservação dos momentos no espaço discreto, para uma ordem $\alpha \leq N$, podem ser imposta pelo conjunto de equações

$$\sum_{n=0}^{\alpha} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} f^{(0)N}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) d^3 \xi \right) = \sum_{n=0}^{\alpha} \left(\sum_{i=0}^b f^{(0)N}(\vec{x}_i, \vec{\xi}_i, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi_i) \right) \quad (5.38)$$

Substituindo em (5.37) em (5.38) o conjunto de equações (5.38) pode ser reescrito como,

$$\sum_{n,m=0}^{\alpha\beta} \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \mathcal{H}^{(m)}(\xi) \mathcal{H}^{(n)}(\xi) d^D \xi = \sum_{n,m=0}^{\alpha\beta} \sum_{i=0}^d w_i \mathcal{H}^{(m)}(\xi_i) \mathcal{H}^{(n)}(\xi_i) \quad (5.39)$$

Conforme discutido por Hegele [17]⁴, do ponto de vista do número de equações independentes que a relação (5.39) pode gerar, para efeito de cálculo, é mais interessante considerarmos a base gerada pelos monômios sugeridos pelos termos iniciais das ordens $\mathcal{H}^{(n)}$ ao invés da base completa \mathcal{H} , ou seja, para efeito de cálculo podemos usar a base alternativa,

$$\left(\mathcal{H}^{(0)}, \mathcal{H}^{(1)}, \dots, \mathcal{H}^{(n)}, \right) \rightarrow \left(1, \xi_{ix}, \xi_i^2, \xi_{ix} \xi_{iy}, \dots, \xi_{i i_1, i_2, \dots, i_n}^n \right) \quad (5.40)$$

isto pelo fato dos produtos $\mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)}(\xi_i) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi_i)$ em (5.39) serem proporcionais ao produto dos monômios $\xi_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)} \xi_{j_1, j_2, \dots, j_n}^{(n)} + O(\xi_i^k \xi_j^l)_{k \cdot l < m \cdot n}$, onde os monômios $O(\xi_i^k \xi_j^l)_{k \cdot l < m \cdot n}$ terão ordem inferior aos monômios $\xi_{i_1, i_2, \dots, i_m}^{(m)} \xi_{j_1, j_2, \dots, j_n}^{(n)}$ e portanto já terão sido considerados nas equações de produto para ordens $k \cdot l < m \cdot n$ em (5.39).

Portanto substituiremos a base \mathcal{H} ,

$$\mathcal{H} = \left(\mathcal{H}^{(0)}, \mathcal{H}^{(1)}, \dots, \mathcal{H}^{(n)} \right) \quad (5.41)$$

pela base ψ ,

$$\psi = \left(1, \xi_{ix}, \xi_i^2, \xi_{ix} \xi_{iy}, \dots, \xi_{i i_1, i_2, \dots, i_n}^n \right) \quad (5.42)$$

quando conveniente.

Sabemos da teoria de análise de funções sobre a ortogonalidade dos polinômios tensoriais de Hermite, portanto o lado esquerdo da Equação (5.39) respeita a relação de ortogonalidade demonstrada no apêndice *F*. Não podemos, a princípio, garantir as mesmas relações de ortogonalidade para o lado direito da mesma equação pelo fato de ainda estarmos em busca da forma discreta dos polinômios $\mathcal{H}(\xi_i)$. Neste sentido é interessante sugerirmos que os vetores discretos ξ_i sejam construídos para uma rede com simetria $\xi_{-i} = -\xi_i$. Neste sentido o lado direito da Equação (5.39) $\sum_{n,m=0}^{\alpha\beta} \sum_{i=0}^d w_i \mathcal{H}^{(m)}(\xi_i) \mathcal{H}^{(n)}(\xi_i)$ será trivialmente nulo quando o produto $m \cdot n$ for ímpar. Isto fica evidente quando usa-

⁴Em submissão

mos a base ψ

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^d w_i \psi^{(m)}(\xi_i) \psi^{(n)}(\xi_i) &= \sum_{i=0}^{d/2} w_i \psi^{(m)}(\xi_i) \psi^{(n)}(\xi_i) + \sum_{i=d/2}^d w_i \psi^{(m)}(\xi_{-i}) \psi^{(n)}(\xi_{-i}) \\
&= \sum_{i=0}^d w_i \left(\psi^{(m)}(\xi_i) \psi^{(n)}(\xi_i) - \psi^{(m)}(\xi_i) \psi^{(n)}(\xi_i) \right) \\
&= 0
\end{aligned} \tag{5.43}$$

Quando o produto $m \cdot n$, para $m \neq n$, for par, podemos concluir que,

$$\sum_{i=0}^d w_i \psi^m(\xi_i) \psi^n(\xi_j) = \sum_{i=0}^d w_i \psi^\alpha(\xi_i) \psi^\alpha(\xi_j) \tag{5.44}$$

onde $m < \alpha < n$ para $n > m$, ou seja, o caso $m \cdot n$ par é proporcional a algum produto interno já considerado, portanto não gera equações independente em (5.39). Neste sentido, usando as relações de ortogonalidade para os polinômios tensoriais de Hermite para o lado esquerdo da Equação (5.39) e considerando apenas as equações independentes no lado direito da mesma equação, podemos reescrever (5.39) como,

$$\sum_{n=0}^N \left(\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} [\mathcal{H}^{(n)}(\xi)]^2 d^D \xi = \sum_{i=0}^b w_i [\mathcal{H}^{(n)}(\xi_i)]^2 \right) \tag{5.45}$$

onde N é a ordem do polinômio considerado $f^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \sim f^{(0)N}(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$

Neste ponto é interessante chamarmos a atenção de que a informação dos graus de liberdade \vec{x} e t na expansão de $f^{(0)}$ na base tensorial de Hermite são carregadas pelos coeficientes de expansão $a_0^{(n)}(\vec{x}, t)$ e a informação da massa e da temperatura é determinada pelo grau de liberdade $\vec{\xi}$, o que está de acordo com a física do contínuo, pois os estados pós-colisionais dependerão das massas e das velocidades pré colisionais e as velocidades dependem da temperatura, ou seja, podemos afirmar que $\vec{\xi} = \vec{\xi}(m, T)$ e no contínuo os graus de liberdade são preservados pois $\vec{\xi}$ varia continuamente, o que permite variar m e T continuamente também. Quando passamos para o discreto $\vec{\xi} \rightarrow \vec{\xi}_i$, teremos um número finito de velocidades $\vec{\xi}_i$ o que gera perda de informação por não podermos variar continuamente m e T através de $\vec{\xi}_i$. Neste sentido é interessante parametrizarmos a mudança $\vec{\xi} \rightarrow a\vec{\xi}_i$. Levando em conta que as velocidades discretas $\vec{\xi}_i$ devem ser adimensionais, podemos relacionar o fator de escala a , que definiremos como passo de rede, com m e T na forma,

$$\begin{aligned}\vec{\xi} &\rightarrow \sqrt{(2KT_0)/m_0}\vec{\xi}_i \\ \xi &\rightarrow a\xi_i\end{aligned}\tag{5.46}$$

de maneira que,

$$a^2 = \frac{2KT_0}{m_0}\tag{5.47}$$

E poderemos reescrever a relação (5.45) como,

$$\sum_{n=0}^N \left(\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} [\mathcal{H}^{(n)}(\xi)]^2 d^D\xi = \sum_{i=0}^b w_i [\mathcal{H}^{(n)}(a\xi_i)]^2 \right)\tag{5.48}$$

O efeito líquido de uma parametrização do tipo (5.46) é fixar a temperatura de referência do modelo em T_0 e a massa em m_0 , mas como estamos trabalhando com apenas um constituinte podemos considerar $m_0 = 1$. Como estamos fazendo uma expansão polinomial em $\vec{\xi}_i$ e como acabamos de ver $\vec{\xi}_i$ carrega a informação da temperatura, estamos portanto fazendo uma expansão polinomial em torno do ponto T_0 . Isto pode gerar problemas quando estivermos buscando diferenças de temperaturas muito altas entre dois pontos vizinhos da rede. Este problema pode ser solucionado aumentando o número de velocidades do modelo ou refinando a malha, pois ao refinarmos a malha estaremos separando os mesmos dois pontos por um número maior de velocidades.

A relação (5.48), através da escolha de redes regulares convenientes ξ_i geram um sistema linear de equações para os pesos w_i e para o passo de rede a que possibilitam o cálculo da distribuição Maxwelliana (5.37) para a base discreta ξ_i como mostraremos na seção seguinte.

O resultado (5.48) para a discretização do espaço de velocidades com a discretização espaço-temporal (5.12) conclui-se com a equação de *Lattice Boltzmann*

$$f_i(\vec{x} + \delta\vec{\xi}_i, t + \delta) - f_i(\vec{x}, \xi_i) = \Omega_i\tag{5.49}$$

ou considerando explicitamente o termo de força externa,

$$f_i(\vec{x} + \delta\vec{\xi}_i, t + \delta) - f_i(\vec{x}, \vec{\xi}_i) + w_i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{n!} F_n a_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}}^{(n-1)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}, i_n}^{(n)}(\xi_i) = \Omega_i \quad (5.50)$$

que pode ser truncado na ordem dos momentos hidrodinâmicos de interesse.

Do ponto de vista do processo de simulação podemos dizer que a discretização espaço-temporal é responsável pela etapa de propagação, onde as partículas propagam de sítio a sítio em uma determinada direção da rede, e a discretização das velocidades relaciona-se com a etapa de colisão, onde em cada sítio as partículas vindas de várias direções reorganizan-se segundo a regra sugerida por Ω_i , ou seja, conservando a massa a quantidade de movimento e a energia, redistribuindo-se para posteriormente voltarem a se propagar para os sítios vizinhos. As etapas de colisão e propagação podem ser visualizadas na figura abaixo,

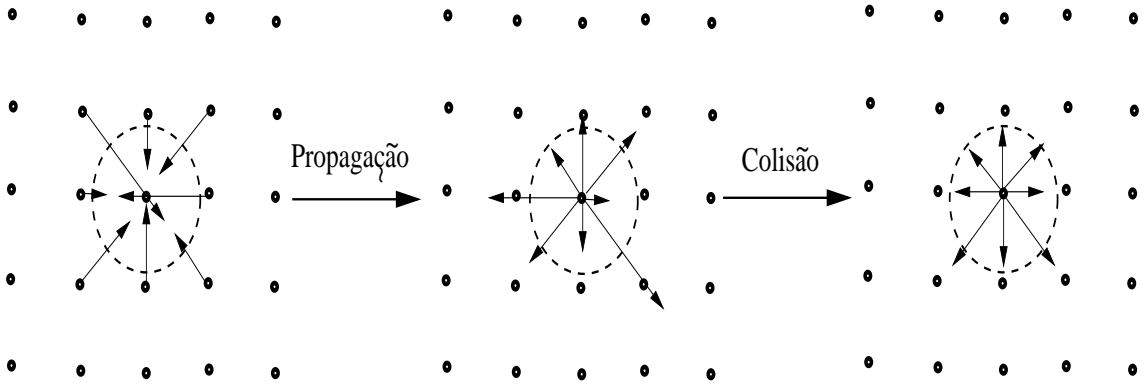


Figura 3: *Etapas de colisão e propagação envolvidas no processo de discretização*

O procedimento de Chapman-Enskog aplicado sobre a equação de *Lattice Boltzmann* é idêntico ao aplicado na teoria cinética do contínuo. Os resultados do procedimento de Chapman-Enskog, como cálculo dos coeficientes de transporte e a recuperação da equação macroscópica no contínuo, estão intimamente ligados aos momentos Maxwellianos e às propriedades do operador de colisão. Tanto a discretização espaço temporal, quanto a do espaço de velocidades preservam os momentos Maxwellianos e as propriedades do operador de colisão de forma que o processo de discretização como um todo preserva os resultados obtidos pelo procedimento de Chapman-Enskog no contínuo.

Devemos apenas tomar um pouco de cuidado no que diz respeito a discretização espaço-temporal. Existem duas formas para a equação espaço temporal discreta, uma delas é dada pela Equação (5.12), a outra, Equação (D.33) foi desenvolvida no apêndice D. As duas equações foram obtidas através de um processo de expansão em série de

Taylor⁵ com erros de ordem δ^2 e δ^3 .

A frequência de colisão ν , como vimos, é o tempo médio entre duas colisões. Devemos portanto esperar que a escolha de uma das equações (D.33) ou (5.12) implicará em desvios distintos no cálculo da viscosidade e da condutividade térmica, que dependem explicitamente do tempo de colisão (4.137), justamente por ambas serem equações para ordens distintas de erro no parâmetro discreto de tempo δ

Pode-se verificar através da aplicação do procedimento de Chapman-Enskog sobre a equação explícita o desvio na viscosidade e na condutividade térmica

$$\begin{aligned}\mu &= p \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \\ \lambda_0 &= p \left(\tau - \frac{1}{2} \right) k \frac{D+2}{2}\end{aligned}$$

já para a equação implícita,

$$\begin{aligned}\mu &= p\tau \\ \lambda_0 &= p\tau k \frac{D+2}{2}\end{aligned}$$

o resultado fica idêntico ao obtido no contínuo (4.88) e (4.91)

5.5 Cálculo das distribuições no equilíbrio

Como discutido na seção anterior e proposto por Philippi *et al.* em [2] implementaremos na seção seguinte o cálculo das redes bidimensionais e tridimensionais com respectivamente nove, vinte e cinco e cinquenta e nove velocidades, $D2V9$, $D2V25$ e $D3V59$ e suas respectivas distribuições de equilíbrio.

5.5.1 Modelo de segunda ordem $D2V9$

Para iniciar o cálculo, escolhemos uma rede com simetria $\xi_{-i} = -\xi_i$ com 9 velocidades, Figura (6), dividindo os grupos com velocidade de mesmo módulo e associando a cada

⁵O processo de discretização espaço temporal nos permite relacionar a variação espaço-temporal do lado esquerdo da equação discreta, que anteriormente no contínuo era feito pelos operadores ∂_t e $\vec{\nabla}_r$, com o lado direito dado pelo operador de colisão.

um deles um peso w_i

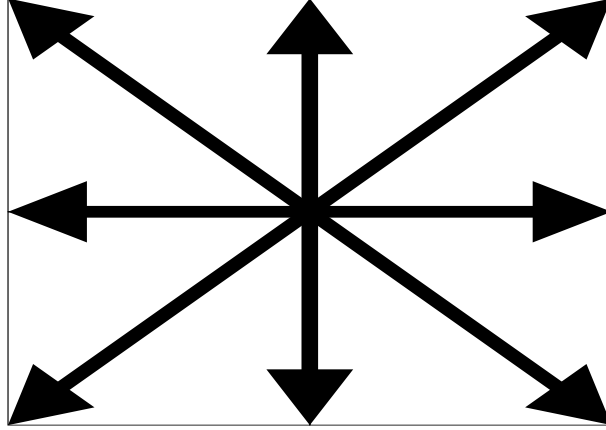


Figura 4: *Discretização do espaço de velocidades: Rede D2V9*

$$\begin{aligned}
 w_0 : \quad & \vec{\xi}_0 = \{0, 0\}; \\
 w_1 : \quad & \vec{\xi}_1 = \{1, 0\}; \vec{\xi}_2 = \{0, 1\}; \vec{\xi}_3 = \{-1, 0\}; \vec{\xi}_4 = \{0, -1\}; \\
 w_2 : \quad & \vec{\xi}_5 = \{1, 1\}; \vec{\xi}_6 = \{-1, 1\}; \vec{\xi}_7 = \{-1, -1\}; \vec{\xi}_8 = \{1, -1\}; \quad (5.51)
 \end{aligned}$$

A partir da Equação (5.48) chegamos à conclusão de que temos 4 incógnitas a serem determinadas, w_0 , w_1 , w_2 e o passo de rede a . Pensando nos monômios, pois estes serão os que irão gerar as equações independentes para poder determinar as quatro incógnitas, definidos pelos termos iniciais dos polinômios de Hermite $\mathcal{H}^{(n)}(\xi)$, concluímos que precisaremos dos polinômios de ordem 0, 1ª ordem e 2ª ordem que irão gerar 4 equações independentes para a determinação das 4 incógnitas, ou seja, para gerarmos as equações independentes podemos usar a base,

$$\psi = \{1, x, x^2, xy\} \quad (5.52)$$

onde, para facilitar a implementação dos cálculos no software Mathematica $\xi_{ix} \rightarrow x$. Uma vez definida as velocidades (5.51), os pesos e o passo de rede podem ser calculados pelo código sugerido⁶,

⁶O código foi feito usando o software Mathematica versão 7.0

```

Ci = {x, y};
U = {α, β};
ω =  $\frac{\rho}{(2\pi\theta)}$  e- $\frac{1}{2\theta}C_i.C_i$ ;
H = {1, x, x2, xy};
h[x-, y-] := {1, x, x2, xy};
Ti- := h[aci[[1]], aci[[2]]];
w = {w0, w1, w1, w1, w1, w2, w2, w2, w2};
Eq = {};
k = 4;
For[i = 0, i < k, Eq = Append[Eq,  $\sum_{j=1}^9 w[[j]]T_{j-1}[[i]]^2 == \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega H[[i]]^2 dx dy$ ], i++];
Sol = {w0, w1, w2, a} /. Solve[Eq, {w0, w1, w2, a}];
Eq
{w0 + 4w1 + 4w2 == 1, 2a2w1 + 4a2w2 == 1, 2a4w1 + 4a4w2 == 3, 4a4w2 == 1}
Sol[[2]]
{w0, w1, w2, a} = { $\frac{4}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{36}, \sqrt{3}$ }

```

De posse dos pesos, do passo de rede e das velocidades discretas, a distribuição no equilíbrio pode ser facilmente implementada. A forma funcional da distribuição no equilíbrio é dada pela Equação (5.26), até segunda ordem, na base discreta

$$\begin{aligned}
f_i^{(0)}(a\xi) &= \rho w_i \left[a_{0}^{(0)} \mathcal{H}^{(0)} + a_{0j}^{(1)} \mathcal{H}_j^{(1)} + \frac{1}{2!} a_{0jk}^{(2)} \mathcal{H}_{jk}^{(2)} \right] \\
&= \rho w_i \left[1 + a\vec{\xi}_i \cdot \vec{u} + \frac{1}{2} (a\vec{\xi}_i \cdot \vec{u})^2 - u^2 + (a^2\theta - 1) (a^2\xi_i^2 - 2) \right]
\end{aligned}$$

Os momentos Maxwellianos obtidos desta distribuição são

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^9 f_i^{(0)} &= \rho \\
\sum_{i=0}^9 f_i^{(0)} \xi_{i\alpha} &= \rho u_\alpha
\end{aligned}$$

$$\sum_{i=0}^9 f_i^{(0)} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} = \rho u_\alpha u_\beta + \rho \theta \delta_{\alpha\beta} \quad (5.53)$$

Os momentos de terceira e quarta ordem não são preservados pela rede $D2V9$. Isto gera distorções na equação de Navier Stokes no termo referente aos efeitos viscosos, pois para o cálculo deste termo é necessário a preservação do momento Maxwelliano de terceira ordem. Portanto a rede $D2V9$ garante sem desvios a recuperação apenas da equação de Euler.

5.5.2 Modelo de quarta ordem $D2V25$

Estamos interessados em encontrar a menor rede possível capaz de recuperar a equação da energia. Precisamos portanto da preservação do momento Maxwelliano até quarta ordem. Para manter inalterado, com relação ao contínuo, o vetor fluxo de calor precisamos preservar o momento de quarta ordem incompleto $\xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta$ e não o momento completo $\xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma \xi_\theta$. Isso diminui o número de monômios necessários para a recuperação da equação da energia, o que conseqüentemente diminuirá o número de velocidades necessárias para que uma determinada rede recupere os momentos necessários. Podemos dizer então que este é um modelo de quarta ordem incompleto e a base capaz de gerar equações independentes em (5.48) é⁷

$$\psi = \{1, x, x^2, xy, x^3, x^2y, \Psi_{xx} \equiv \xi_i^2 \xi_{ix} \xi_{ix}, \Psi_{xy} \equiv \xi_i^2 \xi_{ix} \xi_{iy}\} \quad (5.54)$$

onde Ψ_{xx} e Ψ_{xy} são monômios a serem ortonormalizados por um processo de Gram-Schmidt. Esses monômios foram sugeridos pelo fato dos monômios de quarta ordem a serem preservados $\xi^2 \xi_\alpha \xi_\beta$ gerarem apenas duas equações independentes em (5.48). Para a construção da distribuição no equilíbrio precisaremos dos monômios completos Ψ_{xx} , Ψ_{xy} e Ψ_{yy} . Aplicando o processo de ortonormalização de Gram-Schmidt sugerido no apêndice E para o caso em duas dimensões conseguimos,

⁷Onde novamente estamos usando $\xi_{ix} \rightarrow x$. Isto para facilitar a notação e a sugestão dos cálculos no software Mathematica

$$\begin{aligned}
\xi_i^2 \xi_{ix} \xi_{ix} \rightarrow \psi_{xx} &= \frac{4 + x^4 - y^2 + x^2(-7 + y^2)}{2\sqrt{7}}; \\
\xi_i^2 \xi_{ix} \xi_{iy} \rightarrow \psi_{xy} &= \frac{xy(-6 + x^2 + y^2)}{2\sqrt{3}}; \\
\xi_i^2 \xi_{iy} \xi_{iy} \rightarrow \psi_{yy} &= \frac{24 - x^4 + 6(-8 + x^2)y^2 + 7y^4}{8\sqrt{21}};
\end{aligned} \tag{5.55}$$

A base (5.54) indica oito equações independentes. Portanto precisaremos de um rede com sete pesos, ou seja, sete módulos de velocidade distintos. A rede sugerida, Figura (5) é a $D2V25$. Separando em grupos de velocidade de mesmo módulo,

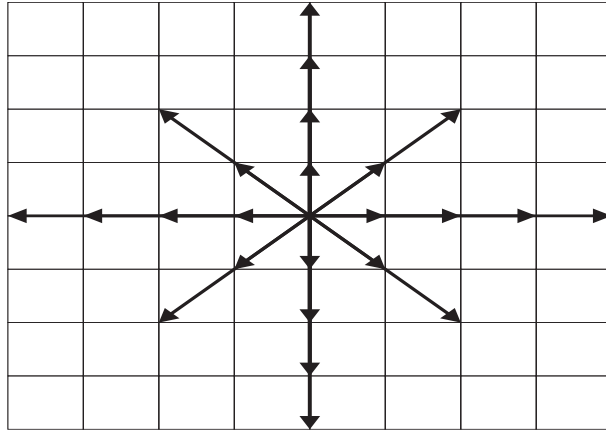


Figura 5: *Discretização do espaço de velocidades: Rede D2V25*

$$\begin{aligned}
w_1 : \quad & \vec{\xi}_1 = \{1, 0\}; \vec{\xi}_2 = \{0, 1\}; \vec{\xi}_3 = \{-1, 0\}; \vec{\xi}_4 = \{0, -1\}; \\
w_2 : \quad & \vec{\xi}_5 = \{1, 1\}; \vec{\xi}_6 = \{-1, 1\}; \vec{\xi}_7 = \{-1, -1\}; \vec{\xi}_8 = \{1, -1\}; \\
w_3 : \quad & \vec{\xi}_9 = \{0, 2\}; \vec{\xi}_{10} = \{-2, 0\}; \vec{\xi}_{11} = \{0, -2\}; \vec{\xi}_{12} = \{2, 0\}; \\
w_4 : \quad & \vec{\xi}_{13} = \{2, 2\}; \vec{\xi}_{14} = \{-2, 2\}; \vec{\xi}_{15} = \{-2, -2\}; \vec{\xi}_{16} = \{2, -2\}; \\
w_5 : \quad & \vec{\xi}_{17} = \{3, 0\}; \vec{\xi}_{18} = \{0, 3\}; \vec{\xi}_{19} = \{-3, 0\}; \vec{\xi}_{20} = \{0, -3\}; \\
w_6 : \quad & \vec{\xi}_{21} = \{4, 0\}; \vec{\xi}_{22} = \{0, 4\}; \vec{\xi}_{23} = \{-4, 0\}; \vec{\xi}_{24} = \{0, -4\}; \\
w_0 : \quad & \vec{\xi}_0 = \{0, 0\};
\end{aligned} \tag{5.56}$$

O cálculo dos pesos e do passo de rede é o sugerido pela Equação (5.48) e o código sugerido é semelhante ao da rede $D2V9$,

$$\begin{aligned}
C_i &= \{x, y\}; \\
U &= \{\alpha, \beta\}; \\
\omega &= \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{1}{2}C_i \cdot C_i}; \\
H &= \{1, x, x^2, xy, x^3, x^2y, \psi_{xx}, \psi_{xy}\}; \\
h[x_-, y_-] &:= \{1, x, x^2, xy, x^3, x^2y, \frac{4 + x^4 - y^2 + x^2(-7 + y^2)}{2\sqrt{7}}, \frac{xy(-6 + x^2 + y^2)}{2\sqrt{3}}\}; \\
T_{i_-} &:= h[ac_i[[1]], ac_i[[2]]]; \\
w &= \{w_0, w_1, w_1, w_1, w_1, w_2, w_2, w_2, w_2, w_3, w_3, w_3, w_3, w_4, w_4, w_4, w_4, \\
&w_5, w_5, w_5, w_5, w_6, w_6, w_6, w_6\}; \\
Eq &= \{\}; \\
k &= \text{Dimensions}[H][[1]]; \\
\text{For}[i = 0, i < k, Eq = \text{Append}[Eq, \sum_{j=1}^{25} w[[j]]T_{j-1}[[i]]^2 == \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega H[[i]]^2 dx dy], i++]; \\
\text{Sol} &= \{w_0, w_1, w_2, w_3, w_4, w_5, w_6, a\} /. \text{Solve}[Eq, \{w_0, w_1, w_2, w_3, w_4, w_5, w_6, a\}]; \\
\{w_0, w_1, w_2, w_3, w_4, w_5, w_6, a\} &= \left\{ \frac{34509 - 1405\sqrt{33}}{110592}, \frac{6267 - 331\sqrt{33}}{69120}, \right. \\
&\frac{283 + 21\sqrt{33}}{4608}, \frac{2133 + 379\sqrt{33}}{138240}, \frac{233 + 39\sqrt{33}}{73728}, \frac{627 + 61\sqrt{33}}{483840}, \\
&\left. \frac{327 + 169\sqrt{33}}{15482880}, \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2}(15 - \sqrt{33})} \right\}; \tag{5.57}
\end{aligned}$$

De posse da base (5.55) os coeficientes de expansão da parte incompleta⁸ de quarta ordem, sugeridos pela Equação (5.24) podem ser calculados da seguinte maneira,

$$\begin{aligned}
C_i &= \{x, y\}; \\
U &= \{\alpha, \beta\}; \\
\text{feq} &= \rho \frac{1}{2\pi\theta} e^{-\frac{1}{2\theta}(C_i - U) \cdot (C_i - U)}; \\
\Psi &= \left\{ \frac{4 + x^4 - y^2 + x^2(-7 + y^2)}{2\sqrt{7}}, \frac{xy(-6 + x^2 + y^2)}{2\sqrt{3}}, \frac{24 - x^4 + 6(-8 + x^2)y^2 + 7y^4}{8\sqrt{21}} \right\}; \\
k &= \text{Dimensions}[\Psi][[1]];
\end{aligned}$$

⁸Os coeficientes de expansão e a base para modelos de terceira ordem já foram determinados nas seções anteriores.

$A = \{ \};$

For[$j = 0, j < k, A = \text{Append}[A, \text{Assuming}[\theta > 0 \& \& \rho > 0, \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{feq}\Psi[[j]] dx dy], j + +];$

E os coeficientes de expansão serão guardados no vetor A . Os termos de quarta ordem da distribuição no equilíbrio podem ser reagrupados em termos de produtos internos. Porém, fazer este cálculo a mão é extremamente massante. O reagrupamento é sugerido pelo código abaixo,

$W = \{x, y\};$

$Q = \{\alpha, \beta\};$

$$G = \text{Expand} \left[\sum_{i=0}^2 \sum_{n=0}^4 \sum_{j=0}^2 \sum_{m=0}^2 T_{i,j,n,m} \rho (W.W)^i (Q.Q)^j (Q.W)^n \theta^m \right]; \quad (5.58)$$

$$S = \text{MonomialList} \left[\sum_{i=0}^2 \sum_{n=0}^4 \sum_{j=0}^2 \sum_{m=0}^2 T_{i,j,n,m} \right] \quad (5.59)$$

$R = \text{Expand}[A.\Psi];$

$$S = S/. \text{SolveAlways}[G == R, \{x, y, \alpha, \beta, \theta, \rho\}] \quad (5.60)$$

Ou seja, expandimos um produto interno genérico (5.58) com coeficientes $T_{i,j,n,m}$ a determinar, e igualamos com a expansão (5.59) obtida pelo Mathematica. Em seguida determinamos os coeficientes com a operação (5.60). Determinado os coeficientes $T_{i,j,n,m}$ expandimos o produto interno (5.58) para determinar a parte de quarta ordem requerida,

$$\begin{aligned} f_{4^a}^{(0)} &= \sum_{i=0}^2 \sum_{n=0}^4 \sum_{j=0}^2 \sum_{m=0}^2 T_{i,j,n,m} \rho (\xi \cdot \xi)^i (v \cdot v)^j (v \cdot \xi)^n \theta^m \\ &= \rho - 2\theta\rho + \theta^2\rho - \rho v \cdot v + \theta\rho v \cdot v + \frac{1}{8}\rho(v \cdot v)^2 + \frac{3}{2}\rho(v \cdot \xi)^2 - \frac{3}{2}\theta\rho(v \cdot \xi)^2 - \frac{1}{4}\rho v \cdot v (v \cdot \xi)^2 \\ &\quad - \rho\xi \cdot \xi + 2\theta\rho\xi \cdot \xi - \theta^2\rho\xi \cdot \xi + \frac{1}{4}\rho v \cdot v \xi \cdot \xi - \frac{1}{4}\theta\rho v \cdot v \xi \cdot \xi - \frac{1}{4}\rho(v \cdot \xi)^2 \xi \cdot \xi \\ &\quad + \frac{1}{4}\theta\rho(v \cdot \xi)^2 \xi \cdot \xi + \frac{1}{24}\rho v \cdot v (v \cdot \xi)^2 \xi \cdot \xi \\ &\quad + \frac{1}{8}\theta^2\rho(\xi \cdot \xi)^2 - \frac{1}{192}\rho(v \cdot v)^2 (\xi \cdot \xi)^2 \end{aligned} \quad (5.61)$$

Somando a contribuição (5.61) à (5.26) a distribuição no equilíbrio completa pode ser escrita como,

$$\begin{aligned}
f_i = & w_i \rho (1 + a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{u} + \frac{1}{2} (a^4 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{u})^2 - a^2 \vec{u} \cdot \vec{u} + (a^2 \theta - 1) (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i - 2))) \\
& + a^2 \frac{\vec{\xi}_i \cdot \vec{u}}{6} (a^4 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{u})^2 - 3a^2 \vec{u} \cdot \vec{u} + 3(a^2 \theta - 1) (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i - 4)) + (a^2 \theta - 1)^2 \\
& + (a^2 \theta - 1) a^2 \vec{u} \cdot \vec{u} + \frac{1}{8} a^4 (\vec{u} \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2} (a^2 \theta - 1) a^4 (\vec{u} \cdot \vec{\xi}_i)^2 - \frac{1}{4} a^6 \vec{u} \cdot \vec{u} (\vec{u} \cdot \vec{\xi}_i)^2 \\
& - (a^2 \theta - 1)^2 a^2 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) - \frac{1}{4} (a^2 \theta - 1) a^4 (\vec{u} \cdot \vec{u}) (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) + \frac{1}{4} (a^2 \theta - 1) a^6 (\vec{u} \cdot \vec{\xi}_i)^2 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) \\
& + \frac{1}{24} a^8 (\vec{u} \cdot \vec{u}) (\vec{u} \cdot \vec{\xi}_i)^2 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) + \frac{1}{8} (a^2 \theta - 1)^2 a^4 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i)^2 - \frac{1}{192} a^8 (\vec{u} \cdot \vec{u})^2 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i)^2
\end{aligned} \tag{5.62}$$

Os momentos Maxwellianos até quarta ordem podem ser facilmente verificados seguindo o procedimento indicado para o software Mathematica,

Ordem zero:

$$\begin{aligned}
& \text{FullSimplify} \left[\sum_{i=0}^{24} f_i \right] \\
& \rho
\end{aligned}$$

Primeira ordem:

$$\begin{aligned}
P &= \text{Expand}[\text{FullSimplify}[\sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^2 \sum_{i=0}^{24} M_{m,n} f_i \xi_i[[m]]]]; \\
G_{i_} &:= \rho U[[i]] M_i; \\
PG &= \text{Expand}[\sum_{m=1}^2 G_m]; \\
& \text{FullSimplify}[P/PG] \\
& 1
\end{aligned}$$

Segunda ordem:

$$\begin{aligned}
P &= \text{Expand} \left[\text{FullSimplify} \left[\sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^2 \sum_{i=0}^{24} M_{m,n} f_i \xi_i[[m]] \xi_i[[n]] \right] \right]; \\
G_{i_j_} &:= \rho U[[i]] U[[j]] M_{i,j} + \rho \theta M_{i,j} \delta_{i,j} + \frac{1}{2} B \cdot B M_{i,j} \delta_{i,j} - B[[i]] B[[j]] M_{i,j};
\end{aligned}$$

$$PG = \text{Expand} \left[\sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^2 G_{m,n} \right];$$

FullSimplify[P/PG]

1

Terceira ordem:

$$P = \text{Expand} \left[\text{FullSimplify} \left[\sum_{l=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^2 \sum_{i=0}^{24} M_{m,n,l} f_i \xi_i[[m]] \xi_i[[n]] \xi_i[[l]] \right] \right];$$

$$G_{i_j_l_} := \rho U[[i]] U[[j]] U[[l]] M_{i,j,l} + \rho \theta U[[l]] M_{i,j,l} \delta_{i,j} + \rho \theta U[[j]] M_{i,j,l} \delta_{i,j} + \rho \theta U[[i]] M_{i,j,l} \delta_{i,j};$$

$$PG = \text{Expand} \left[\sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^2 G_{i,j,l} \right];$$

FullSimplify[P/PG]

1

Quarta ordem:

$$P = \text{Expand} \left[\text{FullSimplify} \left[\sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^2 \sum_{i=0}^{24} M_{m,n} f_i \xi_i[[m]] \xi_i[[n]] \xi_i \cdot \xi_i \right] \right];$$

$$G_{i_j_} := \rho \theta U.U M_{i,j} \delta_{i,j} + 6 \rho \theta U[[i]] U[[j]] M_{i,j} + 4 \rho \theta^2 M_{i,j} \delta_{i,j} + \rho U[[i]] U[[j]] M_{i,j} U.U \\ + \frac{6}{a^2} \left(\frac{1}{2} B.B M_{i,j} \delta_{i,j} - B[[i]] B[[j]] M_{i,j} \right);$$

$$PG = \text{Expand} \left[\sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^2 G_{m,n} \right];$$

FullSimplify[P/PG]

1

Neste modelo os momentos até quarta ordem são preservados ⁹. Isto possibilita a recuperação das equações hidrodinâmicas até a equação da Energia.

⁹Os coeficientes $M_{i,j}, \dots$ foram introduzidos nos cálculos acima para que o Mathematica não agrupasse os termos automaticamente. Isto possibilita a comparação entre o momento sugerido $G_{i,j}$ e o cálculo explícito P a partir da distribuição no equilíbrio calculada.

5.5.3 Modelo de quarta ordem $D3V59$

No mesmo espírito do cálculo da rede $D2V25$ estamos interessados em encontrar a menor rede possível, em três dimensões, capaz de recuperar a equação da energia. A base para a determinação dos pesos e do passo de rede em três dimensões é,

$$H = \{1, x, x^2, xy, x^3, x^2y, xyz, \psi_{xy}, \psi_{zz}\} \quad (5.63)$$

Os únicos monômios de quarta ordem que geram equações independentes em (5.48) são ψ_{xy} e ψ_{zz} . O procedimento de cálculo para a determinação dos monômios ortonormalizados para a determinação da base para a expansão da função $f^{(0)}$ pode ser encontrado no apêndice E . Os monômios são

$$\begin{aligned} \xi_i^2 \xi_{ix} \xi_{ix} \rightarrow \psi_{xx} &= \frac{5 + x^4 - y^2 - z^2 + x^2(-8 + y^2 + z^2)}{4\sqrt{2}} \\ \xi_i^2 \xi_{iy} \xi_{iy} \rightarrow \psi_{yy} &= \frac{-(x^2 - 8y^2)(x^2 + y^2 + z^2) - 7(-5 + 9y^2 + z^2)}{12\sqrt{14}} \\ \xi_i^2 \xi_{iz} \xi_{iz} \rightarrow \psi_{zz} &= \frac{35 - 70z^2 - (x^2 + y^2 - 9z^2)(x^2 + y^2 + z^2)}{6\sqrt{70}} \\ \xi_i^2 \xi_{ix} \xi_{iy} \rightarrow \psi_{xy} &= \frac{xy(-7 + x^2 + y^2 + z^2)}{\sqrt{14}} \\ \xi_i^2 \xi_{ix} \xi_{iz} \rightarrow \psi_{xz} &= \frac{xz(-7 + x^2 + y^2 + z^2)}{\sqrt{14}} \\ \xi_i^2 \xi_{iz} \xi_{iy} \rightarrow \psi_{zy} &= \frac{yz(-7 + x^2 + y^2 + z^2)}{\sqrt{14}} \end{aligned} \quad (5.64)$$

A base (5.63) vista sob a Equação (5.48) gera nove equações independentes. Portanto precisaremos de uma rede com oito pesos, ou seja, oito módulos de velocidade distintos. A rede sugerida é a $D3V59$. As velocidades podem ser divididas em grupos de mesmo módulo,

$$\begin{aligned} w_1 : \vec{\xi}_1 &= \{1, 0, 0\} \quad \vec{\xi}_2 = \{0, 1, 0\} \quad \vec{\xi}_3 = \{0, 0, 1\} \quad \vec{\xi}_4 = \{-1, 0, 0\} \quad \vec{\xi}_5 = \{0, -1, 0\} \\ &\quad \vec{\xi}_6 = \{0, 0, -1\} \\ w_2 : \vec{\xi}_7 &= \{1, 1, 0\} \quad \vec{\xi}_8 = \{-1, 1, 0\} \quad \vec{\xi}_9 = \{-1, -1, 0\} \quad \vec{\xi}_{10} = \{1, -1, 0\} \quad \vec{\xi}_{11} = \{0, 1, -1\} \\ &\quad \vec{\xi}_{12} = \{0, 1, 1\} \quad \vec{\xi}_{13} = \{0, -1, 1\} \quad \vec{\xi}_{14} = \{0, -1, -1\} \quad \vec{\xi}_{15} = \{1, 0, -1\} \quad \vec{\xi}_{16} = \{-1, 0, -1\} \\ &\quad \vec{\xi}_{17} = \{-1, 0, 1\} \quad \vec{\xi}_{18} = \{1, 0, 1\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
w_3 : \quad & \vec{\xi}_{19} = \{1, 1, 1\} \quad \vec{\xi}_{20} = \{-1, 1, 1\} \quad \vec{\xi}_{21} = \{1, -1, 1\} \quad \vec{\xi}_{22} = \{1, 1, -1\} \quad \vec{\xi}_{23} = \{-1, -1, -1\} \\
& \vec{\xi}_{24} = \{-1, -1, 1\} \quad \vec{\xi}_{25} = \{1, -1, -1\} \quad \vec{\xi}_{26} = \{-1, 1, -1\} \\
w_4 : \quad & \vec{\xi}_{27} = \{2, 0, 0\} \quad \vec{\xi}_{28} = \{0, 2, 0\} \quad \vec{\xi}_{29} = \{0, 0, 2\} \quad \vec{\xi}_{30} = \{-2, 0, 0\} \quad \vec{\xi}_{31} = \{0, -2, 0\} \\
& \vec{\xi}_{32} = \{0, 0, -2\} \\
w_5 : \quad & \vec{\xi}_{33} = \{2, 2, 0\} \quad \vec{\xi}_{34} = \{-2, 2, 0\} \quad \vec{\xi}_{35} = \{-2, -2, 0\} \quad \vec{\xi}_{36} = \{2, -2, 0\} \quad \vec{\xi}_{37} = \{0, 2, -2\} \\
& \vec{\xi}_{38} = \{0, 2, 2\} \quad \vec{\xi}_{39} = \{0, -2, 2\} \quad \vec{\xi}_{40} = \{0, -2, -2\} \quad \vec{\xi}_{41} = \{2, 0, -2\} \quad \vec{\xi}_{42} = \{-2, 0, -2\} \\
& \vec{\xi}_{43} = \{-2, 0, 2\} \quad \vec{\xi}_{44} = \{2, 0, 2\} \\
w_6 : \quad & \vec{\xi}_{45} = \{2, 2, 2\} \quad \vec{\xi}_{46} = \{-2, 2, 2\} \quad \vec{\xi}_{47} = \{2, -2, 2\} \quad \vec{\xi}_{48} = \{2, 2, -2\} \quad \vec{\xi}_{49} = \{-2, -2, -2\} \\
& \vec{\xi}_{50} = \{-2, -2, 2\} \quad \vec{\xi}_{51} = \{2, -2, -2\} \quad \vec{\xi}_{52} = \{-2, 2, -2\} \\
w_7 : \quad & \vec{\xi}_{53} = \{3, 0, 0\} \quad \vec{\xi}_{54} = \{0, 3, 0\} \quad \vec{\xi}_{55} = \{0, 0, 3\} \quad \vec{\xi}_{56} = \{-3, 0, 0\} \quad \vec{\xi}_{57} = \{0, -3, 0\} \\
& \vec{\xi}_{58} = \{0, 0, -3\} \\
w_0 : \quad & \vec{\xi}_0 = \{0, 0, 0\}
\end{aligned}$$

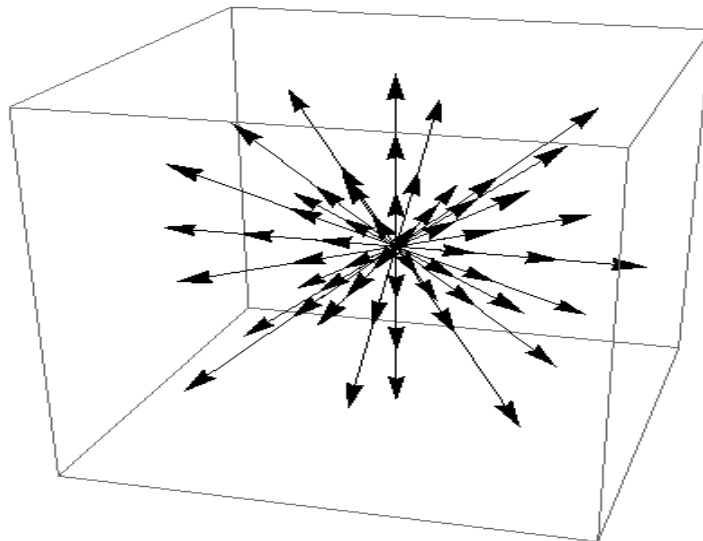


Figura 6: *Discretização do espaço de velocidades: Rede D3V59*

O cálculo dos pesos e do passo de rede, a determinação da parte de quarta ordem incompleta da distribuição no equilíbrio é análogo ao efetuado para a rede $D2V25$. Os pesos e o passo de rede para a $D3V59$ são,

$$\begin{aligned}
w_0 &= 0.095878916237752832729 \\
w_1 &= 0.073104708212914839109 \\
w_2 &= 0.0034658897109338004402 \\
w_3 &= 0.036610808204451537874 \\
w_4 &= 0.015923523223205955321 \\
w_5 &= 0.0025248084510509439391 \\
w_6 &= 0.000072696866251515863464 \\
w_7 &= 0.00076587943934683970609 \\
a &= 1.2028851233102617112
\end{aligned}$$

A distribuição no equilíbrio completa para a rede $D3V59$ é dada por,

$$\begin{aligned}
f_i &= w_i \rho \left(1 + a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{u} + \frac{1}{2} (a^4 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{u})^2 - a^2 \vec{u} \cdot \vec{u} + (a^2 \theta - 1) (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i - 3)) \right. \\
&+ a^2 \frac{\vec{\xi}_i \cdot \vec{u}}{6} (a^4 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{u})^2 - 3a^2 \vec{u} \cdot \vec{u} + 3(a^2 \theta - 1) (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i - 5)) + \frac{15}{8} (a^2 \theta - 1)^2 \\
&+ \frac{5}{4} (a^2 \theta - 1) a^2 \vec{u} \cdot \vec{u} + \frac{1}{8} a^4 (\vec{u} \cdot \vec{u})^2 - \frac{7}{4} (a^2 \theta - 1) a^4 (\vec{u} \cdot \vec{\xi}_i)^2 \\
&- \frac{1}{4} a^6 \vec{u} \cdot \vec{u} (\vec{u} \cdot \vec{\xi}_i)^2 - \frac{5}{4} (a^2 \theta - 1)^2 a^2 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) - \frac{1}{4} (a^2 \theta - 1) a^4 (\vec{u} \cdot \vec{u}) (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) \\
&+ \frac{1}{4} (a^2 \theta - 1) a^6 (\vec{u} \cdot \vec{\xi}_i)^2 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) + \frac{1}{28} a^8 (\vec{u} \cdot \vec{u}) (\vec{u} \cdot \vec{\xi}_i)^2 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) + \frac{1}{8} (a^2 \theta - 1)^2 a^4 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i)^2 \\
&\left. - \frac{1}{280} a^8 (\vec{u} \cdot \vec{u})^2 (\vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i)^2 \right) \quad (5.65)
\end{aligned}$$

Para esta rede recuperamos os momentos até quarta ordem. Percebemos a semelhança entre os modelos de quarta ordem $D2V25$ e $D3V59$ ambos recuperam os momentos de quarta ordem e as equações da hidrodinâmica até a equação da energia. Para ambas as redes podemos escrever os momentos até a quarta ordem como,

$$\int f^{(0)} d\vec{\xi} = \rho$$

$$\begin{aligned}
\int f^{(0)} \xi_\alpha d\vec{\xi} &= \rho u_\alpha \\
\int f^{(0)} \xi_\alpha \xi_\beta d\vec{\xi} &= \rho u_\alpha u_\beta + p \delta_{\alpha\beta} \\
\int f^{(0)} \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma d\vec{\xi} &= \rho u_\alpha u_\beta u_\gamma + p (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}) \\
\int f^{(0)} \xi^2 \xi_\alpha \xi_\gamma d\vec{\xi} &= \rho u^2 u_\alpha u_\gamma + p u^2 \delta_{\alpha\gamma} + (4 + D) p u_\alpha u_\gamma + (2 + D) \frac{p^2}{\rho} \delta_{\alpha\gamma}
\end{aligned}$$

Recuperamos assim a termo-hidrodinâmica em duas e em três dimensões para as redes $D2V25$ e $D3V59$.

Concluimos até aqui que nosso modelo magnetohidrodinâmico, capaz de recuperar as equações da termohidrodinâmica, consistem nas distribuições de equilíbrio (5.62) e (5.65) adicionadas do termo de força (5.32)

5.6 Modelo magnetohidrodinâmico baseado na modificação do segundo momento hidrodinâmico

Como discutido no capítulo 3, no modelo magnetohidrodinâmico baseado na modificação do segundo momento hidrodinâmico, o termo de acoplamento $\vec{J} \times \vec{b}$ é reescrito como um divergente total e absorvido pelo termo de pressão termodinâmica e hidrodinâmico. Neste sentido podemos intuir que uma modificação no segundo momento hidrodinâmico nos coeficientes de expansão dos polinômios de Hermite recuperará corretamente o termo de acoplamento na equação de Euler,

$$\partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta + p \delta_{\alpha\beta}) = \partial_\alpha \left[\frac{1}{2} b^2 \delta_{\alpha\beta} - b_\alpha b_\beta \right] \quad (5.66)$$

ou seja,

$$a_{0\alpha\beta}^{(2)} = \rho u_{\alpha\beta} + \rho(\theta - 1)\delta_{\alpha\beta} \rightarrow \rho u_{\alpha\beta} + \rho(\theta - 1)\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} b^2 \delta_{\alpha\beta} - b_\alpha b_\beta \quad (5.67)$$

o que nos permite redefinir o segundo momento hidrodinâmico como,

$$a_{0\alpha\beta}^{(2)} = \rho u_{\alpha\beta} + \rho(\theta - 1)\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} b^2 \delta_{\alpha\beta} - b_\alpha b_\beta \quad (5.68)$$

Usando os mesmos procedimentos de cálculo para as redes $D2V9$, $D2V25$ e $D3V59$

com a redefinição (5.68) para o segundo momento hidrodinâmico, teremos os seguintes termos aditivos para as distribuições de equilíbrio,

$$\begin{aligned} D2V9 : &= \frac{a^4}{2} \left(\frac{1}{2} b^2 \xi_i^2 - (\vec{b} \cdot \vec{\xi}_i)^2 \right) \\ D2V25 : &= \frac{a^4}{2} \left(\frac{1}{2} b^2 \xi_i^2 - (\vec{b} \cdot \vec{\xi}_i)^2 \right) \\ D3V59 : &= \frac{a^4}{2} \left(\frac{1}{2} b^2 \xi_i^2 - (\vec{b} \cdot \vec{\xi}_i)^2 \right) - \frac{a^2}{4} \vec{b} \cdot \vec{b} \end{aligned}$$

Com os respectivos momentos hidrodinâmicos Maxwellianos, onde a $D2V9$ preserva apenas até o segundo momento,

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} &= \rho \\ \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} \xi_{i\alpha} &= \rho u_\alpha \\ \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} &= \rho u_\alpha u_\beta + \rho \theta \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} B^2 \delta_{\alpha\beta} - b_\alpha b_\beta \\ \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} &= \rho u_\alpha u_\beta u_\gamma + \rho \theta u_\gamma \delta_{\alpha\beta} + \rho \theta u_\beta \delta_{\gamma\alpha} + \rho \theta u_\alpha \delta_{\beta\gamma} \\ \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} \xi_i^2 \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} &= \rho \theta u^2 \delta_{\alpha\beta} + (4 + D) \rho \theta u_\alpha u_\beta + (D + 2) \rho \theta^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u^2 u_\alpha u_\beta \\ &\quad + \frac{(4 + D)}{a^2} \left(\frac{1}{D} b^2 \delta_{\alpha\beta} - b_\alpha b_\beta \right) \end{aligned} \quad (5.69)$$

A distribuição $D2V9$ recupera a distribuição sugerida por Paul J. Dellar [1] com o termo adicional ligado à temperatura. Para modelos não térmicos $(\theta - 1) = 0$ ficamos exatamente com a distribuição de P. J. Dellar. Neste caso recuperamos de forma correta o termo de acoplamento indicado na Equação (5.66). Os momentos, a partir do momento de terceira ordem terão termos que contribuirão com termos espúrios na equação da energia.

Como podemos ver, a modificação no momento de segunda ordem gera termos adicionais dependentes de \vec{b} no momento de quarta ordem tanto para a $D2V25$ quanto para a $D3V59$. Estes termos serão responsáveis por termos espúrios na recuperação da equação da energia viscosa. Visando a solução deste problema e nos baseando na ortogonalidade dos polinômios de Hermite, somamos à distribuição de equilíbrio um termo proporcional ao polinômio de quarta ordem,

$$f^{(0)} = f_{D2V25}^{(0)} + T_1 \left(\frac{1}{2} b^2 \xi_i^2 - (\vec{B} \cdot \vec{\xi}_i)^2 \right) \mathcal{H}^{(4)}$$

$$f^{(0)} = f_{D3V59}^{(0)} + T_2 \left(\frac{1}{2} b^2 \xi_i^2 - (\vec{B} \cdot \vec{\xi}_i)^2 \right) \mathcal{H}^{(4)}$$

Ajustando T_1 e T_2 os novos termos aditivos para a $D2V25$ e $D3V59$ ficam,

$$\begin{aligned} D2V25 : &= \frac{a^4}{2} \left(\frac{1}{2} b^2 \xi_i^2 - (\vec{B} \cdot \vec{\xi}_i)^2 \right) - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2} (a^2 \vec{B} \cdot \vec{B}) (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i - 6) \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{2} (a^2 \vec{B} \cdot \vec{B}) (4 - a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) - (a^2 \vec{B} \cdot \vec{\xi}_i)^2 (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i - 6) - a^2 \vec{B} \cdot \vec{B} (4 - a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) \right) \\ D3V59 : &= \frac{a^4}{2} \left(\frac{1}{2} b^2 \xi_i^2 - (\vec{B} \cdot \vec{\xi}_i)^2 \right) - \frac{a^2}{4} \vec{B} \cdot \vec{B} + \frac{3}{12} \left(\frac{1}{2} (a^2 \vec{B} \cdot \vec{B}) (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i - 7) \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{2} (a^2 \vec{B} \cdot \vec{B}) (5 - a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) - (a^2 \vec{B} \cdot \vec{\xi}_i)^2 (a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i - 7) - a^2 \vec{B} \cdot \vec{B} (5 - a^2 \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_i) \right) \end{aligned}$$

Com estes novos termos aditivos, as distribuições de equilíbrio $D2V25$ e $D3V59$ contribuem respectivamente com os seguintes momentos hidrodinâmicos,

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} &= \rho \\ \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} \xi_{i\alpha} &= \rho u_\alpha \\ \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} &= \rho u_\alpha u_\beta + \rho \theta \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} B^2 \delta_{\alpha\beta} - b_\alpha b_\beta \\ \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} &= \rho u_\alpha u_\beta u_\gamma + \rho \theta u_\gamma \delta_{\alpha\beta} + \rho \theta u_\beta \delta_{\gamma\alpha} + \rho \theta u_\alpha \delta_{\beta\gamma} \\ \sum_{i=0}^b f_i^{(0)} \xi_i^2 \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} &= \rho \theta u^2 \delta_{\alpha\beta} + (4 + D) \rho \theta u_\alpha u_\beta + (D + 2) \rho \theta^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u^2 u_\alpha u_\beta \end{aligned}$$

Que são exatamente os momentos Maxwellianos até quarta ordem, o que nos garante a recuperação correta do termo de acoplamento na Equação (5.66) sem termos adicionais na equação de energia.

5.7 Discretização das equações eletromagnéticas

De maneira geral podemos ver os modelos de Lattice Boltzmann como ferramentas para solução de equações diferenciais. Se encontrarmos, para alguma equação diferencial, o operador de colisão que através da aplicação do procedimento de Chapman Enskog reproduza a requerida equação, estaremos através da equação discreta resolvendo os campos macroscópicos. Como pode ser visto em [18], Zhenhua Chai e colaboradores usaram modelos de Lattice Boltzmann para resolver a equação diferencial parcial não linear que descreve a evolução de uma onda que se propaga sem dispersão e mantendo sua forma original, mais conhecida como equação de Korteweg-de Vries - KdV. Neste espírito estaremos em busca de um modelo cinético capaz de reproduzir a equação de evolução para os campos \vec{E} e \vec{B} definida em (3.22).

Sintetizando aqui o trabalho de Paul J. Dellar [1] vamos fazer algumas considerações para melhor entender o problema.

Como discutido em (5.14) através de um processo de média sobre f relacionamos o campo mesoscópico f aos campos macroscópicos ρ , $\rho\vec{u}$ e ρe . Vamos tentar estabelecer esta mesma relação para recuperar o campo \vec{B} como alguma ordem nos momentos $\vec{\xi}$. Para isso vamos escrever a equação da indução eletromagnética (2.59) como uma equação de conservação,

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \vec{\nabla} \times \vec{E} = 0 \quad (5.70)$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \bar{\bar{\Lambda}} = 0 \quad (5.71)$$

E então queremos escrever,

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = \vec{\nabla} \cdot \bar{\bar{\Lambda}} \quad (5.72)$$

ou seja,

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = \varepsilon_{ijk} \hat{e}_k \partial_i E_j = \partial_i (-\hat{e}_k \varepsilon_{kji} E_j) = \hat{e}_i \partial_i (-E_j \varepsilon_{jkl} \hat{e}_l \hat{e}_k) = \vec{\nabla} \cdot \bar{\bar{\Lambda}} \quad (5.73)$$

O que nos permite concluir,

$$\bar{\Lambda} = -E_j \epsilon_{jlk} \hat{e}_l \hat{e}_k \quad (5.74)$$

Comparando a Equação (5.70) com a equação de conservação da massa e da quantidade de movimento,

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0 \quad (5.75)$$

$$\partial_t \rho u_\beta + \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta + p \delta_{\alpha\beta}) = 0 \quad (5.76)$$

$$\partial_t b_\alpha + \partial_j (-E_i \epsilon_{ij\alpha}) \quad (5.77)$$

Percebemos uma assimetria na forma (5.77) devido a introdução do tensor antisimétrico ϵ_{ijk} , e uma simetria nas formas (5.76) e (5.77). A recuperação de quantidades macroscópicas em integrais nos momentos hidrodinâmicos nos fornece apenas quantidades simétricas. Portanto uma vez estando \vec{B} ligado a uma forma assimétrica não poderá ser recuperado através de alguma ordem nos momentos hidrodinâmicos.

Precisamos de um momento independente e uma equação de evolução mesoscópica a parte. Para isso atentemos para a lei de indução magnética,

$$\vec{B} = \frac{1}{r^2} \vec{\xi} \times \hat{r} \quad (5.78)$$

onde \hat{r} é o raio vetor do ponto onde queremos medir \vec{B} e $\vec{\xi}$ é a velocidade da partícula que gera o campo \vec{B} no ponto de medida.

As velocidades $\vec{\xi}$ além de carregarem toda a informação termodinâmica, carregam também a informação do campo magnético. Devemos lembrar que a equação de transporte de Boltzmann é uma equação de fluxo de estados no espaço de fase e as colisões juntamente com as velocidades são os agentes responsáveis pela propagação da informação termodinâmica e eletromagnética¹⁰. Isto nos leva a sugerir que a mudança de estado no vetor indução magnético \vec{B} se propagará no espaço de fase, seguindo uma regra semelhante à propagação da informação termodinâmica através da mudança de estado dos vetores velocidade $\vec{\xi}$ no mesmo espaço. Deste modo P. Dellar sugere que a evolução do campo magnético \vec{B} respeite a equação vetorial de Boltzmann para o campo $\vec{g}(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$

¹⁰Quando falamos em "agente responsável pela propagação da informação eletromagnética" não estamos nos referindo à propagação da informação dos campos \vec{E} e \vec{B} , estamos nos referindo aos agentes que transportam o campo \vec{E} . A taxa com que os estados microscópicos irão evoluir é que causarão a evolução do campo \vec{B} .

$$\partial_t \vec{g} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} \vec{g} = -\frac{1}{\tau_m} (\vec{g} - \vec{g}^{(0)}) \quad (5.79)$$

De maneira que o campo magnético seja recuperado por um processo de média sobre o campo \vec{g} semelhante ao da densidade para o campo f ,

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \int \vec{g}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d^3 \xi \quad (5.80)$$

A observação de que a força magnética é não central, a princípio, poderia gerar algum tipo de preocupação, levando em conta que na dedução da equação de transporte de Boltzmann supomos que as forças de colisão entre as partículas eram centrais. A única analogia de que precisamos para sugerir uma equação de transporte para o campo \vec{g} , semelhante à equação de Boltzmann, é a de que a informação magnética se propaga de maneira semelhante à informação termodinâmica, o que é razoável uma vez que os agentes transportadores são os mesmos.

O comportamento macroscópico esperado para a Equação (5.79) é o da equação,

$$\partial_t \vec{B} = \vec{\nabla} \times (\vec{u} \times \vec{B} - \eta \vec{\nabla} \times \vec{B}) \quad (5.81)$$

Nos resta agora encontrar um operador de colisão que através do procedimento de Chapman Enskog recupere a Equação (5.81) através da Equação (5.79). Antes de fazermos isso, vamos explicitar as componentes da Equação (5.81) para podermos melhor identificar os termos a serem recuperados,

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times (\vec{u} \times \vec{B} - \eta \vec{\nabla} \times \vec{B}) &= \hat{e}_i \partial_i \times (\hat{e}_j u_j \times \hat{e}_k B_k - \eta \hat{e}_m \partial_m \times \hat{e}_n B_n) \\ &= \varepsilon_{i\alpha} \hat{e}_\alpha \partial_i (\varepsilon_{jkl} u_j B_k - \eta \varepsilon_{mnl} \partial_m B_n) \\ &= \hat{e}_\alpha \partial_i ((\delta_{\alpha j} \delta_{ik} - \delta_{ij} \delta_{\alpha k}) u_j B_k - \eta (\delta_{\alpha m} \delta_{in} - \delta_{im} \delta_{\alpha n}) \partial_m B_n) \\ &= \partial_i [(\hat{e}_\alpha u_\alpha) B_i - u_i (B_\alpha \hat{e}_\alpha) - \eta ((\hat{e}_\alpha \partial_\alpha) B_i - \partial_i (B_\alpha \hat{e}_\alpha))] \end{aligned} \quad (5.82)$$

E a componente α da Equação (5.81),

$$\partial_t B_\alpha = \partial_i (u_\alpha B_i - u_i B_\alpha - \eta (\partial_\alpha B_i - \partial_i B_\alpha)) \quad (5.83)$$

Levando em conta que $\vec{g} \equiv (g_x, g_y, g_z)$. Para facilitar a notação, vamos definir $g_\alpha \equiv g$ e consideraremos apenas uma das componentes da equação de transporte de Boltzmann vetorial,

$$\partial_t g + \xi_{i\alpha} \partial_\alpha g = -\frac{1}{\tau_m} (g - g^{(0)}) \quad (5.84)$$

O campo g desempenha um papel equivalente ao campo f na equação de transporte de Boltzmann do contínuo. Portanto podemos usar explicitamente todo o processo de discretização temporal, espacial e de velocidades desenvolvido até aqui na Equação (5.84).

Aplicando o procedimento de Chapman-Enskog para o campo g

$$\begin{aligned} \epsilon^0 : \Omega^{(0)} &= 0 \\ \epsilon^1 : \Omega^{(1)} &= \partial_{t_0} g^{(0)} + \xi_\alpha \partial_\alpha g^{(0)} \\ \epsilon^2 : \Omega^{(2)} &= \frac{1}{2} [\xi_\alpha \partial_\alpha \Omega^{(1)} + \partial_{t_0} \Omega^{(1)}] + \partial_{t_0} g^{(1)} + \partial_{t_1} g^{(0)} + \xi_\alpha \partial_\alpha g^{(1)} \end{aligned} \quad (5.85)$$

Operando com $\sum_{i=0}^b$ sobre a ordem ϵ^1 e ϵ^2 na equação acima,

$$\begin{aligned} \epsilon^1 : \partial_{t_0} b_\beta + \partial_\alpha \left(\sum_{i=0}^b \xi_{i\alpha} g_{i\beta}^{(0)} \right) &= 0 \\ \epsilon^2 : \partial_{t_1} b_\beta + \left(1 - \frac{1}{2\tau_m} \right) \partial_\alpha \left(\sum_{i=0}^b \xi_{i\alpha} g_{i\beta}^{(1)} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (5.86)$$

Somando as duas ordens,

$$\partial_t b_\beta + \partial_\alpha \left(\sum_{i=0}^b \xi_{i\alpha} g_{i\beta}^{(0)} \right) + \left(1 - \frac{1}{2\tau_m} \right) \partial_\alpha \left(\sum_{i=0}^b \xi_{i\alpha} g_{i\beta}^{(1)} \right) = 0 \quad (5.87)$$

Levando em conta que g desempenha o mesmo papel de f , podemos olhar para a soma,

$$\sum_{i=0}^b \xi_{i\alpha} g_{i\beta}^{(0)} \quad (5.88)$$

como uma projeção de g no espaço discreto $\mathcal{H}(\xi_i)$. Para facilitar a analogia vamos definir os momentos hidromagnéticos de equilíbrio,

$$a_{0\alpha, i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} = \sum_{i=0}^b \xi_{i i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} g_{i\alpha}^{(0)} \quad (5.89)$$

Assim podemos escolhe-los de maneira conveniente,

$$\begin{aligned} a_{0\beta}^{(0)} &= \sum_{i=0}^b g_{i\beta}^{(0)} = b_\alpha \\ a_{0\beta, \alpha}^{(1)} &= \sum_{i=0}^b \xi_{i\alpha} g_{i\beta}^{(0)} \equiv u_\alpha b_\beta - b_\alpha u_\beta \end{aligned} \quad (5.90)$$

Neste sentido a distribuição no equilíbrio pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} g_{i\beta}^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) &= w(\xi) \sum_{n=0}^1 a_{0\beta i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) \\ &= w(\xi) \left(a_{0\beta}^{(0)} \mathcal{H}^{(0)} + a_{0\beta, \alpha}^{(1)} \mathcal{H}_\alpha^{(1)} \right) \\ &= w(\xi) \left[b_\beta + a^2 \xi_\alpha (u_\alpha b_\beta - b_\alpha u_\beta) \right] \end{aligned} \quad (5.91)$$

onde,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(0)} &= 1 \\ \mathcal{H}_\alpha^{(1)} &= a \xi_\alpha \end{aligned} \quad (5.92)$$

Precisamos encontrar uma forma para $\Lambda_{\beta\alpha}^{(n)}$ de maneira a recuperar a Equação (5.83). Utilizando a primeira ordem em ϵ^1 na Equação (5.85),

$$-\frac{1}{\tau_m} \Lambda_{\gamma\beta}^{(1)} = \underline{\partial_{t_0} \Lambda_{\gamma\beta}^{(0)}} + \underline{\partial_\alpha \left(\sum_{i=0}^b g_{i\beta}^{(0)} \xi_{i\alpha} \xi_{i\gamma} \right)} \quad (5.93)$$

Nos resta agora calcular as quantidades sublinhadas acima. A segunda integral sublinhada na Equação (5.93) fica,

$$\sum_{i=0}^b \xi_{i\gamma} \xi_{i\alpha} g_{i\beta}^{(0)} = \frac{1}{a^2} \delta_{\gamma\alpha} b_\beta \quad (5.94)$$

e então,

$$\partial_\alpha \Lambda_{\alpha\beta}^{(1)} = -\tau_m \partial_\alpha \left[\frac{1}{a^2} \partial_\alpha b_\beta + \partial_{t_0} \Lambda_{\alpha\beta}^{(0)} \right] \quad (5.95)$$

Para completarmos com a descrição das equações eletromagnéticas, devemos colocar a derivada temporal $\partial_{t_0} \Lambda_{\alpha\beta}^{(0)}$ em função de derivadas espaciais usando as equações de movimento.

Usando a definição (5.90), a ordem ϵ^1 da Equação (5.85) e a equação de Euler podemos eliminar as derivadas temporais¹¹,

$$\begin{aligned} \partial_{t_0} \Lambda_{\alpha\beta}^{(0)} = & - \frac{b_\beta}{\rho} \partial_\alpha p - b_\beta u_k \partial_k u_\alpha + \epsilon_{\alpha mn} u_m b_n b_\beta \\ & + u_\alpha (\partial_k b_k u_\beta) - u_\alpha (\partial_k u_k b_\beta) \\ & + \frac{b_\alpha}{\rho} \partial_\beta p + b_\alpha u_k (\partial_k u_\beta) - \epsilon_{\beta mn} u_m b_n b_\alpha \\ & - u_\beta (\partial_k b_k u_\alpha) + u_\beta (\partial_k u_k b_\alpha) \end{aligned} \quad (5.96)$$

Os termos $O(ub^2) = O(bu^2) \sim O(Ma^3)$ são da ordem de Mach ao cubo e podemos reescrever (5.96),

$$\partial_{t_0} \Lambda_{\alpha\beta}^{(0)} = -\frac{b_\beta}{\rho} \partial_\alpha p + \frac{b_\alpha}{\rho} \partial_\beta p + O(Ma^3) \quad (5.97)$$

Levando em conta que $p = \rho e \sim O(u^2)$ podemos concluir que,

$$\partial_{t_0} \Lambda_{\alpha\beta}^{(0)} \sim O(Ma^3) \quad (5.98)$$

Desprezando os termos de ordem $O(Ma^3)$ a Equação (5.95) fica,

$$\partial_\alpha \Lambda_{\alpha\beta}^{(1)} = -\tau_m \partial_\alpha \left(\frac{1}{a^2} \partial_\alpha b_\beta \right) \quad (5.99)$$

E a Equação (5.87) fica,

¹¹Para o cálculo desta derivada temporal estamos usando explicitamente um modelo baseado na introdução da força de Lorentz na equação de Boltzmann $F_\alpha = \epsilon_{\alpha mn} \xi_m b_n$. As conclusões e os cálculos são análogos para o modelo baseado na modificação do segundo momento hidrodinâmico

$$\partial_t b_\beta + \partial_\alpha (u_\alpha b_\beta - b_\alpha u_\beta) + \left(1 - \frac{1}{2\tau_m}\right) \left(-\tau_m \partial_\alpha \frac{1}{a^2} b_\beta\right) \quad (5.100)$$

E utilizando $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$,

$$\partial_t B_\alpha = \partial_i (u_\alpha B_i - u_i B_\alpha - \eta(\partial_\alpha B_i - \partial_i B_\alpha)), \quad (5.101)$$

onde,

$$\eta = \frac{1}{a^2} \left(\tau_m - \frac{1}{2}\right) \quad (5.102)$$

Portanto a equação de transporte de Boltzmann vetorial reproduz o comportamento macroscópico das equações eletromagnéticas com um erro da ordem de $O(Ma^3)$.

Para este modelo estamos considerando as redes $D2V5$ e $D3V7$, com velocidades e pesos dados respectivamente,

$D2V5$:

$$\begin{aligned} w_0 : \quad & \vec{\xi}_0 = \{0, 0\}; \\ w_1 : \quad & \vec{\xi}_1 = \{1, 0\}; \vec{\xi}_2 = \{0, 1\}; \vec{\xi}_3 = \{-1, 0\}; \vec{\xi}_4 = \{0, -1\}; \\ & \{w_0, w_1, a\} = \left\{\frac{1}{3}, \frac{1}{6}, \sqrt{3}\right\}; \end{aligned}$$

e

$D3V7$:

$$\begin{aligned} w_0 : \quad & \vec{\xi}_0 = \{0, 0, 0\}; \\ w_0 : \quad & \vec{\xi}_1 = \{1, 0, 0\}; \vec{\xi}_2 = \{0, 1, 0\}; \vec{\xi}_3 = \{-1, 0, 0\}; \vec{\xi}_4 = \{0, -1, 0\}; \vec{\xi}_5 = \{0, 0, 1\}; \\ & \vec{\xi}_6 = \{0, 0, -1\}; \\ & \{w_0, w_1, a\} = \left\{0, \frac{1}{6}, \sqrt{3}\right\}; \end{aligned}$$

Podemos considerar os modelos postos até aqui como modelos de dois fluidos, onde um dos fluidos é o fluido hidrodinâmico e o outro um fluido magnético. O acoplamento entre os campos hidrodinâmicos \vec{u} e \vec{B} nas equações mesoscópicas é dado pelas distribuições de

equilíbrio $f^{(0)}$ e $g^{(0)}$ onde ambas compartilham dos campos \vec{u} e \vec{B} . No caso do modelo baseado na introdução de força de Lorentz na equação de Boltzmann, somamos a parte referente ao termo de força $\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_\xi f^{(0)}$ à distribuição de equilíbrio.

6 Validação dos modelos discretos

Desenvolvemos até o momento dois modelos cinéticos em magnetohidrodinâmica que diferem entre si na forma de introdução da força de Lorentz como termo fonte na equação de Navier Stokes. Buscaremos aqui a solução analítica para estes dois modelos para que por fim sejam comparados com os resultados numéricos.

Como um breve resumo colocaremos as equações mesoscópicas e macroscópicas que caracterizam ambos os modelos.

As equações diferenciais macroscópicas que caracterizam o modelo baseado na modificação do segundo modelo hidrodinâmico são,

$$\begin{aligned}
 \partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) &= 0 \\
 \partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha \left(\rho u_\alpha u_\beta - b_\alpha b_\beta + \left(p + \frac{1}{2} b^2 \delta_{\alpha\beta} \right) \right) - \mu \partial_\alpha \left[\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] - \rho \vec{F}_\beta &= 0 \\
 \partial_t (\rho e) + \vec{\nabla} \cdot (p \vec{u}) + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - \mu \left[(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) - \frac{D}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \delta_{\alpha\beta} \right] \partial_\alpha u_\beta &= 0 \\
 \partial_t b_\alpha + \partial_\beta [u_\beta b_\alpha - u_\alpha b_\beta + \eta (\partial_\alpha b_\beta - \partial_\beta b_\alpha)] &= 0
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

e as equações mesoscópicas, observando a mudança no segundo momento hidrodinâmico, que recuperam as equações acima são,

$$\begin{aligned}
 f_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \delta, t + \delta) - f_i(\vec{x}, t) &= -\frac{1}{\tau} \left(f_i(\vec{x}, t) - f_i^{(0)}(\vec{x}, t) \right) \\
 a_{0\alpha\beta}^{(2)} &= \rho u_\alpha u_\beta + p \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} b^2 \delta_{\alpha\beta} - b_\alpha b_\beta \\
 \vec{g}(\vec{x} + \vec{\xi}_i \delta, t + \delta) - \vec{g}(\vec{x}, t) &= -\frac{1}{\tau_m} \left(\vec{g}(\vec{x}, t) - \vec{g}^{(0)}(\vec{x}, t) \right)
 \end{aligned}$$

Para o modelo completo, temos o seguinte conjunto de equações diferenciais macroscópicas,

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) &= 0 \\
\partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta + p \delta_{\alpha\beta}) - \mu \partial_\alpha \left[\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] &= \rho (\vec{u} \times \vec{b})_\beta + \rho \vec{F}_\beta \\
\partial_t (\rho e) + \vec{\nabla} \cdot (p \vec{u}) + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - \mu \left[(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) - \frac{D}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \delta_{\alpha\beta} \right] \partial_\alpha u_\beta &= 0 \\
\partial_t b_\alpha + \partial_\beta [u_\beta b_\alpha - u_\alpha b_\beta + \eta (\partial_\alpha b_\beta - \partial_\beta b_\alpha)] &= 0
\end{aligned} \tag{6.2}$$

e as equações mesoscópicas que recuperam o modelo completo são,

$$\begin{aligned}
f_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \delta, t + \delta) - f_i(\vec{x}, t) + (\vec{\xi}_i \times \vec{b}) \cdot \vec{\nabla}_\xi f_i(\vec{\xi}_i, t) &= -\frac{1}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^{(0)}(\vec{\xi}_i, t)) \\
\vec{g}(\vec{x} + \vec{\xi}_i \delta, t + \delta) - \vec{g}(\vec{x}, t) &= -\frac{1}{\tau_m} (\vec{g}(\vec{x}, t) - \vec{g}^{(0)}(\vec{x}, t))
\end{aligned}$$

observando a introdução da força de Lorentz no termo de força de corpo da equação de Boltzmann.

A seguir veremos a solução analítica e os resultados numéricos para ambos os casos.

6.1 Escoamento de Hartmann

Abaixo discutiremos três soluções analíticas e seus resultados numéricos para os dois modelos. A primeira delas referente ao modelo baseado na modificação do segundo momento hidrodinâmico é bem conhecida na literatura de Lattice Boltzmann [1], [19], [20], [21]. As duas últimas soluções não são encontradas na literatura de Lattice Boltzmann.

6.1.1 Modelo baseado na mudança do segundo momento hidrodinâmico

O escoamento de Hartmann consiste no escoamento do fluido magnético em um canal e desempenha o mesmo papel do escoamento de Poiseuille na análise do perfil dos campos. Apesar de estarmos trabalhando com um modelo que recupera a equação da energia, restringiremos a validação, neste caso, ao caso não térmico, ou seja, manteremos o campo de temperatura e de pressão constantes ao longo de todo o domínio definido pelos campos magnético e hidrodinâmico.

O escoamento de Hartmann consiste na aplicação de uma força de corpo F_x forçando o escoamento ao longo da direção x em um canal de largura $2L$. Na direção transversal y

aplicamos um campo magnético constante $b_y = b_0$. Os campos \vec{u} e \vec{b} ficarão com um perfil do tipo $\vec{u} = (u_x(y), 0, 0)$ e $\vec{b} = (b_x(y), b_0, 0)$. As condições de contorno para os campos \vec{u} e \vec{b} são a de velocidade e campo magnético nulos nas paredes $u_x(L) = u_x(-L) = 0$ e $b_x(L) = b_x(-L) = 0$.



Figura 7: Fenomenologia para o escoamento do fluido magnético em um canal bidimensional.

Para estas condições de contorno e perfis, as equações diferenciais (6.1) se resumem a,

$$\begin{aligned} \rho\mu \frac{d^2u}{dx^2} + b_0 \frac{db}{dx} + F &= 0, \\ b_0 \frac{du}{dx} + \eta \frac{d^2b}{dx^2} &= 0. \end{aligned} \quad (6.3)$$

A solução analítica para o conjunto acoplado de equações diferenciais (6.3) é,

$$\begin{aligned} b(y) &= \frac{FL}{b_0} \left(\frac{\sinh(\frac{Hy}{L})}{\sinh(H)} - \frac{y}{L} \right) \\ u(y) &= \frac{FL}{\sqrt{\rho}b_0} \sqrt{\frac{\eta}{\mu}} \coth(H) \left(1 - \frac{\cosh(\frac{Hy}{L})}{\cosh(H)} \right) \end{aligned} \quad (6.4)$$

onde H é o número de Hartmann,

$$H \equiv \frac{b_0L}{\sqrt{\rho\eta\mu}} \quad (6.5)$$

As simulações estão de acordo com os resultados analíticos. Ambos os perfis, hidrodinâmico e magnético, podem ser verificados nos gráficos a seguir,

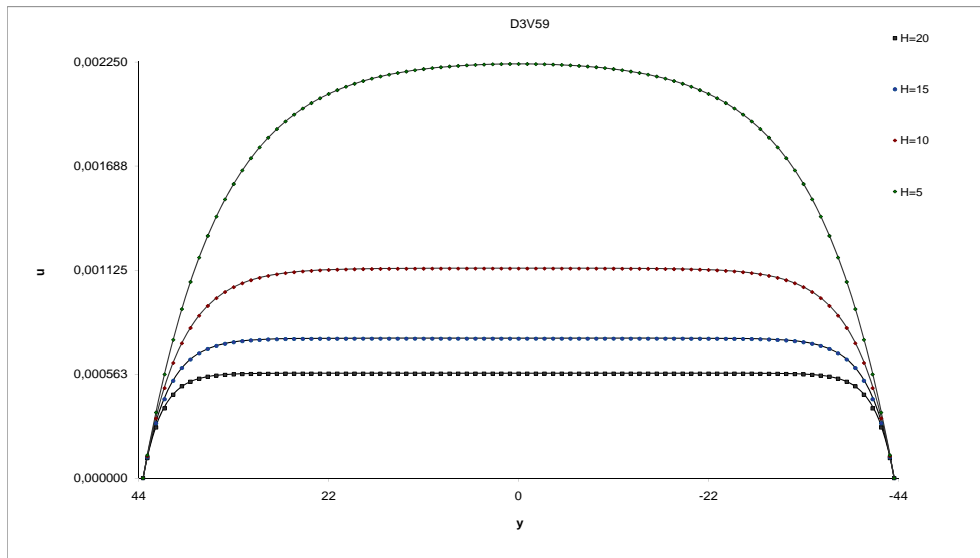


Figura 8: Perfil do campo hidrodinâmico: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através de uma modificação no segundo momento hidrodinâmico. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos.

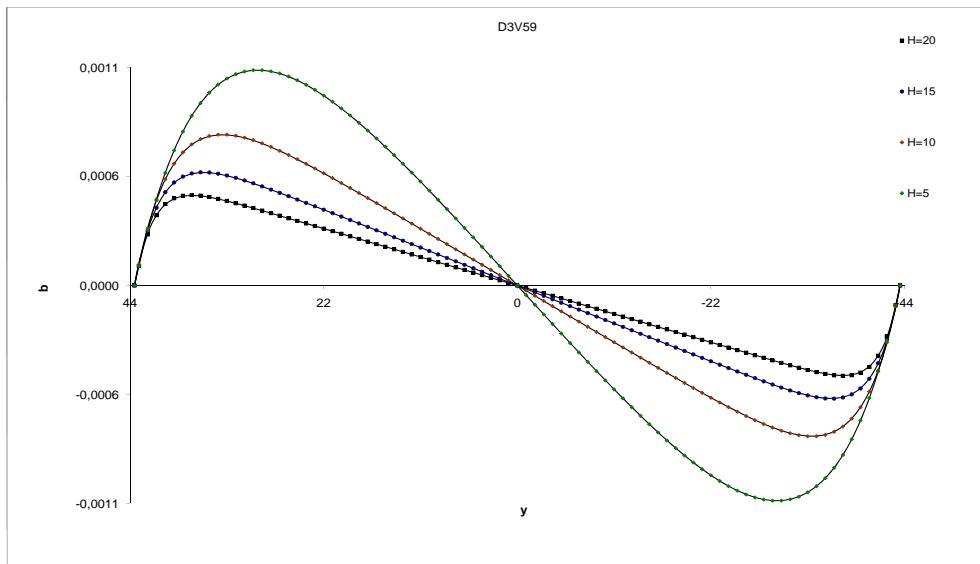


Figura 9: Perfil do campo magnético: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através de uma modificação no segundo momento hidrodinâmico. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos.

Para esta simulação foram mantidas fixas a viscosidade $\mu = 0,166667$, a resistividade magnética $\eta = 0,166667$, a densidade $\rho = 1$, a força de corpo $F = 10^{-6}$ e o tamanho do canal $L = 44$ sítios de fluido na direção y e 1 sítio de fluido na direção x . O campo magnético constante $b_y = b_0$ variou para a obtenção dos diversos números de Hartmann H .

Para as próximas simulações os mesmos parâmetros μ, η, ρ, F, L serão mantidos fixos e b_0 irá variar de acordo com o H requerido.

6.1.2 Modelo completo

Para o segundo modelo (6.2) os parâmetros de simulação e as condições de contorno foram mantidas, porém este admite solução analítica em três dimensões.

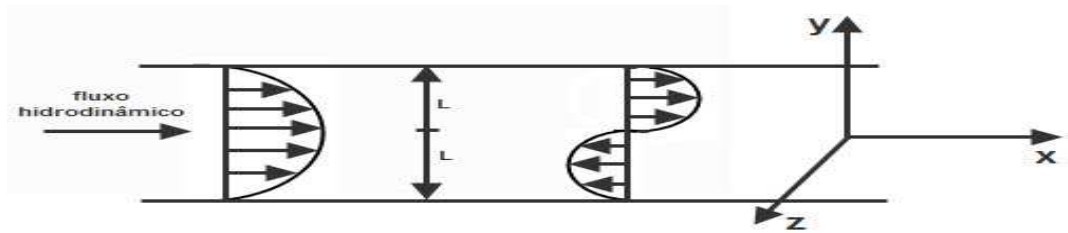


Figura 10: *Fenomenologia para o escoamento do fluido magnético em um canal tridimensional.*

Aplicando um campo magnético constante b_0 na direção y , e uma força de corpo F_x na direção x esperamos que os campos assumam o perfil, $\vec{b} = (b_x(y), b_0, b_z(y))$ e $\vec{u} = (u_x(y), 0, u_z(y))$ e o conjunto de equações (6.2) formam o seguinte sistema de equações diferenciais acopladas,

$$\begin{aligned} -F_x - \mu \partial_y^2 u_x &= -\rho u_z b_y & -b_0 \partial_y u_x - \eta \partial_y^2 b_x &= 0 \\ -F_z - \mu \partial_y^2 u_z &= \rho u_x b_y & -b_0 \partial_y u_z - \eta \partial_y^2 b_z &= 0 \end{aligned}$$

que admitem solução,

$$u_x(y) \equiv u = \frac{F}{\rho b_0} \left[1 + \frac{2\text{sen}(H)\text{senh}(H)}{\cos(2H) + \cosh(2H)} \left(\cos\left(\frac{Hy}{L}\right) \cosh\left(\frac{Hy}{L}\right) - \text{sen}\left(\frac{Hy}{L}\right) \text{senh}\left(\frac{Hy}{L}\right) \right) - \frac{2\cos(H)\cosh(H)}{\cos(2H) + \cosh(2H)} \left(\cos\left(\frac{Hy}{L}\right) \cosh\left(\frac{Hy}{L}\right) + \text{sen}\left(\frac{Hy}{L}\right) \text{senh}\left(\frac{Hy}{L}\right) \right) \right]$$

$$u_z(y) \equiv v = \frac{F}{\rho b_0} \left[-1 + \frac{2\text{sen}(H)\text{senh}(H)}{\cos(2H) + \cosh(2H)} \left(\cos\left(\frac{Hy}{L}\right) \cosh\left(\frac{Hy}{L}\right) + \text{sen}\left(\frac{Hy}{L}\right) \text{senh}\left(\frac{Hy}{L}\right) \right) + \frac{2\cos(H)\cosh(H)}{\cos(2H) + \cosh(2H)} \left(\cos\left(\frac{Hy}{L}\right) \cosh\left(\frac{Hy}{L}\right) - \text{sen}\left(\frac{Hy}{L}\right) \text{senh}\left(\frac{Hy}{L}\right) \right) \right]$$

$$b_x(y) \equiv b = \frac{F}{\eta\rho^{3/2}} \sqrt{\frac{2\mu}{b_0}} \frac{\text{sen}(2H)}{\cos(2H) + \cosh(2H)} \left[-\frac{x}{L} + \csc(H) \cosh(H) \cosh\left(\frac{Hy}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{Hy}{L}\right) - \sec(H) \text{senh}(H) \cos\left(\frac{Hy}{L}\right) \text{senh}\left(\frac{Hy}{L}\right) \right]$$

$$b_z(y) \equiv w = -\frac{F}{\eta\rho^{3/2}} \sqrt{\frac{2\mu}{b_0}} \frac{\text{sen}(2H)}{\cos(2H) + \cosh(2H)} \left[-\frac{x}{L} + \cos(H) \text{csch}(H) \cos\left(\frac{Hy}{L}\right) \text{senh}\left(\frac{Hy}{L}\right) + \text{sech}(H) \text{sen}(H) \cosh\left(\frac{Hy}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{Hy}{L}\right) \right]$$

onde $F = F_x = F_z$, e o número de Hartmann é dado por,

$$H = L \sqrt{\frac{\rho b_0}{2\mu}} \quad (6.6)$$

Os gráficos comparativos entre o perfis analítico e simulado podem ser visualizados abaixo.

Para as componentes x e z do campo hidrodinâmico temos,

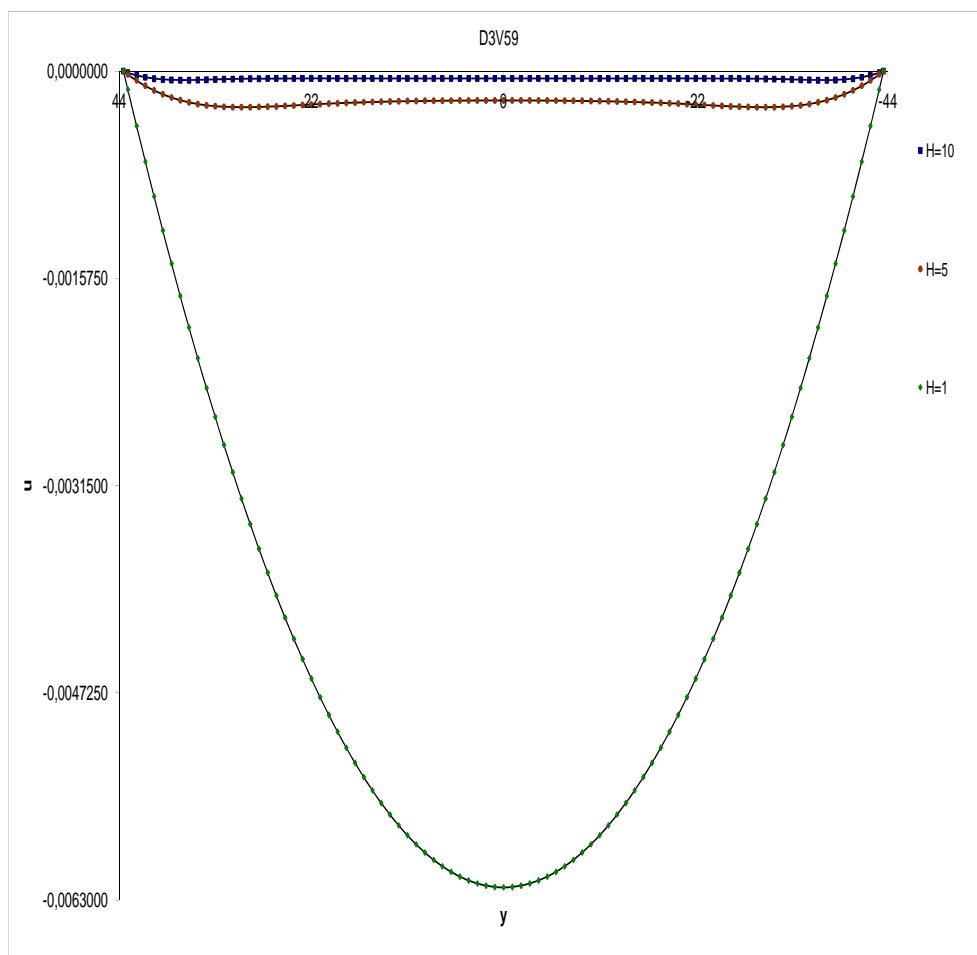


Figura 11: Perfil da componente x do campo hidrodinâmico: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através do termo de força de corpo na equação de Boltzmann. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos.

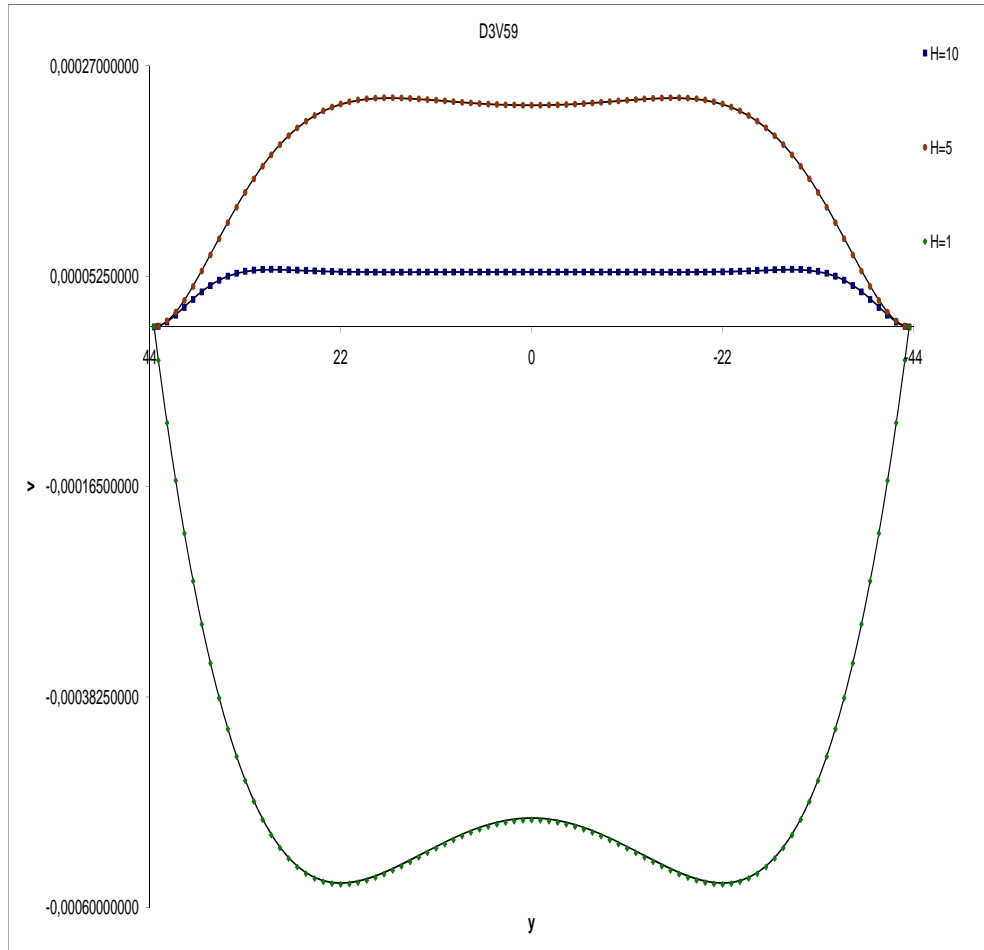


Figura 12: Perfil da componente z do campo hidrodinâmico: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através do termo de força de corpo na equação de Boltzmann. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos.

Para as componentes x e z do campo magnético temos,

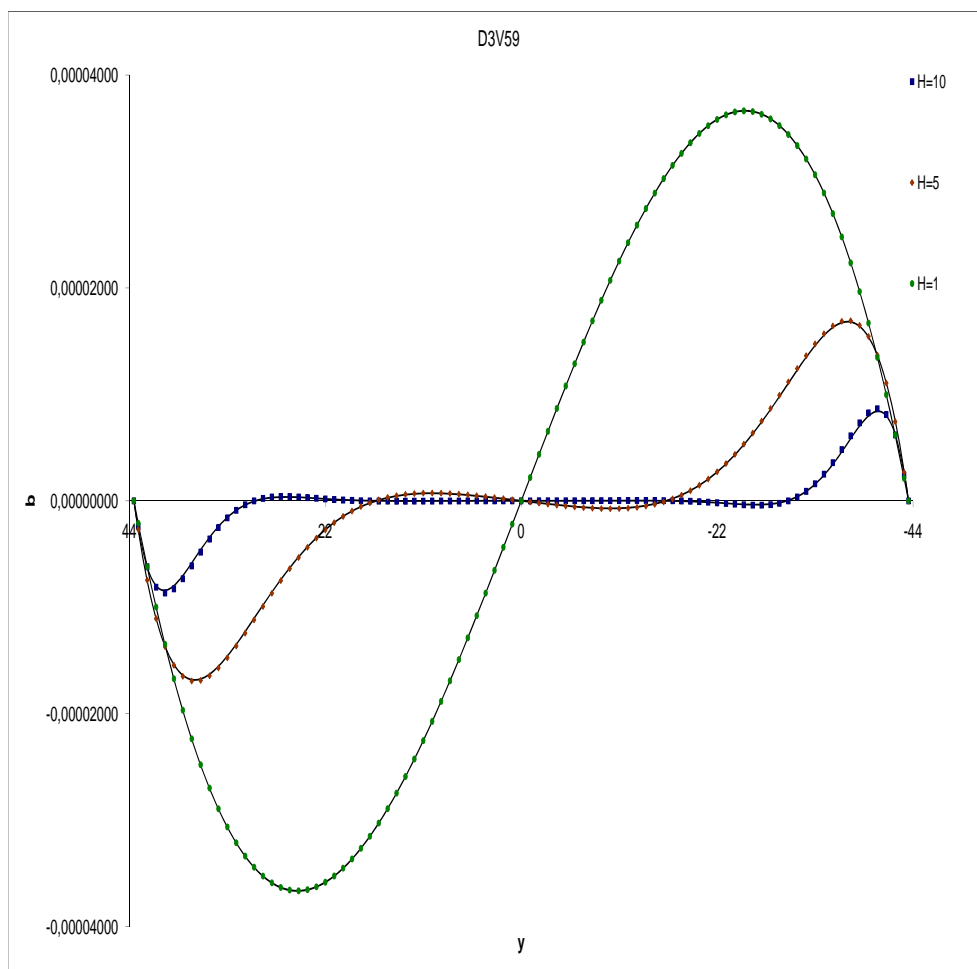


Figura 13: Perfil da componente x do campo magnético: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através do termo de força de corpo na equação de Boltzmann. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos.

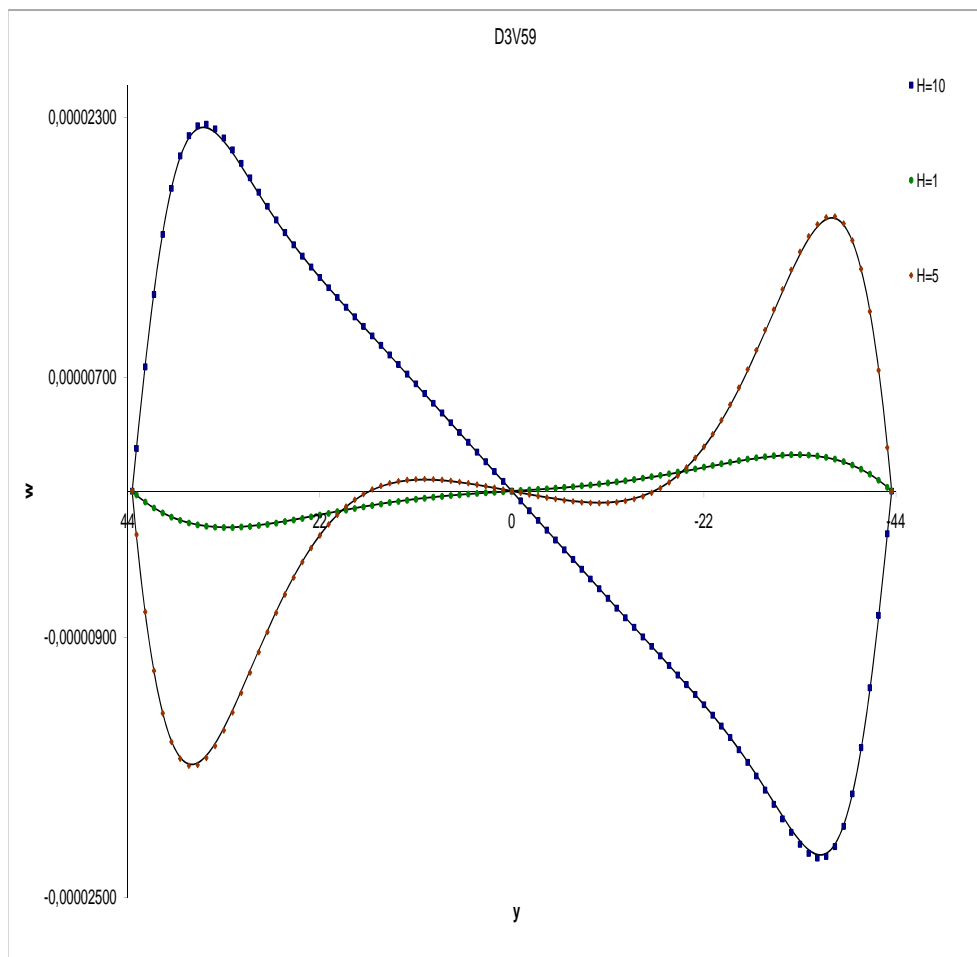


Figura 14: Perfil da componente x do campo magnético: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através do termo de força de corpo na equação de Boltzmann. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos.

Para visualizarmos melhor as componentes x e z de campo hidrodinâmico e magnético para $H = 5$ e $H = 10$ ampliamos os gráficos nesta região,

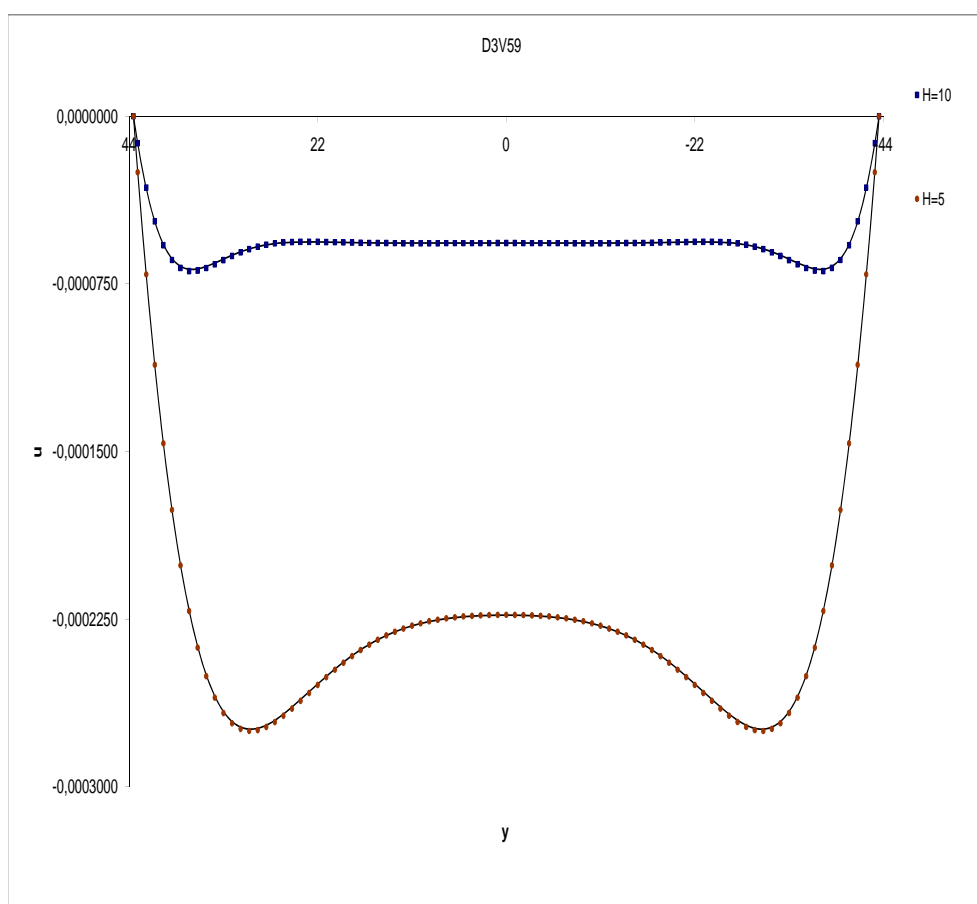


Figura 15: Perfil da componente x do campo hidrodinâmico: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através do termo de força de corpo na equação de Boltzmann. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos.

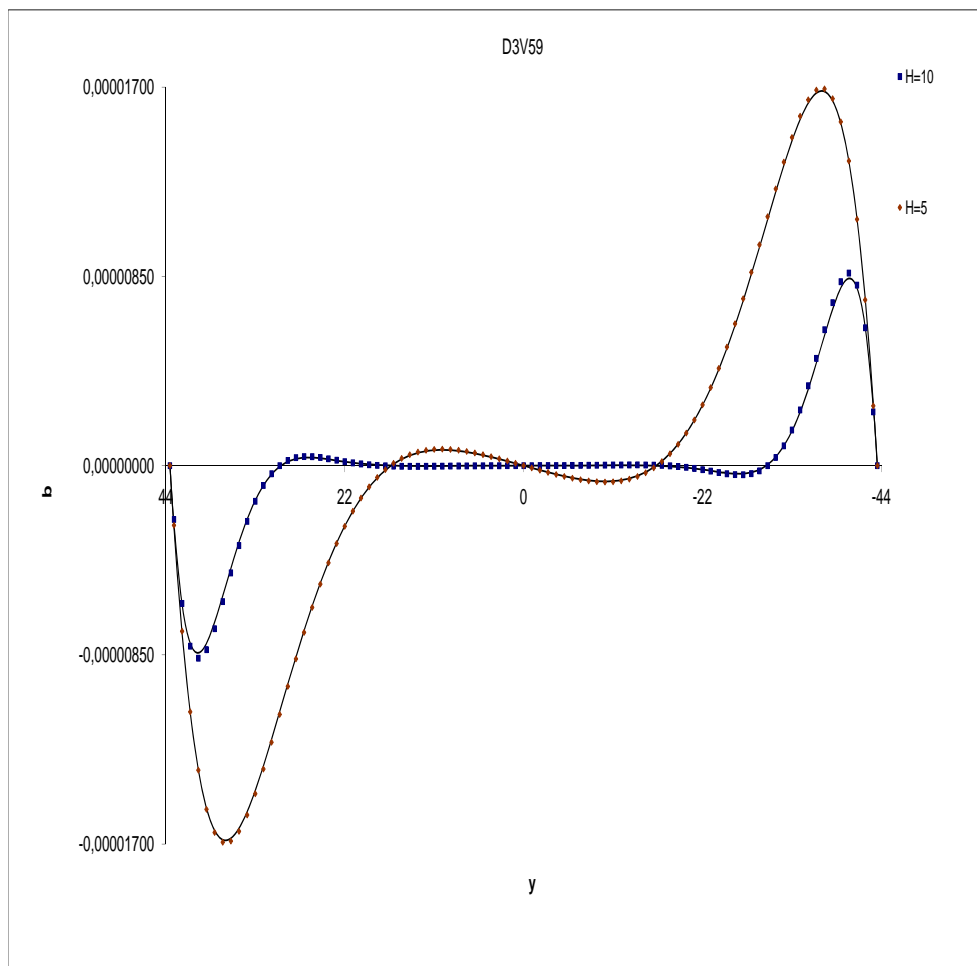


Figura 16: Perfil da componente x do campo magnético: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através do termo de força de corpo na equação de Boltzmann. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos.

6.1.3 Modelo completo modificado

Com o intuito de projetar os campos em duas dimensões, desacoplando os campos hidrodinâmicos, exploramos uma solução não física, porém analítica fazendo $\vec{u} \rightarrow \vec{u} \times \vec{B}$ no termo de acoplamento $\vec{u} \times \vec{B}$ do modelo (6.2) ou seja,

$$\vec{u} \times \vec{B} \rightarrow (\vec{u} \times \vec{B}) \times \vec{B} \quad (6.7)$$

Aplicando esta modificação, consegue-se o seguinte conjunto de equações diferenciais,

$$\begin{aligned} \mu \frac{d^2 u}{dx^2} - \rho u b_0^2 + F &= 0, \\ \frac{du}{dx} b_0 + \eta \frac{d^2 b}{dx^2} &, \end{aligned} \quad (6.8)$$

com solução analítica,

$$b(x) = \tanh(\mathcal{H}) \frac{F \sqrt{\mu}}{\eta \rho^{3/2} b_0^2} \left[\frac{\sinh(\frac{\mathcal{H}x}{L})}{\sinh(\mathcal{H})} - \frac{x}{L} \right], \quad (6.9)$$

$$u(x) = \frac{F}{\rho b_0^2} \left[1 - \frac{\cosh(\frac{\mathcal{H}x}{L})}{\cosh(\mathcal{H})} \right], \quad (6.10)$$

onde \mathcal{H} ,

$$\mathcal{H} \equiv b_0 L \sqrt{\frac{\rho}{\mu}} \quad (6.11)$$

Os resultados numéricos estão de acordo com os analíticos e podem ser visualizados abaixo,

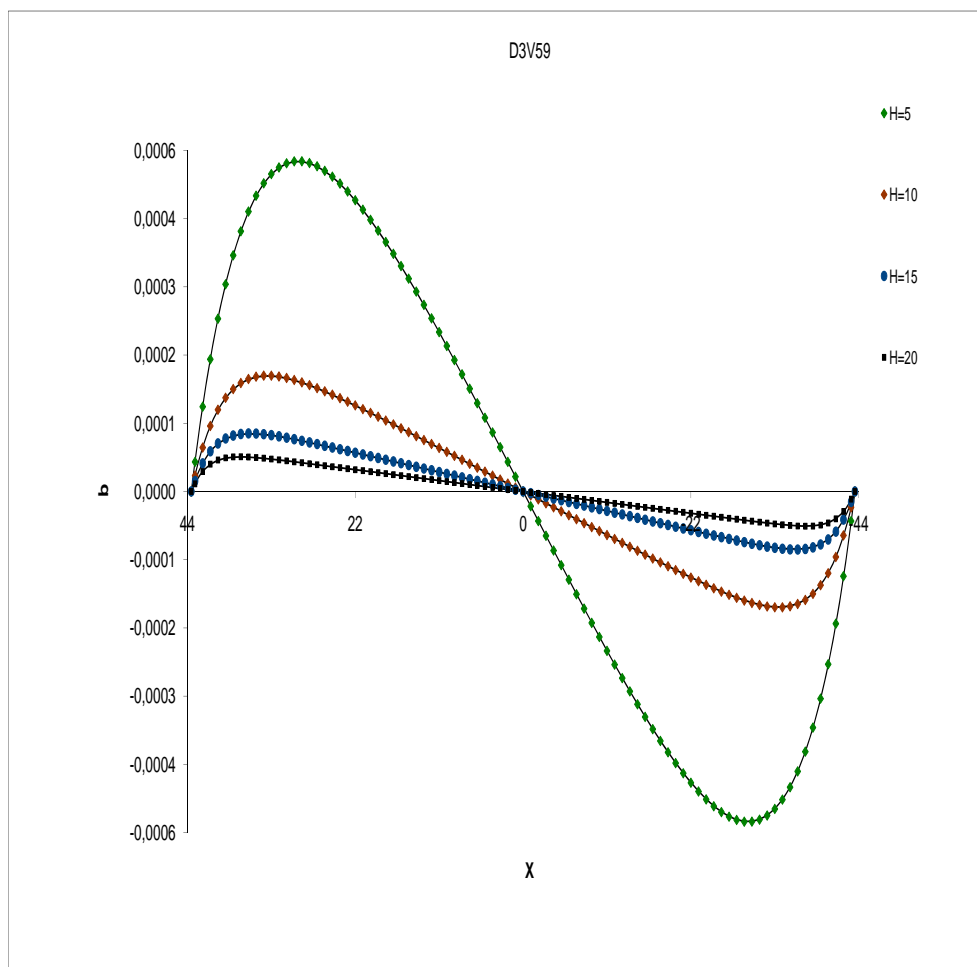


Figura 17: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através do termo de força de corpo na equação de Boltzmann. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos. Dos campos mais intensos para os menos intensos temos um acréscimo no número de Hartmann

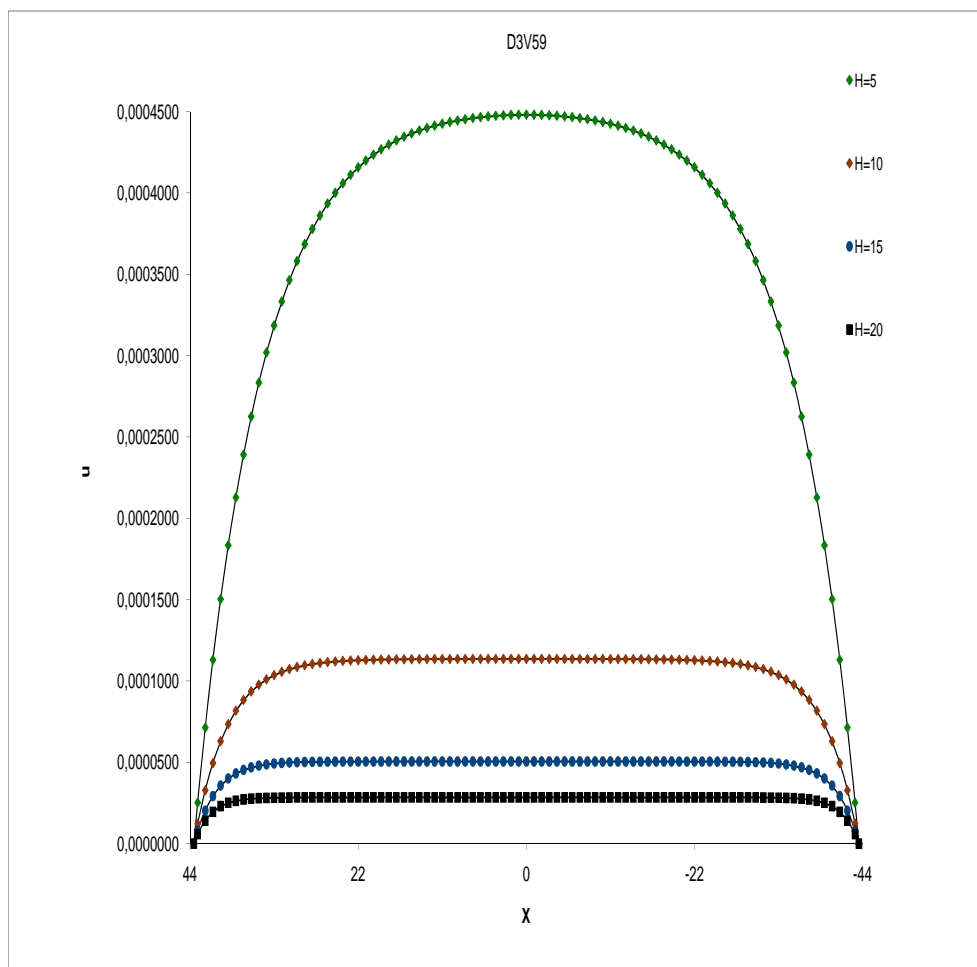


Figura 18: Modelo baseado na introdução da força de Lorentz através do termo de força de corpo na equação de Boltzmann. As linhas cheias representam os resultados analíticos e os pontos os resultados numéricos. Dos campos mais intensos para os menos intensos temos um acréscimo no número de Hartmann

7 *Conclusões e trabalhos futuros*

Com base no trabalho proposto por Paul J. Dellar [1], Philippi [2] e Shan [3] foram desenvolvidos dois modelos térmicos para plasma que diferem entre si na forma de introdução da força de Lorentz. O primeiro modelo, o qual estamos chamando de modelo clássico, é o mais comumente encontrado na literatura em geral. É baseado na introdução da força de Lorentz como uma modificação no segundo momento hidrodinâmico. Este modelo foi primeiramente proposto por Dellar [1] para uma rede $D2V9$ onde o autor comenta a impossibilidade da recuperação da equação da energia pela existência de termos espúrios vindos da alteração do momento hidrodinâmico de segunda ordem. A extensão da rede $D2V9$ para a rede $D2V25$ e $D3V59$ não é o bastante para a eliminação dos termos espúrios que têm como origem a modificação do segundo momento hidrodinâmico. Para isso foi necessário somar às distribuições de equilíbrio $D2V9$ e $D3V59$ um termo proporcional ao momento de quarta ordem com uma constante a determinar. O ajuste desta constante permitiu a eliminação dos termos espúrios sem alterar a recuperação dos momentos de ordem inferior, o que permitiu a recuperação da equação da energia.

O segundo modelo, que chamamos de modelo convencional, foi construído sob as mesmas redes $D2V25$ e $D3V59$ porém introduzindo a força de Lorentz $\vec{F} = \vec{\xi} \times \vec{B}$ explicitamente no termo de força $\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\xi}$ da equação de Boltzmann, o que colabora com uma abordagem mais realista para modelos em plasma.

Antes dos trabalhos de Philippi e Shan não existia uma forma sistemática, e bem fundamentada do ponto de vista da teoria cinética, para a construção de modelos térmicos e para a introdução de forças de corpo em modelos cinéticos discretos. Do ponto de vista da construção de modelos térmicos Philippi propõe a construção de redes mínimas com base na recuperação dos momentos incompletos $c^2 c_{\alpha} c_{\beta}$ de quarta ordem que são suficientes para a recuperação dos momentos Maxwellianos de quarta ordem sem comprometer a recuperação do vetor fluxo de calor \vec{q} . Neste sentido foram propostas as redes $D2V25$ e $D3V59$. No trabalho de Shan encontramos uma forma sistemática de introduzir força de corpo sem qualquer prejuízo na obtenção dos momentos Maxwellianos, o que preserva a

recuperação da termohidrodinâmica.

Uma extensão imediata para esses modelos seria a abordagem de dois fluidos, o que certamente acarretaria na recuperação do termo de efeito Joule na equação da energia.

Podemos ainda estar explorando os modelos propostos aqui do ponto de vista computacional. Resultados numéricos, e de grande interesse para a astrofísica por exemplo, são as ondas de Alfvén. As ondas de Alfvén são ondas que se propagam em um plasma sob influência de campos magnéticos com interesse especial no transporte de energia e no aquecimento do plasma, e desempenham por exemplo, um papel importante na aceleração dos ventos solares.

Modelos em plasma, sob o ponto de vista da teoria cinética discreta, ainda são pouco explorados. Com a sistematização da obtenção das redes térmicas e da introdução de termos de força de corpo nos modelos de Lattice Boltzmann poderemos buscar novas formas de abordagem.

Referências

- [1] Paul J. Dellar. Lattice kinetic schemes for magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 179:95–126, 2002.
- [2] Paulo C. Philippi, Luiz A. Hegele Jr, Luís O. E. dos Santos, and Rodrigo Surmas. From the continuous to the lattice-boltzmann equation: the discretization problem and thermal models. *Physical Review E* 73, 056702, 2006.
- [3] Xue-Feng Yuan Xiaowen Shan and Hudong Chen. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the navier-stokes equation. *J. Fluid Mech*, 550:413–441, 2006.
- [4] Abraham C, L Chian, and Michael F Reusch. Física de plasma. In *Universidade Federal Fluminense*, 1978.
- [5] Frederick J. Milford John R. Reitz and Robert W. Christy. *Fundamentos da Teoria Eletromagnética*. Editora Campus, 7 Edição.
- [6] Richard L. Liboff. *Kinetic Theory: Classical, Quantum, and Relativistic Descriptions*. Springer, 2003.
- [7] Paul G. Slade, editor. *Electrical Contacts*. Marcel Dekker, 1999.
- [8] Jr. Frederick W. Byron and Robert W. Fuller. *Mathematics of Classical and Quantum Physics*. Dover, 1992.
- [9] Rutherford Aris. *Vectors, Tensors, and Equations of Fluid Mechanics*. Dover Publications, INC, 1989.
- [10] Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, Second Edition, 1987.
- [11] G. M. Kremer. *Uma Introdução a Equação de Boltzmann*. Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Junho de 2003.
- [12] Carlos Enrique Pico Ortiz. *Aplicação das Formas Discretas da Equação de Boltzmann à Termo-hidrodinâmica de Misturas*. PhD thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.
- [13] Carlo Cercignani. *Mathematical Methods In Kinetic Theory*. Plenum Press, 1969.
- [14] B. Samuel Tanenbaum. *Plasma Physics*. McGram-Hill, 1967.
- [15] Diogo Nardelli Siebert. Modelo de boltzmann para redes para simulação de fluidos não-ideais com transição de fase. Exame de qualificação de doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2008.

- [16] Luís Orlando Emerich dos Santos. Um método alternativo para simulação de suspensões. Monografia apresentada em concurso público para enquadramento funcional de professor adjunto, Universidade Federal de Santa Catarina, 2009.
- [17] Luiz A. Hegele Jr. *Lattice Boltzmann models for thermal flows*. PhD thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, 2010.
- [18] Lin Zheng Zhenhua Chai, BaoChang Shi. A unified lattice boltzmann model for some nonlinear partial differential equation. *Chaos Solitons & Fractals*, 36:874–882, 2008.
- [19] Werner Schaffemberger and Arnold Hanslmeier. Two dimensional lattice boltzmann model for magnetohydrodynamics. *Physical Review E*, 66, 2002.
- [20] Huayu Li and Hyungson Ki. Simulation of mhd flows using a hybrid lattice-boltzmann finite-difference method. *Communication Computational Physics*, 4:337–349, 2008.
- [21] M. Mendoza and J.D.Muñoz. Three-dimensional lattice boltzmann model for magnetic reconnection. *Physical Review E*, 77, 2008.
- [22] Eugene Butkov. *Física Matemática*. Addison-Wesley Publishing Company, 1968.
- [23] Xiaoyi He and Li-Shi Luo. A priori derivation of the lattice boltzmann equation. *Physical Review E*, Vol. 55, No. 6, 1997.
- [24] Diogo Nardelli Siebert. Análise de forms discretas da equação de boltzmann para problemas térmicos bi-dimensionais. Master's thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.

APÊNDICE A – Colisões Binárias

Consideremos a colisão entre duas partículas eletricamente neutras [11] localizadas pelas posições \vec{r}_1 e \vec{r}_2 com relação a uma origem O e \hat{r} o versor unitário radial. Desprezando as forças externas durante o momento da colisão, a equação de movimento para as duas partículas durante o processo de colisão é dada por,

$$m\ddot{\vec{r}}_1 = -\frac{\partial\varphi(\vec{r})}{\partial\vec{r}_1}\hat{r} \quad (\text{A.1})$$

$$m\ddot{\vec{r}}_2 = -\frac{\partial\varphi(\vec{r})}{\partial\vec{r}_2}\hat{r} = \frac{\partial\varphi(\vec{r})}{\partial\vec{r}_1}\hat{r} \quad (\text{A.2})$$

e um potencial

$$\lim_{|\vec{r}|\rightarrow+\infty}\varphi(\vec{r}) = 0 \quad (\text{A.3})$$

de alcance finito e esfericamente simétrico.

Na colisão binária as velocidades assintóticas pré-colisionais serão definidas como $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}_1$, as velocidades pós-colisionais como $\vec{\xi}'$ e $\vec{\xi}'_1$, e as velocidades relativas pré e pós-colisionais respectivamente definidas como $\vec{g} = \vec{\xi}_1 - \vec{\xi}$ e $\vec{g}' = \vec{\xi}'_1 - \vec{\xi}'$

Somando as equações (A.1), (A.2) e integrando-as, conseguimos a conservação do momento linear

$$m\vec{\xi} + m\vec{\xi}_1 = m\vec{\xi}' + m\vec{\xi}'_1 \quad (\text{A.4})$$

Multiplicando as equações (A.1) e (A.2) por m e fazendo a diferença entre elas, conseguimos

$$\mu\ddot{\vec{r}} = -\frac{\partial\varphi(\vec{r})}{\partial r}\hat{r} \quad (\text{A.5})$$

onde $\mu = \frac{m}{2}$ é a massa reduzida e $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$.

Multiplicando escalarmente (A.5) por $\dot{\vec{r}}$, conseguimos

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \mu (\dot{\vec{r}})^2 + \varphi(\vec{r}) \right) = 0 \quad (\text{A.6})$$

que é a conservação da energia mecânica.

Para conseguirmos a conservação da quantidade de movimento angular, multiplicaremos vetorialmente a Equação (A.5) por \vec{r} ,

$$\mu \dot{\vec{r}} \times \vec{r} = - \frac{\partial \varphi}{\partial r} \hat{r} \times \vec{r} \quad (\text{A.7})$$

e então,

$$\frac{d}{dt} (\mu \dot{\vec{r}} \times \vec{r}) = 0 \quad (\text{A.8})$$

Integrando (A.6) no tempo,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \mu (\dot{\vec{r}})^2 + \varphi(\vec{r}) \right) dt = \left(\frac{1}{2} \mu (\dot{\vec{r}})^2 + \varphi(\vec{r}) \right) \Big|_{t \rightarrow -\infty}^{t \rightarrow +\infty} \quad (\text{A.9})$$

e levando em conta que $t \rightarrow \pm\infty \Rightarrow \varphi(r) = 0$, conseguimos

$$\frac{1}{2} \mu (\dot{\vec{r}})^2 \Big|_{t \rightarrow -\infty}^{t \rightarrow +\infty} = \frac{1}{2} \mu (\dot{\vec{r}}_2 - \dot{\vec{r}}_1)^2 \Big|_{t \rightarrow -\infty}^{t \rightarrow +\infty} = \frac{1}{2} \mu (\vec{g}')^2 - \frac{1}{2} \mu (\vec{g})^2 = 0 \quad (\text{A.10})$$

onde $-\infty$ antes da colisão e $+\infty$ depois da colisão, ou seja

$$|\vec{g}'| = |\vec{g}| \quad (\text{A.11})$$

o módulo das velocidades relativas pré-colisionais e pós-colisionais são iguais.

Usando a conservação da quantidade de movimento angular, Equação (A.8) conseguimos,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dt} (\mu \dot{\vec{r}} \times \vec{r}) dt = (\mu \dot{\vec{r}} \times \vec{r}) \Big|_{t \rightarrow -\infty}^{t \rightarrow +\infty} \quad (\text{A.12})$$

e então conseguimos,

$$\mu \dot{\vec{r}} \times \vec{r} \Big|_{t=-\infty} = \mu \dot{\vec{r}} \times \vec{r} \Big|_{t=+\infty} \quad (\text{A.13})$$

a quantidade de movimento angular antes da colisão é o mesmo após a colisão, portanto a colisão ocorre em um plano. Por outro lado, a interação entre esferas rígidas é uma interação de força central, $\vec{F} = f\hat{r}$, onde $f = f(x, y, z)$ é um campo qualquer, e então,

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = f\hat{r} \times r\hat{r} = 0 \quad (\text{A.14})$$

onde $\vec{L} = \vec{r} \times r\hat{r}$ é a quantidade de movimento angular. E da mesma forma $\vec{L} = \text{constante}$ e a colisão ocorre em um plano.

APÊNDICE B - Função Delta de Dirac

Podemos definir [22] a função delta de Dirac como sendo uma função infinitamente concentrada na origem,

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases}$$

de forma que a integral,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (\text{B.1})$$

seja a identidade. E para uma função $f(x)$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0) \quad (\text{B.2})$$

Para uma carga puntual, podemos escrever

$$\rho(r) = q\delta(r) \quad (\text{B.3})$$

de forma que,

$$\int \rho dv = \int q\delta(r) dv = q \quad (\text{B.4})$$

Considerando a lei de Gauss (2.11), podemos concluir que

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{r}}{r^3} \right) = 4\pi\delta(r) \quad (\text{B.5})$$

APÊNDICE C – Meios deformáveis

Na dinâmica de meios deformáveis o cálculo da dilatação de um volume de controle é muito usado, e vale algumas observações.

C.1 Dilatação de um volume de controle

Seja um elemento de volume de controle [9] definido sobre a coordenada \vec{x} . Consideremos a dilatação deste volume em uma outra região do domínio do fluido sob a nova coordenada $\vec{\xi}$. A mudança de variável que caracteriza a dilatação deste volume é dada por,

$$dv = \frac{\partial(x_1, x_2, x_3)}{\partial(\xi_1, \xi_2, \xi_3)} d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 = J dv_0 \quad (\text{C.1})$$

onde $J = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k}$ é o jacobiano da transformação $\vec{x} \rightarrow \vec{\xi}$, e v_0 o volume inicial de referência. Queremos encontrar $\frac{dv}{dt}$.

$$\frac{dv}{dt} = \frac{dJ}{dt} dv_0 \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{dJ}{dt} = \varepsilon_{ijk} \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \right) \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} + \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \right) \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} + \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} \right) \quad (\text{C.3})$$

Lembrando que a dependência nas variáveis \vec{x} e $\vec{\xi}$ são,

$$\vec{x} = \vec{x}(\vec{\xi}, t) \quad \vec{\xi} = \vec{\xi}(\vec{x}, t) \quad (\text{C.4})$$

Levando em conta que $\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \xi_i} = \frac{\partial}{\partial \xi_i} \frac{d}{dt}$,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} = \frac{\partial}{\partial \xi_i} \frac{d}{dt} x_1 \Big|_{\xi} = \frac{\partial u_1}{\partial \xi_i} \quad (\text{C.5})$$

E então conseguimos,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} = \frac{\partial u_1}{\partial \xi_i} = \sum_k \frac{\partial u_1}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial \xi_i} \quad (\text{C.6})$$

Substituindo este último resultado em $\frac{dJ}{dt}$ conseguimos

$$\frac{dJ}{dt} = \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_w} \frac{\partial v_2}{\partial \xi_i} \frac{\partial v_3}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} + \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \frac{\partial v_2}{\partial x_w} \frac{\partial v_3}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} + \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial v_3}{\partial x_w} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} \right) \quad (\text{C.7})$$

Lembrando que o traço do produto de um tensor antissimétrico por um tensor simétrico é nulo,

$$\varepsilon_{ijk} \frac{\partial v_1}{\partial x_w} \frac{\partial x_w}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} \quad (\text{C.8})$$

pois

$$\varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} = 0 \quad (\text{C.9})$$

continuando,

$$\frac{dJ}{dt} = \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} + \frac{\partial v_3}{\partial x_3} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} \right) \quad (\text{C.10})$$

$$\frac{dJ}{dt} = \varepsilon_{ijk} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \frac{\partial v_3}{\partial x_3} \right) \frac{\partial x_1}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_j} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_k} \quad (\text{C.11})$$

e finalmente,

$$\frac{dJ}{dt} = J \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \frac{\partial v_3}{\partial x_3} \right) = (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) J \quad (\text{C.12})$$

ou seja

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dJ}{dt} = 0 \quad (\text{C.13})$$

C.2 Teorema de transporte de Reynolds

Seja uma quantidade $F(\vec{x}, t)$ definida sobre todo o domínio do fluido. Seja um volume de controle dependente do tempo t definido sobre uma região deste mesmo domínio. Queremos encontrar a variação total no tempo da quantidade $F(\vec{x}, t)$ definida sobre o volume de controle $V(t)$,

$$W(t) = \int_{V(t)} F(\vec{x}, t) dv = \int_{v_0} F(\vec{x}(\vec{\xi}, t) J(t)) dv_0 \quad (\text{C.14})$$

ou seja, tiramos a dependência temporal do volume de integração e passamos para o Jacobiano, o que facilita os cálculos,

$$\frac{dW(t)}{dt} = \int_{v_0} \left(\left(\frac{dF}{dt} \right) J + F \frac{dJ}{dt} \right) dv_0 = \int_{v_0} \left((\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) F J + F (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) J + \frac{\partial F}{\partial t} J \right) dv_0 = \quad (\text{C.15})$$

$$= \int_V \left((\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) F + F (\nabla \cdot \vec{u}) + \frac{\partial F}{\partial t} \right) dv = \int_V \left(\frac{\partial F}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (F \vec{u}) \right) dv \quad (\text{C.16})$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} F(\vec{x}, t) dv = \int_{V(t)} \left(\frac{\partial F}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (F \vec{u}) \right) dv \quad (\text{C.17})$$

Usando o teorema da divergência,

$$\int_V \left(\frac{\partial F}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (F \vec{u}) \right) dv = \int_{V(t)} \frac{\partial F}{\partial t} dv + \int_{S(t)} F \vec{u} \cdot \hat{n} ds \quad (\text{C.18})$$

e então,

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} F(\vec{x}, t) dv = \int_{V(t)} \frac{\partial F}{\partial t} dv + \int_{S(t)} F \vec{u} \cdot \hat{n} ds \quad (\text{C.19})$$

que é conhecido como sendo o teorema de transporte de Reynolds¹.

¹As formas (C.17) e (C.19) podem ser usadas de acordo com a conveniência

APÊNDICE D – Formas discretas da equação de Boltzmann

Com base no que foi discutido no capítulo 5, sugerido primeiramente por [23] e discutido por [24] reconstruiremos a forma discreta da equação de Boltzmann conhecida por equação explícita e em seguida obteremos a forma implícita. Em seguida reconstruiremos a forma implícita através de uma expansão em série de Taylor até a ordem $O(\delta^3)$

D.1 Discretização segundo He e Luo

Sem perda de generalidade parametrizando $\vec{x} = \vec{x}(t)$, de forma que $\frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = \vec{\xi}$, e lembrando que $f = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$, podemos reescrever o lado esquerdo da equação de Boltzmann como uma derivada total de f

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} - K(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \Omega[f] \quad (\text{D.1})$$

onde

$$-K(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \equiv \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}} \quad (\text{D.2})$$

é o termo explícito de força da equação de Boltzmann que carregaremos como um fator constante no processo de discretização temporal. E então,

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} f = \Omega[f] + K(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \quad (\text{D.3})$$

e podemos escrever

$$\frac{df}{dt} = -\frac{f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) - f^{(eq)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\tau} + K(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \quad (\text{D.4})$$

Multiplicando ambos os lados da Equação (D.4) por $e^{\frac{t}{\tau}}$,

$$\frac{df}{dt} \left(f e^{\frac{t}{\tau}} \right) - \frac{f}{\tau} e^{\frac{t}{\tau}} = -\frac{f}{\tau} e^{\frac{t}{\tau}} + \frac{f^{(eq)}}{\tau} e^{\frac{t}{\tau}} + K(\vec{x}, \vec{\xi}, t) e^{\frac{t}{\tau}} \quad (D.5)$$

conseguimos,

$$\frac{df}{dt} \left(f e^{\frac{t}{\tau}} \right) = \frac{e^{\frac{t}{\tau}}}{\tau} \left(f^{(eq)} + K \tau \right) \equiv \frac{e^{\frac{t}{\tau}}}{\tau} g(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \quad (D.6)$$

Queremos uma relação que forneça o valor da função distribuição em um tempo $t + \delta t$ a partir do conhecimento da função em um tempo t . Integrando a Equação (D.6) no tempo entre os limites t e $t + \delta t$,

$$\int_t^{t+\delta t} \frac{df}{d\bar{t}} \left(f e^{\frac{\bar{t}}{\tau}} \right) d\bar{t} = \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\delta t} e^{\frac{\bar{t}}{\tau}} g(\vec{x}, \vec{\xi}, \bar{t}) d\bar{t} \quad (D.7)$$

Lembrando que $\vec{x} = \vec{x}(t)$,

$$f(\vec{x} + \delta\vec{\xi}, \vec{\xi}, t + \delta) e^{\frac{t+\delta}{\tau}} - f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) e^{\frac{t}{\tau}} = \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\delta t} e^{\frac{\bar{t}}{\tau}} g(\vec{x}, \vec{\xi}, \bar{t}) d\bar{t} \quad (D.8)$$

e da mesma forma,

$$f(\vec{x} + \delta\vec{\xi}, \vec{\xi}, t + \delta) - f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) e^{\frac{-\delta}{\tau}} = \frac{e^{\frac{-\delta}{\tau}}}{\tau} \int_t^{t+\delta t} e^{\frac{\bar{t}-t}{\tau}} g(\vec{x}, \vec{\xi}, \bar{t}) d\bar{t} \quad (D.9)$$

Expandimos g em torno do tempo t , que do ponto de vista da integral é uma constante ou seja,

$$g(\vec{x}, \vec{\xi}, \bar{t}) = g(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \frac{\partial}{\partial t} g(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \Big|_{\bar{t}=t} (\bar{t} - t) + O(\delta^2) \quad (D.10)$$

onde,

$$\frac{\partial}{\partial t} g(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \Big|_{\bar{t}=t} = \frac{g(\vec{x} + \delta\vec{\xi}, \vec{\xi}, t + \delta) - g(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\delta} \quad (D.11)$$

ou seja,

$$g(\vec{x}, \vec{\xi}, \bar{t}) = g(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \frac{g(\vec{x} + \delta\vec{\xi}, \vec{\xi}, t + \delta) - g(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\delta} (\bar{t} - t) + O(\delta^2) \quad (D.12)$$

Para simplificar a notação definimos $g(\vec{x} + \delta\vec{\xi}, \vec{\xi}, t + \delta) \equiv g(\delta)$, e também suprimindo os argumentos $g(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \equiv g$ da mesma forma para f . Desprezando os termos de segunda ordem na expansão (D.21) e substituindo no lado direito da Equação (D.9) conseguimos

$$f(\delta) - f e^{-\frac{\delta}{\tau}} = \quad (D.13)$$

$$= \frac{e^{-\frac{\delta}{\tau}}}{\tau} \left(g e^{-\frac{t}{\tau}} (e^{\frac{t+\tau}{\tau}} - e^{\frac{t}{\tau}}) + \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\delta} g(\delta) \gamma - \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\delta} g \gamma \right) \quad (D.14)$$

restando apenas calcular a integral $\gamma = \int_t^{t+\delta} e^{-\frac{\bar{t}}{\tau}} (\bar{t} - t) d\bar{t}$,

$$\gamma = \int_t^{t+\delta} e^{-\frac{\bar{t}}{\tau}} (\bar{t} - t) d\bar{t} = \tau^2 e^{-\frac{t+\delta}{\tau}} \left(\frac{\delta}{\tau} - 1 \right) + \tau^2 e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (D.15)$$

Usando a solução (D.15) na Equação (D.14) conseguimos,

$$f(\delta) - f e^{-\frac{\delta}{\tau}} = g \left(1 - e^{-\frac{\delta}{\tau}} \right) + \frac{\tau}{\delta} \left(\frac{\delta}{\tau} - 1 \right) [g(\delta) - g] + \frac{\tau}{\delta} e^{-\frac{\delta}{\tau}} [g(\delta) - g] \quad (D.16)$$

ou seja,

$$f(\delta) - e^{-\frac{\delta}{\tau}} f = g \left(1 - e^{-\frac{\delta}{\tau}} \right) + \left(1 - \frac{\tau}{\delta} + \frac{\tau}{\delta} e^{-\frac{\delta}{\tau}} \right) (g(\delta) - g) \quad (D.17)$$

Para completar o processo de discretização temporal, devemos lembrar que estamos interessados em calcular a função distribuição f em um tempo $t + \delta t$, a partir do conhecimento da função em um tempo t para erros de ordem menor que $\delta^2 = (\bar{t} - t)^2$. Para isso devemos expandir $e^{-\frac{\delta}{\tau}}$ em série de Taylor

$$e^{-\frac{\delta}{\tau}} \sim 1 - \frac{\delta}{\tau} \quad (D.18)$$

Substituindo a expansão (D.18) na Equação (D.17),

$$f(\delta) - \left(1 - \frac{\delta}{\tau} \right) f = g - g \left(1 - \frac{\delta}{\tau} \right) + (g(\delta) - g) - \frac{\tau}{\delta} (g(\delta) - g) + \frac{\tau}{\delta} \left(1 - \frac{\delta}{\tau} \right) (g(\delta) - g) \quad (D.19)$$

concluindo com a obtenção da equação explícita,

$$f(\delta) - f = -\frac{\delta}{\tau} (f - f^{eq} + K\tau) = \delta\Omega \quad (\text{D.20})$$

Para a obtenção da equação implícita, procedemos com a expansão em série de Taylor da seguinte forma

$$\frac{\tau}{\delta} e^{-\frac{\delta}{\tau}} \sim \frac{\tau}{\delta} - 1 + \frac{\delta}{2\tau} \quad (\text{D.21})$$

substituindo a expansão (D.21) na Equação (D.17),

$$f(\delta) - \left(1 - \frac{\delta}{\tau} + \frac{\delta^2}{2\tau^2}\right) f = \left(\frac{\delta}{\tau} - \frac{\delta^2}{2\tau^2}\right) g + \frac{\delta}{2\tau} (g(\delta) - g) \quad (\text{D.22})$$

Multiplicando a Equação (D.22) por $(1 + \frac{\delta}{2\tau})$ desprezando os termos δ^2 e reescrevendo os produtos,

$$\left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) \left(1 - \frac{\delta}{\tau} + \frac{\delta^2}{2\tau^2}\right) \sim 1 - \frac{\delta}{2\tau} \quad (\text{D.23})$$

$$\frac{\delta}{2\tau} \left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) \sim \frac{\delta}{2\tau} \quad (\text{D.24})$$

conseguimos

$$\left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) f(\delta) - \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) f = \frac{\delta}{\tau} g + \frac{\delta}{2\tau} g(\delta) - \frac{\delta}{2\tau} g(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \quad (\text{D.25})$$

Definindo,

$$\tilde{f} \equiv \left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) f - \frac{\delta}{2\tau} g \quad (\text{D.26})$$

Trabalhando um pouco com a Equação (D.25)

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\tau}{\delta} + \frac{1}{2}\right) \left[\left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) f(\delta) - \frac{\delta}{2\tau} g(\delta) - \left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) f + \frac{\delta}{2\tau} g \right] = \\ & = \left(\frac{\tau}{\delta} + \frac{1}{2}\right) \left[- \left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) f + \frac{\delta}{2\tau} g + \left(1 - \frac{\delta}{2\tau}\right) f + \frac{\delta}{2\tau} g \right] \end{aligned}$$

e então,

$$\left(\frac{\tau}{\delta} + \frac{1}{2}\right) [\tilde{f}(\delta) - \tilde{f}] = -\left(1 + \frac{\delta}{2\tau}\right) f + \frac{\delta}{2\tau} g + g = -\tilde{f} + g \quad (\text{D.27})$$

concluimos com a obtenção da equação implícita ,

$$\tilde{f}(\delta) - \tilde{f} = \frac{-\tilde{f} + f^{(eq)}}{\frac{\tau}{\delta} + \frac{1}{2}} - \frac{F \cdot \tau}{\frac{\tau}{\delta} + \frac{1}{2}} = \delta \frac{-\tilde{f} + f^{(eq)}}{\tau + \frac{\delta}{2}} - \frac{F \cdot \tau}{\tau + \frac{\delta}{2}} = \delta \Omega \quad (\text{D.28})$$

O procedimento acima dificulta o entendimento da ordem do erro nas equações implícita e explícita. O mais natural seria carregar o termo de erro $O(\delta^2)$ até a obtenção das equações finais, como feito no capítulo 5.

Para simplificar o entendimento entre as equações implícita, explícita e seus respectivos erros sugerimos uma sucessiva expansão em série de Taylor [16], [15] da função f em segunda e em terceira ordem.

D.2 Discretização por um processo de expansão em série Taylor

Seguindo o mesmo raciocínio desenvolvido no capítulo 5 e levando a expansão em série de Taylor para terceira ordem, $O(\delta^3)$ conseguimos,

$$f(\delta) - f = \delta \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \right] + \frac{1}{2} \delta^2 \left[\frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \vec{x}^2} \right] + O(\delta^3) \quad (\text{D.29})$$

Fazendo a mesma expansão em série de Taylor para Ω ,

$$\Omega[\delta] - \Omega = \delta \left[\frac{\partial \Omega}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial \Omega}{\partial \vec{x}} \right] + O(\delta^3) \quad (\text{D.30})$$

Substituindo a Equação (D.30) na Equação (D.29),

$$\delta \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \right) = \left(f(\delta) - \frac{\delta}{2} \Omega[\delta] \right) - \left(f - \frac{\delta}{2} \Omega \right) + O(\delta^3) \quad (\text{D.31})$$

o que nos sugere a definição,

$$\tilde{f} \equiv f - \frac{\delta}{2} \Omega \quad (\text{D.32})$$

E assim obtemos a equação de Boltzmann discretizada no tempo, conhecida como

equação implícita , com erro da ordem de $O(\delta^3)$

$$\delta\Omega = \tilde{f}(\delta) - \tilde{f} + O(\delta^3) \tag{D.33}$$

APÊNDICE E - Polinômios tensoriais de Hermite

Os polinômios de Hermite são mais conhecidos através da função geratriz,

$$\Phi(x, t) = e^{\frac{1}{2}x^2} e^{-\frac{1}{2}(t-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n \quad (\text{E.1})$$

onde,

$$H_n(x) = (-1)^n e^{\frac{1}{2}x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad (\text{E.2})$$

Estes são polinômios unidimensionais. Estamos interessados em polinômios onde x e t são vetores. Neste caso usaremos a mesma função geratriz (E.1) para redefinirmos o polinômio (E.2) em termos tensoriais. Sejam os vetores $\vec{\xi}$, $\vec{\xi}'$ e \vec{S} , que denotaremos simplesmente por ξ , ξ' e S ,

$$\begin{aligned} \vec{\xi} = \xi &= (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) \\ \vec{\xi}' = \xi' &= (\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_n) \\ \vec{S} = S &= (S_1, S_2, \dots, S_n) \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

Seguindo o reescalamento,

$$\begin{aligned} t &\rightarrow \xi' \\ x &\rightarrow \xi \end{aligned}$$

De forma que,

$$t^n \rightarrow \xi'_{i_1, i_2, \dots, i_n} = \xi'_1 \xi'_2 \cdots \xi'_n = \xi'^n \quad (\text{E.4})$$

A função geratriz (E.1) fica,

$$\begin{aligned} \Phi(x, t) \rightarrow \Phi(\xi, \xi') &= e^{-\frac{1}{2}(\xi' - \xi)^2} e^{\frac{1}{2}\xi^2} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \xi'_{i_1, i_2, \dots, i_n} \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

Consideremos a integral,

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(\xi', \xi) \Phi(S, \xi) d^3\xi \quad (\text{E.6})$$

Substituindo (E.5) em (E.6),

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \xi'_{i_1, i_2, \dots, i_n} \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} S_{j_1, j_2, \dots, j_m} \mathcal{H}_{j_1, j_2, \dots, j_m}^{(m)}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d^3\xi \\ &= \sum_{m, n=0}^{\infty} \frac{1}{n! m!} \xi_i'^n S_j^m \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}_i^{(n)}(\xi) \mathcal{H}_j^{(m)}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d^3\xi \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

Guardando o resultado (E.7) e voltando a forma sugerida pela função geratriz, a integral (E.6) pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} I &= e^{-\frac{1}{2}(\xi'^2 + S^2)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\xi' \cdot \xi} e^{S \cdot \xi} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d^3\xi \\ &= e^{\xi' \cdot S} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}[\xi - (\xi' + S)]^2} d^D\xi \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

A integral sublinhada é uma integral tripla, onde cada integrando tem o valor $\sqrt{2\pi}$. E podemos concluir que,

$$I = e^{\xi' \cdot S} (2\pi)^{D/2} \quad (\text{E.9})$$

Para que a integral sublinhada (E.8) tenha valor igual a 1 podemos dividi-la por $(2\pi)^{D/2}$, ou seja,

$$I = e^{\xi' \cdot S} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} e^{-\frac{1}{2}[\xi - (\xi' + S)]^2} d^D \xi = e^{\xi' \cdot S} \quad (\text{E.10})$$

Com os resultados (E.10) e (E.7), podemos escrever,

$$\begin{aligned} I &= e^{\xi' \cdot S} \\ &= \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \xi_i'^n S_j^m \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}_i^{(n)}(\xi) \mathcal{H}_j^{(m)}(\xi) w(\xi) d^D \xi \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

Onde,

$$w(\xi) = \frac{e^{-\frac{1}{2}\xi^2}}{(2\pi)^{D/2}} \quad (\text{E.12})$$

Expandindo em série de Taylor a primeira exponencial da Equação (E.11),

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\xi' \cdot S)^n = \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \xi_i'^n S_j^m \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}_i^{(n)}(\xi) \mathcal{H}_j^{(m)}(\xi) w(\xi) d^D \xi \quad (\text{E.13})$$

Neste ponto temos uma igualdade entre polinômios tensoriais, e a integral do lado direito da Equação (E.13) pode ser interpretada como coeficientes da expansão polinomial. Para que possamos estabelecer a igualdade com a condição $m = n$ devemos lembrar que,

$$\xi_{i_1} \xi_{i_2} \xi_{i_3} S_{j_1} S_{j_2} S_{j_3} \neq \xi_{i_2} \xi_{i_3} \xi_{i_4} S_{j_2} S_{j_3} S_{j_4} = \xi_{j_4} \xi_{j_3} \xi_{j_2} S_{i_3} S_{i_2} S_{i_4} = \Delta_{j_2, j_3, j_4}^{i_2, i_3, i_4} \xi_{j_4} \xi_{j_3} \xi_{j_2} S_{i_3} S_{i_2} S_{i_4}$$

Onde $\Delta_{j_2, j_3, j_4}^{i_2, i_3, i_4} = 1$ se i_2, i_3, i_4 são permutações de j_2, j_3, j_4 e vice versa, e $\Delta_{j_2, j_3, j_4}^{i_2, i_3, i_4} = 0$ caso contrário.

Unindo esses resultados podemos concluir que,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w(\xi) \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) \mathcal{H}_{j_1, j_2, \dots, j_n}^{(m)}(\xi) d^D \xi = n! \Delta_{j_1, j_2, \dots, j_n}^{i_1, i_2, \dots, i_n} \quad (\text{E.14})$$

De maneira definitiva podemos definir a n ésima potência dos polinômios tensoriais de Hermite como,

$$\mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(\xi) = \frac{(-1)^n}{w(\xi)} \partial_{\xi_{i_1}} \partial_{\xi_{i_2}} \cdots \partial_{\xi_{i_n}} w(\xi) \quad (\text{E.15})$$

onde,

$$w(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (\text{E.16})$$

As ordens em \mathcal{H} podem ser verificadas,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(0)} &= 1 \\ \mathcal{H}_i^{(1)} &= \xi_i \\ \mathcal{H}_{ij}^{(2)} &= \xi_i \xi_j - \delta_{ij} \\ \mathcal{H}_{ijk}^{(3)} &= \xi_i \xi_j \xi_k - \xi_i \delta_{jk} - \xi_k \delta_{ij} - \xi_j \delta_{ik} \\ \mathcal{H}_{ijkl}^{(4)} &= \xi_i \xi_j \xi_k \xi_l - \xi_i \xi_j \delta_{kl} - \xi_l \xi_i \delta_{jk} - \xi_k \xi_l \delta_{ij} - \xi_j \xi_k \delta_{li} - \xi_i \xi_k \delta_{jl} - \xi_j \xi_l \delta_{ik} + \delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{kl} \delta_{ij} + \delta_{jl} \delta_{ik} \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

Desta relação podemos concluir diretamente que,

$$\begin{aligned} \xi_i \mathcal{H}^{(0)} &= \xi_i = \mathcal{H}_i^{(1)} \\ \xi_i \mathcal{H}_j^{(1)} &= \xi_i \xi_j = \mathcal{H}_{ij}^{(2)} + \delta_{ij} \mathcal{H}^{(0)} \\ \xi_i \mathcal{H}_{jk}^{(2)} &= \xi_i \xi_j \xi_k - \xi_i \delta_{jk} = \mathcal{H}_{ijk}^{(3)} + \delta_{ij} \mathcal{H}_k^{(1)} + \delta_{ik} \mathcal{H}_j^{(1)} \\ \xi_l \mathcal{H}_{ijk}^{(3)} &= \xi_i \xi_j \xi_k \xi_l - \xi_i \xi_l \delta_{jk} - \xi_l \xi_k \delta_{ij} - \xi_i \xi_l \delta_{ik} = \mathcal{H}_{ijkl}^{(4)} + \delta_{lk} \mathcal{H}_{ij}^{(2)} + \delta_{li} \mathcal{H}_{jk}^{(2)} + \delta_{lj} \mathcal{H}_{ik}^{(2)} \\ \xi_l \mathcal{H}_{ijkn}^{(4)} &= \mathcal{H}_{ijknl}^{(5)} + \delta_{li} \mathcal{H}_{jkn}^{(3)} + \delta_{ln} \mathcal{H}_{ijk}^{(3)} + \delta_{lk} \mathcal{H}_{nij}^{(3)} + \delta_{lj} \mathcal{H}_{kni}^{(3)} \end{aligned}$$

Podemos generalizar esses resultados como,

$$\xi_i \mathcal{H}_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} = \mathcal{H}_{i, i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n+1)} + \delta_{i[i_i} \mathcal{H}_{i_2, i_3, \dots, i_n}^{(n-1)} \quad (\text{E.18})$$

Onde o colchete na expressão acima indica soma simétrica.

APÊNDICE F – Ortogonalização de Gram-Schmidt no software Mathematica

Abaixo descrevemos uma forma conveniente de se tratar o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt usando o software Mathematica. O código abaixo está escrito na forma com que foi implementado. A versão utilizada do software Mathematica foi a 7.0.

```
(*definições:cx → x  cy → y  cz → z*)
(* ===== variáveis ===== *)

Ci = {x, y, z};
ω =  $\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{1}{2}C_i \cdot C_i}$ ;
P = {};
(* ===== base ===== *)
H = {1, x, y, z, x2, y2, z2, xy, xz, yz, x3, y3, z3, x2y, y2x, z2x, z2y, x2z, y2z, xyz};
(* ===== polinômios a serem ortogonalizados ===== *)
T = {Ci · Cixx, Ci · Ciyy, Ci · Cizz, Ci · Cixy, Ci · Cixz, Ci · Cizy};
(* ===== *)

For[n = 1, n < (Dimensions[T][[1]] + 1), n + +,
  k = Dimensions[H][[1]];
  (*cria uma lista em forma de vetor para as variáveis a serem determinadas*)
  B = MonomialList  $\left[ \sum_{i=1}^k b_i \right]$ ;
  (*polinômios a serem ortogonalizados*)
```

$$\Omega = T[[n]] + d \sum_{j=1}^k B[[j]]H[[j]];$$

$$\text{Eq} = \{ \};$$

(*processo de ortogonalizaçã*)

$$\text{For} \left[i = 0, i < k, \text{Eq} = \text{Append} \left[\text{Eq}, d \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega H[[i]] \Omega dx dy dz == 0 \right], i + + \right];$$

$$B = B/.Solve[\text{Eq}, B];$$

(*a primeira componente é justamente o vetor solução*)

$$B = B[[1]];$$

(*escreve o polinômio ortogonal a partir das soluções encontradas*)

$$\Omega = \text{FullSimplify} \left[T[[n]] + \sum_{j=1}^k B[[j]]H[[j]] \right];$$

(*normaliza o polinômio e associa a solução de Solve a "a" e cria um vetor Sol*)

$$\text{Sol} = a/.Solve \left[\left\{ a^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega(\Omega)^2 dx dy dz == 1 \right\}, a \right];$$

(*a segunda componente de Solve é sempre >0*)

$$w = \text{Sol}[[2]]\Omega;$$

(*adiciona o polinômio ortonormal a lista H para que se possa encontrar o próximo *)

$$H = \text{Append}[H, w];$$

(*Pegando Somente os polinômios ortonormalizados*)

$$P = \text{Append}[P, w];$$

];

$$P \left\{ \frac{5 + x^4 - y^2 - z^2 + x^2(-8 + y^2 + z^2)}{4\sqrt{2}}, \frac{-(x^2 - 8y^2)(x^2 + y^2 + z^2) - 7(-5 + 9y^2 + z^2)}{12\sqrt{14}}, \right. \\ \left. \frac{35 - 70z^2 - (x^2 + y^2 - 9z^2)(x^2 + y^2 + z^2)}{6\sqrt{70}}, \frac{xy(-7 + x^2 + y^2 + z^2)}{\sqrt{14}}, \right. \\ \left. \frac{xz(-7 + x^2 + y^2 + z^2)}{\sqrt{14}}, \frac{yz(-7 + x^2 + y^2 + z^2)}{\sqrt{14}} \right\}$$

Índice Remissivo

- Adimensionalização da equação de Boltzmann, 60
- Balanço de quantidade de movimento, 42
- Caos molecular, 30
- Comprimento de Debye, 2
- Densidade de corrente \vec{J} , 14
- Equação de transporte de Boltzmann, 32
- Equação de transporte do calor q_k , 46
- Equação de transporte para o calor, 46
- Equação de transporte para o tensor tensão viscoso P_{jk} , 45
- Equação explícita segundo He e Luo, 132
- Equação explícita segundo um processo de expansão em série de Taylor, 68
- Equação implícita segundo He e Luo, 134
- Equação implícita segundo um processo de expansão em série de Taylor, 135
- Fluido de Euler, 39
- Fluido de Navier-Stokes, 40
- Força de Lorentz, 15, 45
- Forma diferencial da Lei de Ampère, 19
- Frequência de colisão, 33
- Frequência de plasma w_p , 2
- Hipótese do equilíbrio termodinâmico local, 66
- Indução eletromagnética de Faraday, 20
- Indução Magnética, 15
- Lei de Apère, 19
- Lei de Biot-Savart, 16
- Lei de Faraday, 20
- Lei de Gauss, 12
- Lei de Lenz, 20
- Lei de Ohm, 16
- Lei de Ohm Generalizada, 16
- Neutralidade do plasma., 1
- Operador BGK, 36
- Parâmetro de plasma g , 2
- Velocidade peculiar, 38