A. GOUVÊA PORTELA
Prof. I. S. T.

TERMOESTÁTICA

«TÉCNICA»
REVISTA DE ENGENHARIA
Separata do n.º 353 - Págs. 127 a 133

LISBOA
ASSOCIAÇÃO DOS ESTUDANTES
DO
INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO
1965

C. D. U. 536 — 33

TERMOESTÁTICA

por A. GOUVÊA PORTELA
Prof. I. S. T.

RESUMO

Este artigo reformula a axiomática da Termoestática e introduz a aplicação dos métodos de Programação (nomeadamente linear) a resolução de problemas termoestáticos.

SYNOPSIS

This article reformulates the axiomatique of the Thermostatic and introduces the application of Programation Methods (ex. grat. linear Programation) to the solution of Thermostatics Problems.

0 — INTRODUÇÃO

Como toda a Teoria Física, a Termoestática consente várias axiomáticas.

Nem sempre a axiomática proposta inicialmente é a mais conveniente e, com o decorrer do tempo, surgem outras formas de apresentar as bases duma teoria que conferem a esta um renovado interesse.

O objectivo desta nota é justamente sugerir uma axiomática para a Termoestática que parece possuir certas vantagens que submetemos ao julgamento dos interessados nestas questões.

Por maior consistência que se deseje dar a uma teoria, há sempre um certo número de termos cujo sentido subjectivo se supõe conhecido, assim vamos supor dominados os conceitos correspondentes a vocábulos, tais como: universo, espaço no sentido Topológico, contorno ou fronteira, conexão, referencial, estacionário, etc.

1 — APRESENTAÇÃO DA TEORIA

Sistema Termoestático é toda a parcela finita do Universo delimitada por um contorno fechado constituindo este uma figura geométrica conexa no espaço Euclideano e satisfazendo às seguintes propriedades:

a) A fronteira tem propriedades invariantes no tempo.

b) O Sistema está contido nessa fronteira há ∞ tempo.

c) O Sistema (S) é por seu turno uma topologia (anel) com as seguintes propriedades estruturais internas (organização):

S é mensurável e tem pelo menos $(n+1)$ medidas finitas μ, todas completamente aditivas.

d) Existe um número n inteiro e finito de medidas independentes μ_i $(i = 1, \ldots n)$ que dum modo completo caracterizam o sistema S.

e) Entre as medidas μ de S existe uma também completamente aditiva que designaremos por *energia interna* **U** que tem a propriedade de tomar o valor mínimo compatível com as condições impostas pela fronteira. U é um escalar.

* * *

Embora a axiomática de um sistema lógico não necessite formalmente de justificação, contudo, para que tenha interesse físico, é usual e conveniente apresentar uma interpretação ou tradução em **metalinguagem** a fim de mostrar que há na Natureza sistemas reais cujo comportamento se aproxima razoàvelmente do modelo formal apresentado.

Neste sentido apresentamos, a seguir, esclarecimentos e justificações dos axiomas escolhidos :

— *As proposições a) e b)* garantem que o sistema Termoestático isolado na fronteira atingiu um *estado estável* no sentido macroscópico.

Deste modo todos os fenómenos de relaxação e de histeresis se supõem completados e a invariância das propriedades da fronteira elimina o ruído do universo circundante que, para todos os efeitos, tem as propriedades da fronteira.

— *A proposição c)* é fundamental porque postula a existência de medidas para S dum certo tipo e caracteriza essas medidas com a propriedade da sua somabilidade. Isto é:

Se A e B forem dois conjuntos satisfazendo a: $\left|\begin{array}{l} A,\ B \in S \\ e \begin{cases} A \cap B = O \\ A \cup B \in S \end{cases}\end{array}\right.$

então $\mu\,(A \cup B) = \mu\,(A) + \mu\,(B)$

e ainda

Se for dado uma série numerável de conjuntos, E_r, disjuntos dois a dois então:

$$\mu \sum_r E_r = \sum_r \mu\,(E_r)$$

$$\text{com} \quad \left[\begin{array}{ll} E_r \in S & r = 1, \ldots \\ E_r \cap E_k = O & r \neq k \\ E_r \cup E_k \cup E_e \ldots & \in S \end{array}\right.$$

— *A Proposição d)* tem o mérito de tornar finito o número de medidas macroscópicas a efectuar no sistema termoestático para o caracterizar completamente sob o ponto de vista termoestático.

Note-se que se não indica quantas são essas medidas.

O número de medidas dependerá do problema a resolver e da precisão desejada e caberá ao físico escolher essas medidas; ùnicamente se postula que esse número é finito.

As proposições referidas até aqui (a, b, c e d) permitem extrair algumas consequências que convém explorar desde já para boa inteligência do que se segue.

Qualquer medida μ_o de S satisfazendo a c) que não esteja incluída no número das n medidas μ_i consideradas independentes é uma função das n medidas μ_i

$$\mu_o = \varphi_o\,(\mu_1 \ldots \mu_n)$$

Tendo em vista a proposição d), φ_o será uma função homogénea de 1.ª ordem de $\mu_1 \ldots \mu_n$, e contínua no ponto considerado se μ_o for completamente aditivo.

Esta propriedade resulta de se ter postulado que as medidas μ são completamente aditivas, o que implica que o conjunto dos pontos de descontinuidade tenha medida nula.

A partir das medidas $\mu_0, \mu_1 \ldots \mu_n$ todas completamente aditivas, sendo n independentes, pode construir-se um espaço de representação E_{n+1} (eixos rectilíneos ortogonais, centrado e afim).

Nesse espaço pode ser representada a hipersuperfície $\mu_0 = \varphi_0 (\mu_1 \ldots \mu_n)$ onde estarão situados todos os pontos que correspondem aos estados atingíveis pelo sistema termoestático.

Também nesse referencial será possível representar quaisquer *constrangimentos* de forma $\Theta_k (\mu_0, \mu_1, \ldots \mu_n) \gtreqless 0$.

Estes hiperespaços de constrangimento da forma $\Theta_k (\mu_0, \mu_1, \ldots \mu_n) \gtreqless 0$ interceptarão a hipersufície $\mu_0 = \varphi_0 (\mu_1 \ldots \mu_n)$, restringindo o domínio de existência dos pontos representativos do estado do sistema.

A proposição e) tem a função de fornecer um *critério* para verificar se determinado estado representado por um ponto no referencial E_n é ou não *estável*.

Assim o ponto P satisfazendo à hipersufície $U = U (\mu_1 \ldots \mu_n)$ e a todos os constrangimentos de forma $\Theta_k (\mu_0, \mu_1 \ldots \mu_n) \gtreqless 0$, e que se admitem compatíveis para que P tenha existência, não fica bem determinado, em geral.

Com efeito, a menos que os constrangimentos definam o ponto duma forma unívoca, em geral, o que se verifica é a existência de um domínio e só um *critério adicional* permitirá escolher um ponto nesse domínio.

A função da proposição e) é precisamente fornecer esse critério, o qual se formula desta forma simples: *U será mínimo*. Se só existir um ponto que minimize U e for esse o ponto que representa o estado do sistema então esse estado é *estável*.

Em resumo, toda a termoestática se reduz a um problema de max e min condicionados, ou seja a um problema de *programação não linear*, o qual consiste em procurar num domínio delimitado um ponto que optimise determinada função desse ponto.

2 — EXPLORAÇÃO DO SISTEMA LÓGICO

Uma vez que a axiomática da teoria foi apresentada e sumàriamente interpretada, convém passar à sua exploração.

Para o efeito abordaremos três temas

Conceito de matriz de rigidez

Espaço $2n+1$

Conceito de entropia

2.1 — Conceito de matriz de rigidez

Embora o referencial de representação seja um E_n (ortogonal, centrado), nem por isso deixa de ter interesse caracterizar a variância das grandezas intervenientes.

Assim todos os μ_i são ou escalares ou afinores contravariantes.

A energia interna U é um escalar e tem as dimensões de uma energia. Porque U é uma função contínua de $\mu_1 \ldots \mu_n$ será ainda:

$$dU = \sum_i \frac{\partial U}{\partial \mu_i} d\mu_i$$

designaremos por $\pi_i = \dfrac{\partial U}{\partial \mu_i}$ e π_i será ainda uma função contínua de $\mu_1 \ldots \mu_n$, porém π_i é uma função homogénea de *grau zero* pois é uma relação de duas medidas que gozam da propriedade de somabilidade, porém π_i *não* goza dessa propriedade. Se designarmos as variáveis μ_i de *extensivas*, as variáveis π_i tomarão o nome de *intensivas*. A expressão de dU pode ainda escrever-se

$$dU = \underset{(1,\,n)}{[\pi_i]} \cdot \underset{(n,\,1)}{[d\,\mu_i]}$$

Porque π_i é uma função de $\mu_1 \ldots \mu_n$ será

$$d\,\pi_i = \sum_k \frac{\partial\,\pi_i}{\partial\,\mu_k} \cdot d\,\mu_k = \sum_k \frac{\partial^2 U}{\partial\,\mu_i\,\partial\,\mu_k} \cdot d\,\mu_k$$

e

$$\underset{(n,\,1)}{[d\,\pi_i]} = \underset{(n,\,n)}{\left[\frac{\partial\,\pi_i}{\partial\,\mu_k}\right]} \cdot \underset{(n,\,1)}{[d\,\mu_k]} = \left[\frac{\partial^2 U}{\partial\,\mu_i\,\partial\,\mu_k}\right] \cdot [d\,\mu_k]$$

$\dfrac{\partial\,\pi_i}{\partial\,\mu_k}$ será ainda uma função contínua de $\mu_1 \ldots \mu_n$. $\left[\dfrac{\partial\,\pi_i}{\partial\,\mu_k}\right]$ tem o nome de *matriz de rigidez*.

Esta matriz rigidez $\left[\dfrac{\partial\,\pi_i}{\partial\,\mu_k}\right]$ pode ser invertida parcial ou totalmente, permutando a posição das variáveis $d\,\mu_i$ com as $d\,\pi_i$.

Em cada ponto, representativo dum estado estável, a matriz de rigidez converte-se numa matriz numérica.

A circunstância de U ser contínuo arrasta a igualdade : $\dfrac{\partial^2 U}{\partial\,\mu_i\,\partial\,\mu_k} = \dfrac{\partial^2 U}{\partial\,\mu_k\,\partial\,\mu_i}$ e daí resulta que a matriz de rigidez é *simétrica*.

Finalmente, $\left[\dfrac{\partial\,\pi_i}{\partial\,\mu_k}\right]^{-1}$ tem a designação de *matriz de elasticidade*.

Note-se que toda a teoria de elasticidade se propõe por meio de uma matriz de rigidez de forma

$$[T] = [M] \cdot [S]$$

onde

$[S]$ representa o tensor de deformação
$[T]$ representa o vector de deformação
$[M]$ representa a matriz de rigidez

2.2 — Espaço E_{2n+1}

A introdução das variáveis π_i (intensivas) vai permitir a representação do sistema termoestático S num referencial mais amplo com 2n + 1 dimensões.

As coordenadas serão agora U, $\mu_1 \ldots \mu_n$, $\pi_1 \ldots \pi_n$. O hiperespaço termoestático correspondente à Superfície Termoestática será representado neste referencial por:

$$\left.\begin{array}{l} U = U\,(\mu_1 \ldots \mu_n,\ \pi_1 \ldots \pi_n) \\ \text{e}\quad \pi_i = \pi_i\,(\mu_1 \ldots \mu_n,\ \pi_1 \ldots \pi_n) \end{array}\right\}\quad \begin{array}{l} n+1 \\ \text{equações} \end{array}$$

$$i = 1, \ldots n$$

Os constrangimentos, em número de *m*, tomam a forma seguinte:

$$\varphi_k\,(\mu_1 \ldots \mu_n,\ \pi_1 \ldots \pi_n) \geq 0$$

$$K = 1, \ldots m$$

Note-se que o número de graus de liberdade do Sistema Termoestático não constrangido continua a ser $n = (2n + 1) - (n + 1)$, como não podia deixar de se verificar uma vez que se postulou ser n o número de variáveis independentes.

De novo o problema da estabilidade dos sistemas termoestáticos se formula extremando (minimizando) a função U, condicionado a n constrangimentos π_i e m constrangimentos S_k, o que corresponde a um problema de max. e min. condicionados ou ainda a uma programação não linear.

2.3 — Conceito de entropia

Em termodinâmica (irreversível) a entropia desempenha uma função primordial.

Contudo na axiomática da termoestática o papel da entropia é mais modesto.

Com efeito, a circunstância de se ter imposto que o número de medidas a efectuar ao sistema termodinâmico deve ser finito (n) resulta que é necessário apurar quais as medidas μ_i (variáveis extensíveis) que influem no sistema o que pode experimentalmente determinar-se procurando estabelecer as diferenciais $\frac{\partial U}{\partial \mu_i} = \pi_i$.

A natureza do problema vai permitir arrolar assim quais as variáveis μ_i que possuem uma correlação significativa com U.

Mas a circunstância de ser pràticamente ∞ (e não finito como se postulou) o número de variáveis influentes em U é formalmente necessário acrescentar mais uma medida (que designaremos por μ_n) que representa a totalidade da interacção restante, não expressamente contida nos parâmetros $\mu_1 \ldots \mu_{n-1}$.

Assim haverá $(n-1)$ medidas μ_i monoscópicas mensuráveis experimentalmente e mais uma medida μ_n não mensurável directamente à qual corresponderá uma propriedade intensiva $\frac{\partial U}{\partial \mu_n}$ e que é responsável pelo trabalho $\pi_n \, d\mu_n$ que representa a energia não contabilizada no somatório $\sum_{i=1}^{n-1} \pi_i \, d\mu_i$.

A esta medida μ_n dá-se o nome de *entropia*, a π_n o de *temperatura* e a $\pi_n \, d\mu_n$, com a grandeza de uma energia, a designação de *calor*.

A circunstância de ser possível conceber deslocamentos do Ponto $P(\mu_1 \ldots \mu_n)$ a $d\mu_n = 0$, aos quais correspondem energias $\pi_n \, d\mu_n = 0$, não invalida a asserção feita, porque para o sistema lógico ser consistente é necessário que seja aplicável mesmo que $d\mu_n \neq 0$.

Dada a liberdade de escolha que dispomos quanto a μ_n e π_n poderemos impor que $\pi_n > 0$.

Em resumo, poder-se-á escrever:

$$dU = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial U}{\partial \mu_i} \, d\mu_i + \frac{\partial U}{\partial \mu_n} \cdot d\mu_n$$

ou numa simbologia mais corrente

$$dU = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial U}{\partial \mu_i} \cdot d\mu_i + T\,dS$$

Este modo de proceder é frequente em física. Um número suficiente de experiências foram feitas sobre um sistema dado, foram oferecidas, à priori, um certo número de variáveis consideradas influentes no sistema, procuraram-se correlações entre a função (U) e essas variáveis μ_i e assim se determinaram os coeficientes de influência $\frac{\partial U}{\partial \mu_i}$, $(i = 1, \ldots n-1)$.

Porém ficou no fim um resto. Então é legítimo oferecer mais uma variável μ_n que já se não pode medir directamente mas que é tornada responsável pela interacção restante.

Deste modo, é possível representar o estado do sistema num referencial com (n + 1) dimensões, por um ponto situado numa superfície bem determinada.

Para concluir tem interesse chamar a atenção de que, nos sistemas termoestáticos no estado estável, a circunstância de U ser mínimo implica ser $\mu_n = S$ máximo.

Com efeito,

$\sum_{i=1}^{n-1} \pi_i \delta\mu$ representa a energia correspondente à totalidade dos parâmetros extensivos mensuráveis experimentalmente e é bem determinada para cada deslocamento virtual δP do ponto P $(\mu_1 \dots \mu_n)$ situado na superfície termoestática e sujeito aos constrangimentos impostos.

Donde $\delta U - T\delta S = \sum_{i-1}^{n-1} \pi_i \delta \mu_i$ e o segundo membro é bem determinado para cada deslocamento δP e porque $T > 0$ (por hipótese), e $\delta U < 0$ (se u for minímo), terá de ser $\delta S < 0$ (ou S máximo), conforme se considerou $U = U (\mu_1 \dots \mu_{n-1}, S)$ ou $S = S (\mu_1 \dots \mu_{n-1} U)$.

3 — APLICAÇÃO DE PROGRAMAÇÃO LINEAR

Nos capítulos anteriores foi mostrado como os problemas de termoestática se reduzem ao da *programação não linear*. Infelizmente não há um método universal de resolver problemas deste tipo mas em contrapartida há métodos perfeitamente explorados para tratar a «programação linear». Vejamos em que condições é possível e legítimo aplicar este segundo método.

Se a vizinhança explorada em torno do ponto (no espaço de representação) é relativamente reduzida é, em geral, legítimo:

— linearizar $U = \varphi (\mu_1 \dots \mu_n, \pi_1 \dots \pi_n)$

— considerar a matriz $\left[\frac{\partial \pi_i}{\partial x_j}\right]$ como tendo elementos constantes.

— linearizar o sistema de equações: $P_k (\mu_1 \dots \mu_n, \pi_1 \dots \pi_n) \left(\begin{smallmatrix} > \\ = \\ < \end{smallmatrix}\right) 0$

Então, a aplicação da programação linear é possível e não oferece dificuldades e propõe-se da forma seguinte

Sendo dado o sistema de constrangimentos lineares seguinte:

$$\begin{cases} [\delta \pi_i] = \left[\frac{\partial \pi_i}{\partial \mu_k}\right] . [\delta \mu_k] \\ 0 = \left[\frac{\partial S_k}{\partial \mu_i}\right] . [\delta \mu_i] + \left[\frac{\partial S_k}{\partial \pi_i}\right] [\delta \pi_i] \end{cases}$$

minimizar a *função critério* (também linear) seguinte:

$$\delta U = \left[\frac{\partial U}{\partial \mu_i}\right] . [\delta \mu_i] + \left[\frac{\partial U}{\partial \pi_i}\right] . [\delta \pi_i]$$

Sendo todos os deslocamentos a partir de um Ponto P de equilíbrio tomado para ponto de partida.

Note-se que antes de aplicar o método ter-se-ia que averiguar se o poliedro formado por todos os hiperplanos era convexo, bem como outros cuidados formais, que aqui não nos referimos expressamente.

4 — INTERESSE DO MÉTODO

As condições de fronteira que era usual impor aos sistemas termoestáticos consistiam tradicionalmente nos seguintes tipos :

ou $d\,\mu_i = 0$

ou $d\,\pi_i = 0$

Isto é, ou se impunham a P deslocamentos a volume, entropia, componente (i), *constantes* ou a pressão, temperatura, potencial químico, *constantes*.

Nestas condições não há interesse em recorrer ao método de programação linear, pois que bastava estudar a matriz de rigidez ou a sua inversa (parcial ou total) para concluir da estabilidade do sistema.

É também clássico o emprego da transformada de Lagrange-Legendre da função U ou S, tais como a entalpia, função Gibbs, funções de Massieu, para estudar estes casos, que correspondem a inverter parcial ou totalmente as matrizes de rigidez ou de elasticidade.

Mas se as condições de fronteira se apresentarem sob formas mais complexas, como:

$$\begin{cases} 3\,U - 2\,p = S \\ \alpha_1\,T + K_2\,P - U \leqslant 0 \\ P \geqslant 3 \end{cases}$$

Então só o formalismo da programação linear tem potência para resolver esta classe de problemas.

Pergunta-se, mas haverá casos reais em que tal suceda ?

A automação com as suas múltiplas e variadas aplicações ao controle de processos e máquinas impõe condições que já se não descrevem simplesmente por formas tais como $d\,\mu_i = 0$ ou $d\,\pi_i = 0$, então tem completo e cabal cabimento o emprego de programação linear.

REFERÊNCIAS: Measure Theory — Halmos.