UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

Aspectos Analíticos e Computacionais do Método de Ordenadas Discretas para o Modelo BGK Linearizado

por

Patricia Rodrigues

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Liliane Basso Barichello
Orientador

Porto Alegre, Novembro de 1998.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Rodrigues, Patricia

Aspectos Analíticos e Computacionais do Método de Ordenadas Discretas para o Modelo BGK Linearizado / Patricia Rodrigues.—Porto Alegre: CPGMAp da UFRGS, 1998.

57p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 1998.
Orientadora: Basso Barichello, Liliane

Dissertação: Método de Ordenadas Discretas, Modelo BGK, Fluxo de Poiseuille

Para meus pais

Dalmires e *Iracema*

e para o *Luis Carlos*

"Tempo virá em que uma pesquisa diligente e continuada esclarecerá aspectos que agora permanecem escondidos. O espaço de tempo de uma vida, mesmo inteiramente devotada ao estudo, não seria suficiente para investigar um objeto tão vasto...; este conhecimento será conseguido somente através de gerações sucessivas. Tempo virá em que nossos descendentes ficarão admirados de que não soubéssemos particularidades tão óbvias a eles... Muitas descobertas estarão reservadas para os que virão, quando a lembrança de nós estiver apagada. O nosso Universo será um assunto sem importância, a menos que haja alguma coisa nele a ser investigada a cada geração ... A natureza não revela seus mistérios de uma só vez."

SÊNECA

AGRADECIMENTOS

Carinhosamente agradeço à professora Dra. Liliane Basso Barichello, que além da excelente orientação e preciosas contribuições na elaboração desse trabalho, sempre me incentivou e demonstrou muita compreensão e carinho.

Ao professor Dr. C. E. Siewert por todo o apoio, solicitações, desafios e incentivos que vieram a enriquecer esse trabalho.

Ao professor Dr. S. J. Wright pela disponibilidade e participação nas discussões que envolveram a parte computacional desse trabalho.

À amiga e colega Mariza (Má), por estes seis anos de solidariedade e contribuição nas discussões e estudos, pelo abraço apertado nas horas difíceis e pelo sorriso sincero nos momentos de alegria, coisas pelas quais nem sei ao certo agradecer, só sei dizer que foram essenciais para meu crescimento pessoal.

Aos meus pais, que depositaram em mim confiança, sonhos e anseios, que me deram oportunidade e incentivo para estudar e conquistar meus objetivos, obrigado por tudo, o tempo todo.

Ao Luis Carlos, pelo amor, pela compreensão, carinho, incentivo, e por compartilhar na conquista dos meus sonhos e objetivos.

Ao Geraldo e ao Rodrigo, que bem mais do que irmãos, sempre foram grandes incentivadores.

Às amigas Ana Paula, Graciela e Izabel, pelas palavras e atitudes que sempre demonstraram o verdadeiro sentido da palavra amizade.

A todos os colegas da pós-graduação pela ótima convivência.

Aos professores do Curso de Matemática da UFSM e do Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da UFRGS que me incentivaram a chegar até aqui.

Aos funcionários do laboratório de informática, pelo excelente atendimento.

À CAPES (Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pela bolsa de estudos recebida.

A todos os familiares e amigos que de uma forma ou outra me ajudaram e torceram pelo sucesso na realização deste trabalho.

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS ix

LISTA DE SÍMBOLOS x

RESUMO xi

ABSTRACT xii

1 INTRODUÇÃO 1

2 MODELAGEM DO PROBLEMA 4

2.1 Solução em Ordenadas Discretas 5

2.2 Soluções Elementares: uma abordagem analítica 8

2.3 Soluções Elementares: uma abordagem numérica 12

3 MEIO SEMI-INFINITO **16**

3.1 O Problema do "Creep" Térmico 16

3.1.1 Uma abordagem analítica 18

3.1.2 Uma abordagem numérica 19

3.2 O Problema de Deslizamento Viscoso 20

3.2.1 Uma abordagem analítica 21

3.2.2 Uma abordagem numérica 22

4 RESULTADOS NUMÉRICOS **24**

4.1 Descrição Geral 24

4.2 O problema de autovalores $\mathbf{D} + \rho\mathbf{z}\mathbf{z}^T$ 25

4.3 Aplicações 27

4.3.1 O problema do fluxo de Poiseuille 28

4.3.1.1 Resultados da primeira e segunda abordagem 28

4.3.2 Problemas em meio semi-infinito 31

4.3.2.1 Resultados da primeira e segunda abordagem para o Problema "Creep" Térmico 31

4.3.2.2 Resultados da primeira e segunda abordagem para o Problema de Deslizamento Viscoso 33

5 CONCLUSÕES **36**

BIBLIOGRAFIA **37**

ANEXO.A-1 . . . . **42**

A-1.1 O problema do fluxo de Poiseuille 42

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 Velocidade macroscópica $q(\tau)$ 31

Tabela 4.2 Taxa de fluxo Q 31

Tabela 4.3 Velocidade macroscópica $q_T(\tau)$ 33

Tabela 4.4 Velocidade de deslizamento 33

Tabela 4.5 Velocidade macroscópica $q_P(\tau)$ 34

Tabela 4.6 Velocidade de deslizamento 35

LISTA DE SÍMBOLOS

A_P	Velocidade de deslizamento viscoso
A_T	Velocidade de deslizamento térmico
d	Espessura da placa
N	Ordem da quadratura de Gauss
$P_l(\mu)$	Polinômio de Legendre
$q(\tau)$	Velocidade macroscópica para o problema de Poiseuille
$q_P(\tau)$	Velocidade macroscópica para o problema de Deslizamento Viscoso
$q_T(\tau)$	Velocidade macroscópica para o problema do "Creep" Térmico
Q	Taxa de fluxo
α	Coeficiente de acomodação
θ	Tempo livre médio
μ	Direção de propagação da partícula
μ_i	Pontos de quadratura em [0,1]
τ	Variável ótica adimensional
w_i	Pesos de quadratura em [0,1]

RESUMO

Neste trabalho duas soluções em ordenadas discretas são propostas para problemas da dinâmica de gases rarefeitos, em meio finito e semi-infinito, abordados segundo o modelo BGK linearizado. As duas versões utilizam os chamados "half-range" esquemas de quadratura, no entanto os dois casos diferem basicamente na avaliação, analítica ou numérica, das soluções elementares do sistema de equações em ordenadas discretas. Ainda um problema de autovalores simplificado, baseado em matrizes que são perturbações de matrizes de posto um, resulta nas duas abordagens e é tratado a partir de rotinas específicas. Resultados numéricos são apresentados.

ABSTRACT

In this work two discrete ordinates solutions are developed to solve a class of problems in the theory of rarefied gas dynamics, in finite and semi-infinite media, described by the linearized BGK model. The two methods use half-range quadrature schemes and are based on the use of either analytical or numerical approaches to evaluate the elementary solutions of the discrete ordinates equations. The addition, the approaches present a simpler associated eigenvalue problem based on matrices that are diagonal perturbations of rank-one matrices. Numerical results are presented.

1 INTRODUÇÃO

No contexto dos métodos determinísticos para solução da equação de transporte, o método de ordenadas discretas, caracterizado basicamente pela discretização da variável angular da equação, tem sido amplamente usado em modelos unidimensionais e multidimensionais. Segundo Chalhoub e Garcia [16] o método de ordenadas discretas foi introduzido por Wick e Chandrasekhar na década de quarenta. A versão original do método, conhecida na literatura como método de Wick-Chandrasekhar, se baseava em aproximar a integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma quadratura numérica e em resolver analiticamente o conjunto de equações diferenciais ordinárias resultante para a função de distribuição de partículas nos pontos de quadratura. Posteriormente Chandrasekhar [17] continuou a desenvolver o método que passou a ser usado por vários outros autores na resolução de problemas de transferência radiativa. Depois disso, além dos procedimentos numéricos clássicos baseados principalmente em aproximações por diferenças finitas [22], outras abordagens de caráter analítico foram propostas para solução das equações S_N, como os métodos $SGFS_N$ [6] e LTS_N [29, 5, 30] e ainda diferentes esquemas de quadratura vem sendo investigados [13, 15, 14].

Uma dificuldade na aplicação da solução em ordenadas discretas como proposta por Chandrasekhar [17] reside basicamente no cálculo das constantes de separação associadas às soluções elementares do problema, que são encontradas como raízes de uma função característica. Em um trabalho recente Barichello e Siewert

[4] mostraram a equivalência entre o método de harmônicos esféricos e o de ordenadas discretas, a partir de uma versão modificada da solução proposta por Chandrasekhar onde agora, tal como na solução por harmônicos esféricos [7] as constantes de separação podem ser encontradas como autovalores de uma matriz. Abordagem semelhante a [4] foi usada para obtenção de uma solução em ordenadas discretas para o fluxo de Poiseuille em um canal plano, no entanto a partir de esquemas de quadratura do tipo "half-range" [2]. No caso dessa abordagem, as constantes de separação podem ser encontradas como autovalores de um tipo especial de matriz na forma diagonal mais uma matriz de posto um.

Neste trabalho a solução em ordenadas discretas apresentada em [2] para o problema do fluxo de Poiseuille é reavaliada usando agora subroutinas específicas para o problema de autovalores simplificado. Além disso problemas em meio semi-infinito são também tratados. Ainda, uma versão recentemente apresentada por Siewert [25] para o problema clássico de Chandrasekhar de transferência radiativa, diferenciada da anterior basicamente pela forma de calcular as componentes independentes da parte espacial das soluções elementares, é aqui aplicada à uma classe de problemas da dinâmica de gases rarefeitos baseados no modelo BGK linearizado.

Assim no capítulo 2 apresentamos o problema do fluxo de Poiseuille e no capítulo 3 os problemas "Creep" Térmico e Deslizamento Viscoso em meio semi-infinito, apresentando para cada um deles uma solução em ordenadas discretas com duas abordagens diferenciadas, uma avaliando analiticamente as soluções elementares e outra numericamente, sendo que para estas duas avaliações designamos os respectivos nomes de primeira e segunda abordagem. No capítulo 4 discutimos suscintamente o problema de autovalores $\mathbf{D}+\rho\mathbf{z}\mathbf{z}^T$ e mostramos os resultados numéricos obtidos a partir das duas abordagens desenvolvidas para os problemas apresentados nos capítulos 2 e 3. Finalmente, algumas conclusões são apresentadas no capítulo 5.

2 MODELAGEM DO PROBLEMA

Na descrição do fluxo de um gás rarefeito entre duas placas paralelas, um problema básico a ser resolvido [veja anexo A-1] é dado pela equação

$$\frac{1}{2}\kappa\theta + \mu\frac{\partial}{\partial\tau}Z(\tau,\mu) + Z(\tau,\mu) = \pi^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2}Z(\tau,u)du \tag{2.1}$$

para $\tau \in (-\delta/2, \delta/2)$ e $\mu \in (-\infty, \infty)$, com condições de contorno

$$Z(-\delta/2,\mu) = (1-\alpha)Z(-\delta/2,-\mu) \tag{2.2}$$

e

$$Z(\delta/2,-\mu) = (1-\alpha)Z(\delta/2,\mu) \tag{2.3}$$

para $\mu \in (0,\infty)$. Seguindo [26], obtemos uma versão homogênia do problema (2.1) introduzindo

$$Z(\tau,\mu) = \frac{\kappa\theta}{2}[\tau^2 - 2\tau\mu + 2\mu^2 - a^2 - 2Y(\tau,\mu)] \tag{2.4}$$

nas equações (2.1) a (2.3), resultando que $Y(\tau,\mu)$ deve satisfazer

$$\mu\frac{\partial}{\partial\tau}Y(\tau,\mu) + Y(\tau,\mu) = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(u)Y(\tau,u)du \tag{2.5}$$

para $\tau \in (-a, a)$ e $\mu \in (-\infty, \infty)$, com condições de contorno

$$Y(-a, \mu) = (1 - \alpha)Y(-a, -\mu) + \alpha\mu^2 + a\mu(2 - \alpha) \tag{2.6}$$

e

$$Y(a, -\mu) = (1 - \alpha)Y(a, \mu) + \alpha\mu^2 + a\mu(2 - \alpha) \tag{2.7}$$

para $\mu \in (0, \infty)$. Estamos denotando aqui

$$\psi(\mu) = \pi^{-1/2}e^{-\mu^2} \tag{2.8}$$

e ainda $2a = \delta$.

Nas seções a seguir descrevemos a obtenção de soluções para o problema em $Y(\tau, \mu)$ através do método de ordenadas discretas, a partir de duas abordagens diferenciadas para o cálculo das componentes independentes da parte espacial das soluções elementares.

2.1 Solução em Ordenadas Discretas

Para obtenção de uma solução em ordenadas discretas, observamos inicialmente que a função característica $\psi(\mu)$, dada pela equação (2.8) é uma função par e seguindo Barichello e Siewert [1] reescrevemos o termo integral da equação (2.5) como sendo uma integral definida somente de zero a infinito (fazendo as devidas mudanças de variáveis) e esse novo termo integral aproximamos por um esquema de quadratura definido então para metade do domínio, e com isso podemos escrever as equações em ordenadas discretas na forma

$$\mu_i \frac{d}{d\tau} Y(\tau, \mu_i) + Y(\tau, \mu_i) = \sum_{k=1}^{N} w_\kappa \psi(\mu_\kappa)[Y(\tau, \mu_\kappa) + Y(\tau, -\mu_\kappa)] \tag{2.9}$$

e

$$-\mu_i \frac{d}{d\tau} Y(\tau, -\mu_i) + Y(\tau, -\mu_i) = \sum_{k=1}^{N} w_\kappa \psi(\mu_\kappa)[Y(\tau, \mu_\kappa) + Y(\tau, -\mu_\kappa)] \tag{2.10}$$

para $i = 1, ..., N$. Devemos observar que o conjunto de pesos e raízes da quadratura aqui usados definem um esquema para avaliação de uma integral no intervalo $[0, 1]$.

Procurando soluções do tipo exponenciais para as equações (2.9) e (2.10), substituimos nessas equações as soluções elementares

$$Y(\tau, \pm\mu_i) = \phi(\nu, \pm\mu_i)e^{-\tau/\nu} \tag{2.11}$$

onde ν é a constante de separação a as funções ϕ denotam o que chamamos de componentes independentes da parte espacial das soluções elementares.

Substituindo nas equações (2.9) e (2.10) a expressão (2.11) obtemos as seguintes equações em forma matricial

$$\frac{1}{\nu}\boldsymbol{\Xi}\boldsymbol{\Phi}_+(\nu) = (\mathbf{I} - \mathbf{W})\boldsymbol{\Phi}_+(\nu) - \mathbf{W}\boldsymbol{\Phi}_-(\nu) \tag{2.12}$$

e

$$-\frac{1}{\nu}\Xi\boldsymbol{\Phi}_{-}(\nu) = (\mathbf{I}-\mathbf{W})\boldsymbol{\Phi}_{-}(\nu) - \mathbf{W}\boldsymbol{\Phi}_{+}(\nu) \tag{2.13}$$

sendo que

$$\Xi = \text{diag}\{\mu_1, \mu_2, \mu_3, ..., \mu_N\} \ , \tag{2.14}$$

$$\boldsymbol{\Phi}_{\pm}(\nu) = [\phi(\nu, \pm\mu_1), \phi(\nu, \pm\mu_2), ..., \phi(\nu, \pm\mu_N)]^T \ , \tag{2.15}$$

$\mathbf{I}$ é a matriz identidade $N \times N$, e os elementos da matriz $\mathbf{W}$ de posto um são dados pela expressão

$$(\mathbf{W})_{i,j} = w_j \psi(\mu_j) \tag{2.16}$$

onde w_j denota os pesos da quadratura.

Pela adição e subtração das equações (2.12) e (2.13) obtemos ainda as relações

$$\frac{1}{\nu}\Xi\left[\boldsymbol{\Phi}_{+}(\nu) - \boldsymbol{\Phi}_{-}(\nu)\right] = (\mathbf{I} - 2\mathbf{W})\left[\boldsymbol{\Phi}_{+}(\nu) + \boldsymbol{\Phi}_{-}(\nu)\right] \tag{2.17}$$

e

$$\frac{1}{\nu}\Xi\left[\mathbf{\Phi}_{+}(\nu)+\mathbf{\Phi}_{-}(\nu)\right]=\mathbf{\Phi}_{+}(\nu)-\mathbf{\Phi}_{-}(\nu)\,. \tag{2.18}$$

Propomos, neste ponto, duas abordagens diferentes para o desenvolvimento da solução do problema de equações (2.5) a (2.7) e consequentemente para o problema dado pelas equações (2.1) a (2.3), descritas a seguir.

2.2 Soluções Elementares: uma abordagem analítica

Para desenvolver esta primeira abordagem, seguimos [2] substituindo na equação (2.17) a expressão (2.18) obtendo

$$(\mathbf{D}-2\Xi^{-1}\mathbf{W}\Xi^{-1})\Xi\mathbf{U}=\frac{1}{\nu^2}\Xi\mathbf{U} \tag{2.19}$$

onde

$$\mathbf{U}=\mathbf{\Phi}_{+}(\nu)+\mathbf{\Phi}_{-}(\nu) \tag{2.20}$$

e

$$\mathbf{D}=\mathrm{diag}\{\mu_1^{-2},\mu_2^{-2},...,\mu_N^{-2}\}. \tag{2.21}$$

Buscando obter matrizes simétricas, definimos uma matriz $\mathbf{T}$ cujos elementos T_i são tais que

$$T_i\sqrt{w_j\psi(\mu_j)} = T_j\sqrt{w_i\psi(\mu_i)}\ , \tag{2.22}$$

para $i, j = 1, ..., N$. Multiplicando a equação (2.19) por essa matriz diagonal $\mathbf{T}$ obtemos

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{M})\mathbf{X} = \frac{1}{\nu^2}\mathbf{X} \tag{2.23}$$

onde

$$\mathbf{M} = \mathbf{\Xi}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{W}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{\Xi}^{-1} \tag{2.24}$$

é uma matriz simétrica de posto um, e

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{\Xi}\mathbf{U}\ . \tag{2.25}$$

Assim o problema de autovalores dado pela equação (2.23), pode ser reescrito na forma

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{z}\mathbf{z}^T)\mathbf{X} = \xi\mathbf{X} \tag{2.26}$$

onde $\xi = 1/\nu^2$ e

$$\mathbf{z} = \left[\frac{\sqrt{w_1\psi(\mu_1)}}{\mu_1}, \frac{\sqrt{w_2\psi(\mu_2)}}{\mu_2}, ..., \frac{\sqrt{w_N\psi(\mu_N)}}{\mu_N}\right]^T . \tag{2.27}$$

O problema de autovalores definido pela equação (2.26) é um caso especial que faz parte do formalismo usado pelo método "divide and conquer" [20] para o cálculo de autovalores de matrizes tridiagonais (aspecto que vamos explorar na obtenção dos resultados numéricos mostrados posteriormente).

Considerando que tenhamos encontrado os autovalores pela equação (2.26), impomos a condição de normalização

$$\sum_{\kappa=1}^{N} w_\kappa \psi(\mu_\kappa) \left[\phi(\nu, \mu_\kappa) + \phi(\nu, -\mu_\kappa)\right] = 1 \tag{2.28}$$

e escrevemos a solução em ordenadas discretas como

$$Y(\tau, \pm\mu_i) = \sum_{j=1}^{N} \left[A_j \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \mu_i} e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \frac{\nu_j}{\nu_j \pm \mu_i} e^{-(a-\tau)/\nu_j} \right] \tag{2.29}$$

sendo que as constantes arbitrárias $\{A_j\}$ e $\{B_j\}$, podem ser determinadas pelas condições de contorno do problema e as constantes de separação $\{\nu_j\}$ são o recíproco das raízes quadradas positivas dos autovalores definidos pela equação (2.26). Notamos ainda que as soluções elementares em (2.11) ficam analiticamente definidas.

Lembrando que problemas baseados na equação (2.5) são conservativos, uma vez que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mu) d\mu = 1 \ , \tag{2.30}$$

esperamos que um dos autovalores definidos pela equação (2.26) tenda a zero quando N tender ao infinito. Levando em conta este fato, negligenciamos a maior constante de separação entre as $\{\nu_j\}$ computadas, reescrevendo a equação (2.29) como

$$Y(\tau, \pm\mu_i) = A + B(\tau \mp \mu_i) + \sum_{j=1}^{N-1} \Big[A_j \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \mu_i} e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \frac{\nu_j}{\nu_j \pm \mu_i} e^{-(a-\tau)/\nu_j}\Big]. \quad (2.31)$$

Para definir as constantes A, B, $\{A_j\}$ e $\{B_j\}$ substituimos a equação (2.31) nas condições de contorno avaliadas nos pontos de quadratura $\{\mu_i\}$, gerando o seguinte sistema de equações algébricas lineares

$$\sum_{j=1}^{N-1} \Big\{A_j \nu_j \Big[\frac{\alpha\nu_j + \mu_i(2-\alpha)}{\nu_j^2 - \mu_i^2}\Big] + B_j \nu_j \Big[\frac{\alpha\nu_j - \mu_i(2-\alpha)}{\nu_j^2 - \mu_i^2}\Big] e^{-2a/\nu_j}\Big\} +$$
$$\alpha A - B[\alpha a + \mu_i(2-\alpha)] = \alpha\mu_i^2 + a\mu_i(2-\alpha) \qquad (2.32)$$

e

$$\sum_{j=1}^{N-1} \Big\{A_j \nu_j \Big[\frac{\alpha\nu_j - \mu_i(2-\alpha)}{\nu_j^2 - \mu_i^2}\Big] e^{-2a/\nu_j} + B_j \nu_j \Big[\frac{\alpha\nu_j + \mu_i(2-\alpha)}{\nu_j^2 - \mu_i^2}\Big]\Big\} +$$
$$\alpha A + B[\alpha a + \mu_i(2-\alpha)] = \alpha\mu_i^2 + a\mu_i(2-\alpha)\ , \qquad (2.33)$$

para $i = 1, 2, ..., N$.

A resolução do sistema formado pelas equações (2.32) e (2.33) deixa a solução em ordenadas discretas (considerando esta primeira abordagem) para o problema proposto pelas equações (2.5) a (2.7) completamente definida.

2.3 Soluções Elementares: uma abordagem numérica

Na segunda abordagem proposta, inicialmente reescrevemos as equações (2.17) e (2.18) como

$$(\mathbf{I} - 2\mathbf{W})\mathbf{U} = \frac{1}{\nu}\boldsymbol{\Xi}\mathbf{V} \tag{2.34}$$

e

$$\mathbf{V} = \frac{1}{\nu}\boldsymbol{\Xi}\mathbf{U} \tag{2.35}$$

onde

$$\mathbf{U} = \boldsymbol{\Phi}_{+}(\nu) + \boldsymbol{\Phi}_{-}(\nu) \tag{2.36}$$

e

$$\mathbf{V} = \boldsymbol{\Phi}_{+}(\nu) - \boldsymbol{\Phi}_{-}(\nu) \ . \tag{2.37}$$

Multiplicando as equações (2.34) e (2.35) pela matriz $\mathbf{T}$ definida como em (2.22), obtemos os seguintes problemas de autovalores

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{z}\mathbf{z}^{\mathbf{T}})\mathbf{X} = \xi\mathbf{X} \tag{2.38}$$

e

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{z}\mathbf{z}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{\Upsilon} = \xi\boldsymbol{\Upsilon} \tag{2.39}$$

onde $\xi = 1/\nu^2$,

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\boldsymbol{\Xi}\mathbf{U} \tag{2.40}$$

e

$$\boldsymbol{\Upsilon} = \mathbf{T}\boldsymbol{\Xi}\mathbf{V}\ . \tag{2.41}$$

Continuando, assumimos que a equação (2.38) define autovalores positivos e um conjunto completo de autovetores onde ξ_j e $\mathbf{X}(\xi_j)$, para $j = 1, 2, ..., N$, denotam esta coleção . As constantes de separação que precisamos claramente ocorrem aos pares, sendo assim tomamos ν_j, para $j = 1, 2, ..., N$, como sendo o recíproco da raiz positiva de ξ_j. Admitindo essas considerações e fazendo algumas manipulações algébricas com as equações (2.40) e (2.41) obtemos finalmente

$$\boldsymbol{\Phi}_+(\nu_j) = \frac{1}{2}\Big[\Big(\boldsymbol{\Xi}^{-1} + \frac{1}{\nu_j}\mathbf{I}\Big)\mathbf{T}^{-1}\Big]\mathbf{X}(\xi_j) \tag{2.42}$$

e

$$\boldsymbol{\Phi}_-(\nu_j) = \frac{1}{2}\Big[\Big(\boldsymbol{\Xi}^{-1} - \frac{1}{\nu_j}\mathbf{I}\Big)\mathbf{T}^{-1}\Big]\mathbf{X}(\xi_j)\ . \tag{2.43}$$

Tendo encontrado estas expressões para $\mathbf{\Phi}_+(\nu_j)$ e $\mathbf{\Phi}_-(\nu_j)$, onde os vetores $\mathbf{X}(\xi_j)$ são avaliados numericamente, podemos escrever nossa solução em ordenadas discretas já considerando que o problema é conservativo (como mencionado na seção anterior) como

$$\mathbf{Y}_+(\tau) = A\mathbf{\Pi}(0)+B[\tau\mathbf{\Pi}(0)-\mathbf{\Pi}(1)]+\sum_{j=1}^{N-1}\left[A_j\mathbf{\Phi}_+(\nu_j)e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j\mathbf{\Phi}_-(\nu_j)e^{-(a-\tau)/\nu_j}\right] \tag{2.44}$$

$$\mathbf{Y}_-(\tau) = A\mathbf{\Pi}(0)+B[\tau\mathbf{\Pi}(0)+\mathbf{\Pi}(1)]+\sum_{j=1}^{N-1}\left[A_j\mathbf{\Phi}_-(\nu_j)e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j\mathbf{\Phi}_+(\nu_j)e^{-(a-\tau)/\nu_j}\right] \tag{2.45}$$

onde

$$\mathbf{Y}_+(\tau) = \left[Y(\tau,\mu_1), Y(\tau,\mu_2), ..., Y(\tau,\mu_N)\right]^T \tag{2.46}$$

$$\mathbf{Y}_-(\tau) = \left[Y(\tau,-\mu_1), Y(\tau,-\mu_2), ..., Y(\tau,-\mu_N)\right]^T, \tag{2.47}$$

$$\mathbf{\Pi}(l) = \left[P_l(\mu_1), P_l(\mu_2), ..., P_l(\mu_N)\right]^T \tag{2.48}$$

e como na equação (2.15)

$$\mathbf{\Phi}_\pm(\nu) = \left[\phi(\nu,\pm\mu_1), \phi(\nu,\pm\mu_2), ..., \phi(\nu,\pm\mu_N)\right]^T. \tag{2.49}$$

Temos que definir as constantes A, B, $\{A_j\}$ e $\{B_j\}$. Como na seção anterior, substituimos as equações (2.44) e (2.45) nas condições de contorno de equações (2.6) e (2.7), avaliadas nos pontos de quadratura $\{\mu_i\}$, gerando o seguinte sistema de equações algébricas lineares

$$\sum_{j=1}^{N-1} A_j \left[\mathbf{\Phi}_+(\nu_j) + (\alpha - 1)\mathbf{\Phi}_-(\nu_j)\right] + \sum_{j=1}^{N-1} B_j \left[\mathbf{\Phi}_-(\nu_j) + (\alpha - 1)\mathbf{\Phi}_+(\nu_j)\right] e^{-2a/\nu_j} +$$
$$\alpha A \mathbf{\Pi}(0) - B\left[\alpha a \mathbf{\Pi}(0) + \mathbf{\Pi}(1)(2-\alpha)\right] = \alpha \mathbf{\Pi}^2(1) + a\mathbf{\Pi}(1)(2-\alpha) \quad (2.50)$$

e

$$\sum_{j=1}^{N-1} A_j \left[\mathbf{\Phi}_-(\nu_j) + (\alpha - 1)\mathbf{\Phi}_+(\nu_j)\right] e^{-2a/\nu_j} + \sum_{j=1}^{N-1} B_j \left[\mathbf{\Phi}_+(\nu_j) + (\alpha - 1)\mathbf{\Phi}_-(\nu_j)\right] +$$
$$\alpha A \mathbf{\Pi}(0) + B\left[\alpha a \mathbf{\Pi}(0) + \mathbf{\Pi}(1)(2-\alpha)\right] = \alpha \mathbf{\Pi}^2(1) + a\mathbf{\Pi}(1)(2-\alpha). \quad (2.51)$$

Com a resolução desse sistema determinamos completamente a solução em ordenadas discretas (considerando esta segunda abordagem) para o problema de equações (2.5) a (2.7).

No capítulo 4, apresentamos alguns resultados numéricos obtidos a partir das duas abordagens apresentadas nesse capítulo para o problema do fluxo de Poiseuille.

3 MEIO SEMI-INFINITO

Desenvolvemos neste capítulo, usando ambas as abordagens propostas no capítulo anterior, dois problemas clássicos em meio semi-infinito conhecidos "Creep" Térmico e Deslizamento Viscoso. Nesse caso nosso objetivo também é de comparação com os resultado obtidos por Camargo [10].

3.1 O Problema do "Creep" Térmico

Como Loyalka, Petrellis e Storvick [23], expressamos o problema do "Creep" Térmico pelas equações

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \Upsilon(\tau, \mu) + \Upsilon(\tau, \mu) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} \Upsilon(\tau, u) du \tag{3.1}$$

com condições de contorno

$$\lim_{\tau \to \infty} \Upsilon(\tau, \mu) = 0 \tag{3.2}$$

e

$$\Upsilon(0, \mu) = (1 - \alpha)\Upsilon(0, -\mu) - \frac{\alpha}{2} A_T + \frac{1}{2}\alpha\Big(\mu^2 - \frac{1}{2}\Big), \quad \mu > 0 \tag{3.3}$$

onde α é a fração de moléculas incidentes que são difusivamente refletidas a partir da parede, e A_T é a velocidade de deslizamento térmico que neste momento é uma constante desconhecida. Esse problema retrata fisicamente a expansão de um gás em domínio semi-infinito (mantido a uma pressão constante p) limitado por uma placa plana localizada em $\tau = 0$.

Fazendo a transformação

$$\Upsilon(\tau, \mu) = Y(\tau, \mu) - \frac{1}{2} A_T \tag{3.4}$$

obtemos o problema

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} Y(\tau, \mu) + Y(\tau, \mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(u) Y(\tau, u) du \tag{3.5}$$

para $\tau \in (0, \infty)$ e $\mu \in (-\infty, \infty)$, com condições de contorno

$$\lim_{\tau \to \infty} Y(\tau, \mu) = A \tag{3.6}$$

e

$$Y(0, \mu) = (1 - \alpha) Y(0, -\mu) + \frac{1}{2} \alpha \left(\mu^2 - \frac{1}{2}\right), \quad \mu > 0 \tag{3.7}$$

onde $A = A_T/2$, $\alpha \in (0, 1]$ e

$$\psi(\mu) = \pi^{-1/2} e^{-\mu^2} . \tag{3.8}$$

Propomos, neste momento, desenvolver a solução do problema definido pelas equações (3.5) a (3.7) usando duas abordagens diferentes, como fizemos para o problema descrito no capítulo 2.

3.1.1 Uma abordagem analítica

Seguindo o que foi desenvolvido na primeira abordagem do problema finito (seção 2.2), partimos da equação (2.28) e escrevemos nossa solução em ordenadas discretas para o problema em meio semi-infinito como

$$Y(\tau, \pm\mu_i) = A + \sum_{j=1}^{N-1} A_j \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \mu_i} e^{-\tau/\nu_j} \tag{3.9}$$

já considerando que estamos tratando de um problema conservativo, notando também que essa solução satisfaz a equação (3.6).

Para definir as constantes A e $\{A_j\}$, substituimos a equação (3.9) na condição de contorno (3.7) avaliada nos pontos de quadratura $\{\mu_i\}$, o que gera o seguinte sistema de equações algébricas lineares

$$\sum_{j=1}^{N-1} A_j \nu_j \Big[\frac{\alpha\nu_j + \mu_i(2-\alpha)}{\nu_j^2 - \mu_i^2}\Big] + \alpha A = \frac{1}{2}\alpha\Big(\mu_i^2 - \frac{1}{2}\Big) \tag{3.10}$$

para $i = 1, 2, ..., N$.

Tendo encontrado as constantes A e $\{A_j\}$ pela resolução do sistema acima, completamos a solução em ordenadas discretas (considerando esta primeira abordagem) para o problema em meio semi-infinito de equações (3.5) a (3.7).

3.1.2 Uma abordagem numérica

Procedendo como na segunda abordagem do problema finito (seção 2.3), partimos da equação (2.43) e escrevemos nossa solução em ordenadas discretas para o problema semi-infinito do "Creep" Térmico como

$$\mathbf{Y}_+(\tau) = A\mathbf{\Pi}(0) + \sum_{j=1}^{N-1} A_j \mathbf{\Phi}_+(\nu_j) e^{-\tau/\nu_j} \tag{3.11}$$

e

$$\mathbf{Y}_-(\tau) = A\mathbf{\Pi}(0) + \sum_{j=1}^{N-1} A_j \mathbf{\Phi}_-(\nu_j) e^{-\tau/\nu_j}\ , \tag{3.12}$$

pois o problema que estamos considerando aqui, como já mencionado na seção anterior, é um problema conservativo e ainda temos que essas equações satisfazem a condição de contorno (3.6).

Pela substituição das equações (3.11) e (3.12) na condição de contorno (3.7) avaliada nos pontos de quadratura $\{\mu_i\}$, geramos o seguinte sistema de equações algébricas lineares para cálculo das constantes A e $\{A_j\}$:

$$\sum_{j=1}^{N-1} A_j[\mathbf{\Phi}_+(\nu_j) + (\alpha - 1)\mathbf{\Phi}_-(\nu_j)] + \alpha A\mathbf{\Pi}(0) = \frac{1}{2}\alpha[\mathbf{\Pi}^2(1) - \frac{1}{2}\mathbf{\Pi}(0)]. \tag{3.13}$$

Resolvendo o sistema formado pela equação (3.13) definimos completamente a solução em ordenadas discretas (considerando a segunda abordagem) para o problema proposto pelas equações (3.5) a (3.7).

3.2 O Problema de Deslizamento Viscoso

Segundo Loyalka, Petrellis e Storvick [23], o problema de Deslizamento Viscoso pode ser descrito como

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} Y(\tau, \mu) + Y(\tau, \mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(u) Y(\tau, u) du \tag{3.14}$$

para $\tau \in (0, \infty)$ e $\mu \in (-\infty, \infty)$, com condições de contorno

$$\lim_{\tau \to \infty} Y(\tau, \mu) = A_P \tag{3.15}$$

e

$$Y(0, \mu) = (1 - \alpha) Y(0, -\mu) + (2 - \alpha)\mu \ , \quad \mu > 0 \tag{3.16}$$

onde $\alpha \in (0, 1]$ é a fração incidente de moléculas que são difusivamente refletidas a partir da parede, A_P que até então é uma constante desconhecida representa a velocidade de deslizamento viscoso, e

$$\psi(\mu) = \pi^{-1/2} e^{-\mu^2} \ . \tag{3.17}$$

Este problema consiste em encontrar a função de distribuição molecular de um gás que preenche o semi-espaço $\tau > 0$ limitado por uma placa plana localizada em τ=0. O gás é não uniforme, pois há um gradiente de velocidade ao longo do eixo

τ na componente z da velocidade macroscópica. Este gradiente torna-se constante quando $\tau \to \infty$.

Propomos desenvolver a solução deste problema de Deslizamento Viscoso usando as duas abordagens descritas no capítulo 2.

3.2.1 Uma abordagem analítica

Partimos da equação (2.28) e escrevemos nossa solução em ordenadas discretas para o problema semi-infinito de Deslizamento Viscoso, conforme descrito na seção (2.2) como

$$Y(\tau, \pm\mu_i) = A_P + \sum_{j=1}^{N-1} A_j \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \mu_i} e^{-\tau/\nu_j} \tag{3.18}$$

já considerando que estamos tratando de um problema conservativo e observando que essa solução satisfaz a condição de contorno (3.15).

Para definir as constantes A_P e $\{A_j\}$ substituimos a equação (3.18) na condição de contorno (3.16) avaliada nos pontos de quadratura $\{\mu_i\}$, resultando que

$$\sum_{j=1}^{N-1} A_j \nu_j \Big[\frac{\alpha\nu_j + \mu_i(2-\alpha)}{\nu_j^2 - \mu_i^2}\Big] + \alpha A_P = (2-\alpha)\mu_i \tag{3.19}$$

para $i = 1, 2, ..., N$, sendo que a solução desse sistema de equações algébricas lineares completa a determinação da solução em ordenadas discretas (considerando a primeira abordagem) para o problema de Deslizamento Viscoso.

3.2.2 Uma abordagem numérica

Em analogia aos procedimentos feitos na segunda abordagem do problema finito (seção 2.3), escrevermos nossa solução em ordenadas discretas para o problema de Deslizamento Viscoso, partindo da equação (2.43), como

$$\mathbf{Y}_+(\tau) = A_P\mathbf{\Pi}(0) + \sum_{j=1}^{N-1} A_j\mathbf{\Phi}_+(\nu_i)e^{-\tau/\nu_j} \tag{3.20}$$

e

$$\mathbf{Y}_-(\tau) = A_P\mathbf{\Pi}(0) + \sum_{j=1}^{N-1} A_j\mathbf{\Phi}_-(\nu_i)e^{-\tau/\nu_j} \ , \tag{3.21}$$

pois o problema que estamos considerando aqui como já mencionado na seção anterior, é um problema conservativo.

Substituindo as equações (3.20) e (3.21) na condição de contorno (3.16) avaliada nos pontos de quadratura $\{\mu_i\}$, originamos o seguinte sistema de equações algébricas lineares cuja solução define as constantes A_P e $\{A_j\}$

$$\sum_{j=1}^{N-1} A_j[\mathbf{\Phi}_+(\nu_j) + (\alpha - 1)\mathbf{\Phi}_-(\nu_j)] + \alpha A_P\mathbf{\Pi}(0) = \mathbf{\Pi}(1)(2-\alpha) \ . \tag{3.22}$$

Tendo definido as constantes A_P e $\{A_j\}$, a solução em ordenadas discretas (considerando a segunda abordagem) para o problema de Deslizamento Viscoso fica totalmente determinada.

No próximo capítulo apresentamos alguns resultados numéricos para os dois problemas apresentados neste capítulo, usando as duas abordagens propostas.

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

4.1 Descrição Geral

O que primeiro devemos definir, na busca pelos resultados numéricos para os problemas descritos nos capítulos 2 e 3 é o esquema de quadratura a ser usado na solução em ordenadas discretas. A primeira escolha, é pelo uso da transformação

$$u(\mu) = \frac{1}{1+\mu}\,, \tag{4.1}$$

ou da transformação

$$u(\mu) = e^{-\mu}, \tag{4.2}$$

para mapear o intervalo $[0, \infty)$ sob $[0, 1]$, para então usarmos o esquema de Gauss-Legendre mapeado no intervalo $[0, 1]$. Feito isto, extendemos o esquema de quadratura para todo o intervalo $(-\infty, \infty)$ pelo caminho indicado pelas equações (2.9) e (2.10) do capítulo 2. Tendo definido o esquema de quadratura, calculamos então as constantes de separação $\{\nu_j\}$ pela resolução do problema de autovalores definido pela equação (2.26). Diferentemente de [2] podemos utilizar a subroutina UPDATER [28], recentemente desenvolvida para considerar a forma especial da equação (2.26), pois até então, casos como estes, vinham tendo seus autovalores calculados, por exemplo, pela subroutina RG, do pacote matemático EISPACK [27], causando assim um esforço computacional desnecessário.

Para resolução do sistema linear envolvido, usamos as subroutinas DGECO e DGESL (eliminação de Gauss) do pacote matemático LINPACK [18].

4.2 O problema de autovalores $\mathbf{D} + \rho \mathbf{z}\mathbf{z}^T$

Problemas de autovalores na forma da equação (2.26) têm sido muito estudados na Álgebra Linear, em especial, há uma seção 8.6.3 do livro de Golub e Van Loan [20] que trata amplamente desta questão. Segundo relatos de Siewert e Wright em [28] o que se conhece, é que se todos os componentes do vetor $\mathbf{z}$ são não nulos, então os autovalores ξ_i definidos pela equação (2.26) são os N zeros da função

$$f(\xi) = 1 - 2\mathbf{z}^T(\mathbf{D} - \xi\mathbf{I})^{-1}\mathbf{z} \ . \tag{4.3}$$

Pela definição da matriz $\mathbf{D}$ dada na equação (2.21), é fácil de perceber que a função acima definida tem polos nos autovalores de $\mathbf{D}$, isto é $(\mu_1^{-2}, \mu_2^{-2}, ..., \mu_N^{-2})$, e que é monótona decrescente entre estes polos. Se os μ_i são ordenados pela forma usual, temos que os autovalores ξ_i estão relacionados com a diagonal de $\mathbf{D}$ da seguinte forma:

$$\mu_1^{-2} > \xi_1 > \mu_2^{-2} > \xi_2 > ... > \mu_N^{-2} > \xi_N. \tag{4.4}$$

Se alguns componentes de $\mathbf{z}$ são nulos, algumas das desigualdades anteriores tornam-se igualdades. Em particular, nós temos $\xi_i = \mu_i^{-2}$ sempre que $z_i = 0$.

Os autovalores ξ_i são calculados identificando-se as raízes da função definida pela equação (4.3) em cada intervalo $(\mu_{i+1}^{-2}, \mu_i^{-2})$, $i = 1, 2, ..., N-1$ e $(-\infty, \mu_N^{-2})$. Um pré-processo é executado para tratar de todos os componentes de $\mathbf{z}$, o que produz um problema reduzido no qual todos os elementos do vetor atualizado são não nulos, permitindo que seja feita uma identificação entre os autovalores ξ_i e os zeros das N raízes do polinômio de equação (4.3). Ainda segundo [28], o número de operações total é $O(N^2)$, sendo que para encontrar cada uma das N raízes é necessário um modesto número de avaliações da função f [equação (4.3)] e de suas derivadas, onde cada uma dessas avaliações requer $O(N)$ operações aritméticas. Esta complexidade compara-se favoravelmente com a complexidade $O(N^3)$ requerida ao se usar um sistema cheio para o cálculo de autovalores de equações que têm a forma da equação (2.26).

Como mencionado anteriormente, o problema de encontrar autovalores de matrizes que são perturbações de matrizes de posto um com autovalores que são desconhecidos, surge também no contexto do método "divide and conquer" para matrizes tridiagonais. Sendo assim, reunindo várias modificações das subroutinas do pacote matemático LAPACK [19], Siewert e Wright [28] idealizaram a subroutina UPDATER que calcula autovalores e autovetores definidos como na equação (2.26) usando as aproximações relatadas nessa seção . Fizemos então uso dessa subroutina para encontrar os autovalores e os autovetores de ambas as abordagens, analítica e numérica, de cada um dos problemas desenvolvidos nesse trabalho. A subroutina UPDATER pode ser encontrada no seguinte site

http://www.mcs.anl.gov/~wright/dzpack/

4.3 Aplicações

Na avaliação dos nossos resultados numéricos, voltamos nossas atenções para o que Loyalka, Petrellis e Storvick relatam na referência [24], avaliando para vários valores do coeficiente de acomodação α a taxa de fluxo Q, com valores inversos do número de Knudsen $2a \in [0.05, 10]$ e o perfil de velocidade $q(\tau)$ para o caso $2a = 2.0$, bem como para o que Siewert, Garcia e Grandjean relatam na referência [26] para a taxa de fluxo Q sendo 2a $\in$ [0.001, 100] e $\alpha = 1$. Loyalka, Petrellis e Storvick descrevem na referência [23] resultados numéricos a respeito dos problemas "Creep" Térmico e Deslizamento Viscoso, com os quais respectivamente comparamos os nossos resultados para as velocidades macroscópicas $q_T(\tau)$ e $q_P(\tau)$, e para as velocidades de deslizamento térmico e viscoso (A_T e A_P respectivamente).

Considerando nossos resultados a partir de $N = 30$, confirmamos com mais ou menos uma unidade no último dígito, todos os resultados para o fluxo de Poiseuille listados com cinco dígitos de precisão nas referências [24] e [26]. O mesmo acontece com os problemas "Creep" Térmico e Deslizamento Viscoso ao compararmos nossos resultados a partir de $N = 24$ para as velocidades macroscópicas $q_T(\tau)$ e $q_P(\tau)$, e para as velocidades A_T e A_P, listados com seis e sete dígitos de precisão na referência [23].

Devemos destacar que o uso da segunda transformação no mapeamento dada pela equação (4.2), proporciona resultados mais satisfatórios e estáveis para os mesmos valores de N, então por esse motivo todos os resultados desse trabalho foram obtidos somente pelo uso dessa transformação. Um outro ponto importante a ser ressaltado com relação aos resultados numéricos é que na primeira abordagem apresentada neste trabalho, temos alguns casos onde as constantes de separação ν_j são iguais aos pontos de quadratura ξ_i, o que não é permitido pelas equações (2.31), (3.9) e (3.18), sendo assim, omitimos esses pontos de quadratura dos nossos cálculos sem causar nenhuma consequência, já que nesses pontos a função característica $\psi(\mu)$ é efetivamente nula, não contribuindo portanto para o lado direito das equações (2.9) e (2.10).

Tendo encontrado concordância com os resultados das referências citadas, e para estabelecer alguma confiança nas soluções desenvolvidas com ambas as abordagens, vamos mostrar alguns resultados numéricos que encontramos usando nossa solução em ordenadas discretas para cada um dos problemas descritos nos capítulos 2 e 3.

4.3.1 O problema do fluxo de Poiseuille

4.3.1.1 Resultados da primeira e segunda abordagem

Para calcular o perfil de velocidade macroscópica com a primeira abordagem do problema descrito no capítulo 2 usamos

$$q(\tau) = \frac{1}{\kappa\theta}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mu) Z(\tau, \mu) d\mu \tag{4.5}$$

que pela equação (2.4) resulta em

$$q(\tau) = \frac{1}{2}(1 - a^2 + \tau^2) - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mu) Y(\tau, \mu) d\mu \ , \tag{4.6}$$

e para a taxa de fluxo

$$Q = -\frac{1}{2a^2} \int_{-a}^{a} q(\tau) d\tau \ . \tag{4.7}$$

Com o uso da condição de normalização dada pela equação (2.28) e da equação (2.31) para resolver o termo integral da equação (4.6), encontramos para o perfil de velocidade macroscópica a expressão

$$q(\tau) = \frac{1}{2}\Big(1 - a^2 + \tau^2\Big) - A - B\tau - \sum_{j=1}^{N-1} \Big[A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}\Big] \ . \tag{4.8}$$

Após substituir a equação (4.8) na equação (4.7), encontramos para a taxa de fluxo a expressão

$$Q = \frac{1}{2a^2}\Big[2aA + \sum_{j=1}^{N-1} \nu_j (A_j + B_j)(1 - e^{-2a/\nu_j})\Big] - \frac{1}{2a}\Big(1 - \frac{2}{3}a^2\Big). \tag{4.9}$$

Para desenvolver os resultados numéricos com a segunda abordagem para o problema do fluxo de Poiseuille, partimos da equação (4.6), discretizamos seu termo integral e usamos as equações (2.30), (2.44) e (2.45) obtendo assim para o perfil de velocidade macroscópica a expressão

$$q(\tau) = \frac{1}{2}\Big(1 - a^2 + \tau^2\Big) - A - B\tau - \Big\{\sum_{j=1}^{N-1} A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + \sum_{j=1}^{N-1} B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}\Big\}\phi_0(\nu_j) \qquad (4.10)$$

onde

$$\phi_0(\nu_j) = \sum_{i=1}^{N} w_i \psi(\mu_i)\Big[\phi(\nu_j, +\mu_i) + \phi(\nu_j, -\mu_i)\Big]\,. \qquad (4.11)$$

Após usar a equação (4.10) na equação (4.7), encontramos para a taxa de fluxo a expressão

$$Q = \frac{1}{2a^2}\Big[2aA + \sum_{j=1}^{N-1} \nu_j (A_j + B_j)(1 - e^{-2a/\nu_j})\phi_0(\nu_j)\Big] - \frac{1}{2a}\Big(1 - \frac{2}{3}a^2\Big)\,. \qquad (4.12)$$

Na Tabela 4.1 estão os resultados da velocidade macroscópica $q(\tau)$ com a=1.0, e na Tabela 4.2 os resultados da taxa de fluxo Q, sendo que ambas foram geradas com N=30 e descrevem os valores que encontramos pelas duas abordagem da nossa solução de ordenadas discretas para o problema descrito no capítulo 2.

Tabela 4.1: Velocidade macroscópica $q(\tau)$

τ	$\alpha = 0.50$	$\alpha = 0.80$	$\alpha = 0.88$	$\alpha = 0.96$	$\alpha = 1.00$
0.0	-3.6522	-2.3196	-2.1174	-1.9488	-1.8746
0.1	-3.6448	-2.3121	-2.1099	-1.9413	-1.8671
0.2	-3.6226	-2.2896	-2.0873	-1.9187	-1.8444
0.3	-3.5851	-2.2518	-2.0494	-1.8806	-1.8063
0.4	-3.5318	-2.1979	-1.9954	-1.8264	-1.7521
0.5	-3.4618	-2.1271	-1.9243	-1.7552	-1.6808
0.6	-3.3733	-2.0377	-1.8347	-1.6654	-1.5908
0.7	-3.2637	-1.9270	-1.7238	-1.5542	-1.4795
0.8	-3.1279	-1.7900	-1.5866	-1.4167	-1.3419
0.9	-2.9540	-1.6153	-1.4116	-1.2416	-1.1668
1.0	-2.6764	-1.3404	-1.1375	-9.6838(-1)	-8.9392(-1)

Tabela 4.2: Taxa de fluxo Q

$2a$	$\alpha = 0.50$	$\alpha = 0.80$	$\alpha = 0.88$	$\alpha = 0.96$	$\alpha = 1.00$
0.05	5.2233	3.0897	2.7383	2.4373	2.3023
0.10	4.5564	2.7077	2.4060	2.1482	2.0327
0.30	3.7785	2.2448	2.0011	1.7945	1.7025
0.50	3.5444	2.1023	1.8766	1.6863	1.6019
0.70	3.4377	2.0388	1.8220	1.6398	1.5592
0.90	3.3839	2.0092	1.7976	1.6202	1.5418
1.00	3.3682	2.0019	1.7921	1.6163	1.5387
2.00	3.3766	2.0414	1.8386	1.6694	1.5949
5.00	3.7744	2.4382	2.2351	2.0655	1.9908
7.00	4.0881	2.7461	2.5414	2.3704	2.2949
9.00	4.4102	3.0635	2.8576	2.6853	2.6092

4.3.2 Problemas em meio semi-infinito

4.3.2.1 Resultados da primeira e segunda abordagem para o Problema "Creep" Térmico

Para calcular o perfil de velocidade macroscópica usando a primeira abordagem do problema "Creep" Térmico tomamos

$$q(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mu) Y(\tau, \mu) d\mu \tag{4.13}$$

que pela equação (3.9) resulta em

$$q(\tau) = A + 2\sum_{j=1}^{N-1} A_j e^{-\tau/\nu_j} \ . \tag{4.14}$$

Encontramos o perfil de velocidade macroscópica com a segunda abordagem do problema "Creep" Térmico substituindo as equações (3.11) e (3.12) na equação (4.13) o que resulta em

$$q(\tau) = A + 2\sum_{j=1}^{N-1} A_j e^{-\tau/\nu_j} \phi_0(\nu_j) \ , \tag{4.15}$$

sendo que $\phi_0(\nu_j)$ é definido como em (4.11).

Na Tabela 4.3 estão os valores que encontramos usando nossa solução em ordenadas discretas, com as duas abordagens do problema "Creep" Térmico para o perfil de velocidade macroscópica, e para esse mesmo problema listamos na tabela Tabela 4.4 os valores para a velocidade de deslizamento térmico A_T que encontramos resolvendo os sistemas de equações (3.10) e (3.13) com diferentes valores de α.

Tabela 4.3: Velocidade macroscópica $q_T(\tau)$

τ	$\alpha = 0.20$	$\alpha = 0.40$	$\alpha = 0.60$	$\alpha = 0.80$	$\alpha = 1.00$
0.0	0.437744	0.378652	0.322536	0.269224	0.218556
0.2	0.476087	0.452924	0.430472	0.408695	0.387559
0.4	0.493887	0.487783	0.481689	0.475606	0.469537
0.6	0.505878	0.511345	0.516424	0.521139	0.525509
0.8	0.514697	0.528709	0.542074	0.554828	0.567004
1.0	0.521484	0.542091	0.561870	0.580865	0.599118
1.4	0.531203	0.561281	0.590296	0.618305	0.645359
1.8	0.537720	0.574168	0.609413	0.643517	0.676540
2.0	0.540196	0.579067	0.616685	0.653116	0.688421
2.5	0.544849	0.588282	0.630374	0.671195	0.710810
3.0	0.548006	0.594537	0.639673	0.683485	0.726042
5.0	0.553726	0.605885	0.656560	0.705828	0.753761
7.0	0.555401	0.609212	0.661518	0.712394	0.761918
10.0	0.556090	0.610581	0.663559	0.715101	0.765281
15.0	0.556278	0.610957	0.664119	0.715844	0.766206
20.0	0.556299	0.610998	0.664180	0.715925	0.766307

Tabela 4.4: Velocidade de deslizamento

α	A_T
0.1	0.528357
0.2	0.556302
0.3	0.583848
0.4	0.611004
0.5	0.637781
0.6	0.664190
0.7	0.690239
0.8	0.715938
0.9	0.741297
1.0	0.766323

4.3.2.2 Resultados da primeira e segunda abordagem para o Problema de Deslizamento Viscoso

Para obter o perfil de velocidade macroscópica com a primeira abordagem do problema de Deslizamento Viscoso, substituimos a equação (3.18) na equação (4.13) e encontramos

$$q(\tau) = A + \tau + \sum_{j=1}^{N-1} A_j e^{-\tau/\nu_j} . \quad (4.16)$$

Substituindo as equações (3.20) e (3.21) na equação (4.13) encontramos a seguinte expressão para o perfil de velocidade macroscópica com a segunda abordagem do problema de Deslizamento Viscoso

$$q(\tau) = A + \tau + \sum_{j=1}^{N-1} A_j e^{-\tau/\nu_j} \phi_0(\nu_j) , \quad (4.17)$$

e aqui $\phi_0(\nu_j)$ também é definido como em (4.11).

Os valores que obtivemos para o perfil de velocidade macroscópica usando nossa solução em ordenadas discretas com ambas as abordagens do problema de Deslizamento Viscoso estão na Tabela 4.5 que foi gerada com $N = 24$.

Tabela 4.5: Velocidade macroscópica $q_P(\tau)$

τ	$\alpha = 0.20$	$\alpha = 0.40$	$\alpha = 0.60$	$\alpha = 0.80$	$\alpha = 1.00$
0.0	7.622844	3.238196	1.805584	1.109557	0.707106
0.2	8.063202	3.646240	2.182908	1.457663	1.027415
0.4	8.357992	3.928844	2.453793	1.717270	1.276161
0.6	8.617267	4.180609	2.698309	1.954782	1.506903
0.8	8.858621	4.416772	2.929448	2.181057	1.728463
1.0	9.089163	4.643505	3.152488	2.400515	1.944445
1.4	9.530897	5.080070	3.584033	2.827181	2.366367
1.8	9.957489	5.503391	4.004171	3.244222	2.780386
2.0	1.016727(1)	5.711974	4.211587	3.450500	2.985558
2.5	1.068513(1)	6.227655	4.725143	3.961982	3.495016
3.0	1.119681(1)	6.737913	5.234015	4.469501	4.001213
5.0	1.321680(1)	8.755484	7.249225	6.482402	6.011854
7.0	1.522221(1)	1.076024(1)	9.253350	8.485904	8.014745
10.0	1.822430(1)	1.376209(1)	1.225495(1)	1.148726(1)	1.101587(1)
15.0	2.322484(1)	1.876256(1)	1.725536(1)	1.648761(1)	1.301616(1)
20.0	2.822490(1)	2.376261(1)	2.225540(1)	2.148765(1)	2.101619(1)

Estão na Tabela 4.6 os valores para a velocidade de deslizamento viscoso A_P que encontramos resolvendo os sistemas de equações (3.18) e (3.20) referentes a cada uma das abordagens do problema de Deslizamento Viscoso para vários valores de α e $N = 24$.

Tabela 4.6: Velocidade de deslizamento

α	A_P
0.1	1.710313(1)
0.2	8.224902
0.3	5.255112
0.4	3.762619
0.5	2.861190
0.6	2.255410
0.7	1.818667
0.8	1.487654
0.9	1.227197
1.0	1.016191

De forma geral podemos dizer que para baixos valores de N a vantagem em se usar a subroutina UPDATER não se mostrou significante, mas apesar de não ser necessário neste caso (pois obtemos de 5 a 7 digitos de precisão com N variando de 24 a 30) ao aumentarmos esse valor, por exemplo para $N = 800$, notamos a expressiva melhora no tempo computacional gasto para obtenção dos resultados.

Cabe salientar ainda, que a implementação em linguagem FORTRAN de nossa solução em ordenadas discretas em qualquer uma das abordagens apresentadas, por exemplo com $N = 100$, não leva mais do que três segundos em um Pentium $233MH_Z$, sendo assim, acreditamos que nossa solução é muito eficiente, bem como muito precisa.

5 CONCLUSÕES

Observando os resultados apresentados nesse trabalho verificamos que a solução em ordenadas discretas baseada em um esquema de N pontos de quadratura definidos para apenas metade do domínio se mostrou precisa, eficiente e simples em ambas as abordagens, analítica e numérica, das soluções elementares. Esses resultados também se confirmam para o caso de outros problemas como os de modelos que incluem polarização [3] ou como o problema clássico de Chandrasekhar em transferência radiativa [25].

No caso de comparações entre as duas abordagens, a segunda, apesar de lidar com aspectos numéricos parece mais simples no sentido que não há necessidade de preocupação com o caso onde autovalores são iguais aos pontos de quadratura.

O problema de autovalores associado é bastante simples e pode ser tratado numericamente de forma mais eficiente do que em trabalhos anteriores, e mesmo em outras abordagens que recaem em matrizes tridiagonais simétricas ou cheias.

Os resultados aqui obtidos confirmam a boa precisão da solução em ordenadas discretas que deve favorecer o tratamento de problemas mais complexos.

BIBLIOGRAFIA

[1] BARICHELLO, L. B. and SIEWERT, C. E., "A Discrete-Ordinates Solution For A Non-Grey Model With Complete Frequency Redistribution", *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, em impressão.

[2] BARICHELLO, L. B. and SIEWERT, C. E., "A Discrete-Ordinates Solution For Poiseuille Flow In A Plane Channel", *Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP)*, em impressão.

[3] BARICHELLO, L. B. and SIEWERT, C. E., "A Discrete-Ordinates Solution For A Polarization Model With Complete Frequency Redistribution", *The Asthophysical Jornal*, em impressão.

[4] BARICHELLO, L. B. and SIEWERT, C. E., "On The Equivalence Between The Discrete-Ordinates And The Spherical-Harmonics Methods In Radiative Transfer", *Nuclear Science and Engineering*, **130**, 79 (1998).

[5] BARICHELLO, L. B. and VILHENA, M. T., "A General Analytical Approach To The One Group, One-Dimensional Transport Equation", *Kerntechnik*, **58**, 182 (1993).

[6] BARROS, R. C. and LARSEN, E. W., "A Numerical Method For One-Group Slab Geometry Discrete Ordinates Problems Without Spatial Truncation Error", *Nuclear Science and Engineering*, **104**, 199 (1990).

[7] BENASSI, M., GARCIA, R. D. M., KARP, A. H. and SIEWERT, C. E., "A High-Order Spherical Harmonics Solution To The Standard Problem In Transfer Radiative", *The Astrophysical Journal*, **280**, 853 (1984).

[8] BHATNAGAR, P. L., GROSS, E. P. and KROOK, M., "A Model For Collision Processes In Gases. I. Small Amplitude Processes In Charged And Neutral One-Component Systems", *Phys. Rev.*, **94**, 511 (1954).

[9] BOFFI, V., DE SOCIO, G., GAFFURI, G. and PESCATORE, C., "Rigorous Construtive Solution To Monodimensional Poiseuille And Thermal Flows", *Meccanica*, **11**, 183 (1976).

[10] CAMARGO, M., "Uma Solução Em Polinômios De Hermite Para Modelos De Dinâmica De Gases Rarefeitos", Dissertação de Mestrado do Curso de Pós Graduação em Matemática Aplicada ($CPGMA_P$), UFRGS, Porto Alegre (1998).

[11] CERCIGNANI, C., "Plane Poiseuille Flow According To The Method Of Elementary Solutions", *J. Math. Anal. Appl.*, **12**, 254 (1965).

[12] CERCIGNANI, C. and DANERI, A., "Flow Of A Rarefied Gas Between Two Parallel Plates", *J. Appl. Phys.*, **34**, 3509 (1963).

[13] CHALHOUB, E. S., "The Discrete-Ordinates Method For Solving Azimuthally-Dependent Transport Problems", Tese de Doutorado (em Português), Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, Brasil (1997).

[14] CHALHOUB, E. S. and GARCIA, R. D. M., "A New Quadrature Scheme For Solving Azimuthally Dependent Transport Problems", *Transport Theory And Statistical Physics*, **27**, 607 (1998).

[15] CHALHOUB, E. S. and GARCIA, R. D. M., "On The Solution Of Azimuthaly Dependent Transport Problems With The Anisn Code", *Ann. Nucl. Energy*, **24**, 1069 (1997).

[16] CHALHOUB, E. S. and GARCIA, R. D. M., "The Equivalence Between Two Techniques Of Angular Interpolation For The Discrete-Ordenates Method", *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, submetido à publicação .

[17] CHANDRASEKHAR, S., "Radiative Transfer", Oxford University Press, London (1950).

[18] DONGARRA, J. J., BUNCH, J. R., MOLER, C. B. and STEWART, G. W., "LINPACK, User´s Guide", *Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM*, Philadelphia (1979).

[19] DONGARRA, J. J., BISCHOF, C., ANDERSON, E., BAI, Z., DEMMEL, J., DU CROZ, J., GREENBAUM, A., HAMMARLING, S., MCKENNEY, A., OSTROUCHOV, S. and SORENSEN, D., "LAPACK, User´s Guide", *Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM*, Philadelphia (1992).

[20] GOLUB, G. H. and VAN LOAN, C. F., "Matrix Computations", Johns Hopkins University Press, Baltimore (1989).

[21] KRIESE, J. T., CHANG, T. S. and SIEWERT, C. E.,"Elementary Solutions Of Coupled Model Equations In The Kinetic Theory Of Gases", *Int. J. Eng. Sci.*, **12**, 441 (1974).

[22] LEWIS, E. E. and MILLER Jr, W. F., "Computational Methods Of Neutron Transport", *John Wiley & Sons*, New York (1984).

[23] LOYALKA, S. K., PETRELLIS, N. and STORVICK, T. S., "Some Numerical Results For The BGK Model: Thermal Creep And Viscous Slip Problems With Arbitrary Accommodation At The Surface", *J. Phys. Fluids*, **18**, 1094 (1975).

[24] LOYALKA, S. K., PETRELLIS, N. and STORVICK, T. S., "Some Exact Numerical Results For The BGK Model: Couette, Poiseuille And Thermal Creep Flow Between Parallel Plates", *Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP)*, **30**, 514 (1979).

[25] SIEWERT, C. E., "A Concise And Accurate Solution To Chandrasekhar´s Basic Problem In Radiative Transfer", *Journal of Quantitativc Spectroscopy and Radiative Transfer*, em impressão.

[26] SIEWERT, C. E., GARCIA, R. D. M. and GRANDJEAN, P., "A Concise And Accurate Solution For Poiseuille Flow In A Plane Channel", *J. Math. Phys.*, **21**, 2760 (1980).

[27] SMITH, B. T., BOYLE, J. M., DONGARRA, J. J., GARBOW, B. S., IKEBE, Y., KLEMA, V. C. and MOLER, C. B., " Matrix Eigensystem Routines EISPACK Guide", *Springer-Verlang*, Berlin (1976).

[28] SIEWERT, C. E. and WRIGHT, S. J., "Efficient Eigenvalue Calculations In Radiative Transfer", *Journal of Quantitativc Spectroscopy and Radiative Transfer*, em impressão ; veja também o site http://www.mcs.anl.gov/~ wright/dzpack/

[29] VILHENA, M. T. and BARICHELLO, L. B., "A New Analytical Approach To Solve The Neutron Transport Equation", *Kerntechnik*, **56**, 334 (1991).

[30] VILHENA, M. T., BARICHELLO, L. B., ZABADAL, J. R., SEGATTO, C. F. and CARDONA, A. V., "General Solution Of One-Dimensional Approximations To The Transport Equation", *Progress in Nuclear Energy*, **33**, 99 (1998).

ANEXO A-1

A-1.1 O problema do fluxo de Poiseuille

Consideremos duas placas separadas por uma distância d, e um gás fluindo paralelamente entre elas, na direção z, devido a um gradiente de densidade $\kappa\rho_0$, que é mantido por um gradiente de pressão, sendo que a temperatura T é supostamente constante nas placas. Seguindo [12] vamos expressar

$$f(x, z, \mathbf{c}) = f_0(z, \mathbf{c})[1 + h(x, \mathbf{c})] \tag{A-1.1}$$

onde $f(x, z, \mathbf{c})$ é a função de distribuição das moléculas e $\mathbf{c}$ (de componentes c_x, c_y e c_z) com magnetude c, é a velocidade molecular. Ainda

$$f\Big[-\frac{d}{2}\mathrm{sgn}(c_x), z, \mathbf{c}\Big] = f_0(z, \mathbf{c}) = (1 + \kappa z)\rho_0\pi^{-3/2}e^{c^2} \tag{A-1.2}$$

onde ρ_0 é a densidade na fronteira $z = 0$ e

$$\mathrm{sgn}(c_x) = \begin{cases} 1 & c_x > 0 \\ -1 & c_x < 0 \,. \end{cases} \tag{A-1.3}$$

Como estamos considerando uma situação estacionária, e com simetria, f não depende de y, e a equação de Boltzmann pode ser escrita como

$$c_x\frac{\partial}{\partial x}f + c_z\frac{\partial}{\partial z}f = J(f, f) \tag{A-1.4}$$

onde $J(f, f)$ é o operador de colisão. Usando a equação (A-1.1) podemos reescrever a equação (A-1.4) como

$$c_x \frac{\partial}{\partial x} h + c_z \frac{\partial}{\partial z} h + c_z \left[\frac{\kappa}{(1 + \kappa z)} \right] (1 + h) = Lh + f_0^{-1} J(f_0 h, f_0 h) \ , \tag{A-1.5}$$

com condições de contorno

$$h \left[-\frac{d}{2} \mathrm{sgn}(c_x), z, \mathbf{c} \right] = 0 \ . \tag{A-1.6}$$

Na equação (A-1.5), L é o operador linearizado de colisão, descrito segundo o modelo BGK [8]. Seguindo ainda considerações físicas apresentadas por Cercignani e Daneri [12], a equação (A-1.5) pode ser simplificada, resultando que

$$\kappa c_z + c_x \frac{\partial}{\partial x} h + c_z \frac{\partial}{\partial z} h = Lh \ . \tag{A-1.7}$$

Como as condições de contorno (A-1.6) não dependem de z, e z não aparece explicitamente na equação (A-1.7), h não depende de z, com isso reescrevemos a equação (A-1.7) como

$$\kappa c_z + c_x \frac{\partial}{\partial x} h = Lh \ . \tag{A-1.8}$$

Por conveniência, consideremos

$$Z(x, c_x) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_y^2+c_z^2)} c_z h(x, \mathbf{c}) dc_x dc_z \tag{A-1.9}$$

uma função desconhecida; assim que conhecermos Z, o problema estará praticamente resolvido.

Integrando a equação (A-1.8) com relação a c_y e c_z, e considerando a forma de L como descrita em [12] obtemos

$$\frac{1}{2}\theta\kappa + \theta c_x \frac{\partial}{\partial x} Z(x, c_x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} Z(x, u) du - Z(x, c_x), \tag{A-1.10}$$

onde θ denota o tempo livre médio, e as condições de contorno são dadas por

$$Z\Big[-\frac{d}{2}\mathrm{sgn}(c_x), c_x\Big] = 0. \tag{A-1.11}$$

Para um problema em meio finito podemos também considerar a equação (A-1.10) dada pela expressão

$$\frac{1}{2}\theta\kappa + \theta c_x \frac{\partial}{\partial x} Z(x, c_x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} Z(x, u) du - Z(x, c_x), \tag{A-1.12}$$

para $x \in (-d/2, d/2)$ e $c_x \in (-\infty, \infty)$ com condições reflexivas

$$Z(-d/2, c_x) = (1 - \alpha) Z(-d/2, -c_x) \tag{A-1.13}$$

e

$$Z(d/2, -c_x) = (1-\alpha)Z(d/2, c_x) \tag{A-1.14}$$

para $c_x \in (0,\infty)$. Aqui x é a variável espacial, d é a espessura do canal, κ é proporcional ao gradiente de pressão que causa o fluxo, θ é o tempo livre médio, $\alpha \in (0,1]$ é chamado coeficiente de acomodação e $Z(x, c_x)$ é dado pela equação (A-1.9). Assim a determinação da função desconhecida $h(x, \mathrm{c})$ depende da solução do problema em $Z(x, c_x)$.

Segundo Barichello e Siewert [2], o problema em $Z(x, c_x)$ pode ser reformulado fazendo $\tau = x/\theta$, $\delta = d/\theta$ e $\mu = c_x$ nas equações (A-1.12), (A-1.13) e (A-1.14) resultando

$$\frac{1}{2}\kappa\theta + \mu\frac{\partial}{\partial\tau}Z(\tau,\mu) + Z(\tau,\mu) = \pi^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} Z(\tau,u)du \tag{A-1.15}$$

para $\tau \in (-\delta/2, \delta/2)$ e $\mu \in (-\infty,\infty)$, com condições de contorno para $\mu \in (0,\infty)$ dadas por

$$Z(-\delta/2,\mu) = (1-\alpha)Z(-\delta/2,-\mu) \tag{A-1.16}$$

e

$$Z(\delta/2,-\mu) = (1-\alpha)Z(\delta/2,\mu)\ . \tag{A-1.17}$$