

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**EFEITOS DE EVAPORAÇÃO EM GASES RAREFEITOS**

por

Caio Sarmiento Scherer

Tese para obtenção do Título de  
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, agosto de 2009

# EFEITOS DE EVAPORAÇÃO EM GASES RAREFEITOS

por

Caio Sarmiento Scherer

Mestre em Matemática Aplicada

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof<sup>a</sup>. Dra. Liliane Basso Barichello

Aprovada por:

Prof. Dr. Cláudio Rosito Jung (PIPICA/UNISINOS-RS)

Prof<sup>a</sup>. Dra. Patrícia Rodrigues Fortes (URI/FW-RS)

Prof. Dr. Roberto David Martinez Garcia (IEAv/SP)

Prof. Dr. Paulo Smith Schneider (PROMEC/UFRGS-RS)

Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 20 de agosto de 2009

“Seja você quem for, seja qual for a posição social que você tenha na vida, a mais alta ou a mais baixa, tenha sempre como meta muita força, muita determinação e sempre faça tudo com muito amor e com muita fé em Deus, que um dia você chega lá. De alguma maneira você chega lá.” (*Ayrton Senna*)

## AGRADECIMENTOS

Sempre que se conclui uma nova etapa deve-se lembrar que além do próprio esforço, dedicação, trabalho e perseverança, outras pessoas também contribuíram para que o objetivo final fosse alcançado. Por isso, não se pode deixar de lembrar destas pessoas e agradecer pela sua ajuda.

Dessa maneira, agradeço aos meus pais Marcelo e Verginia que sempre me deram oportunidade para estudar e incentivo para superar as dificuldades quando elas apareceram.

Agradeço também a meus colegas de curso João Francisco, Janice e Carmo pela companhia, diálogo e parceria durante todos estes anos de estudo, e também à professora Liliane pela orientação.

E a todos os amigos, colegas de trabalho, familiares e alunos que de uma forma ou de outra me ajudaram a finalizar esta jornada.

## RESUMO

Neste trabalho, o fenômeno de evaporação em gases rarefeitos é analisado, para o caso de uma espécie de gás bem como de misturas binárias. Evaporação fraca e forte são consideradas para escoamentos de gases em canal e semi-espaço. Também é investigado o fenômeno conhecido como reverso de temperatura, típico de gases em estado de rarefação. O método ADO, uma versão analítica do método de ordenadas discretas, é utilizado para construção de soluções em forma fechada para os diversos problemas e quantidades de interesse, como perfis de temperatura e fluxos de calor. Para o caso de um gás, uma solução unificada é desenvolvida para problemas formulados a partir dos modelos cinéticos, derivados da equação de Boltzmann, BGK, S, Gross-Jackson e MRS. No caso de mistura binária de gases, a formulação matemática é baseada no modelo McCormack. Particularmente, quando a evaporação forte é abordada, e aspectos não lineares devem ser incluídos, a versão não linear do modelo BGK é utilizada. Neste caso, a solução ADO do modelo linear é utilizada em um processo chamado de pós-processamento para inclusão dos termos não lineares do problema e reavaliação das quantidades de interesse, evidenciando melhoria dos resultados obtidos pela formulação linear. Uma série de resultados numéricos são listados e é observada, de forma geral, excelente exatidão e eficiência computacional.

**Palavras-chave:** Dinâmica de Gases Rarefeitos, Problemas de Evaporação, Modelos Cinéticos, Método de Ordenadas Discretas.

## ABSTRACT

In this work, evaporation phenomena in rarefied gas flow, for one gas case and binary mixtures, are analyzed. Weak and strong evaporation are considered in channel and half-space problems. The reverse of temperature problem, typical in rarefied gas dynamics, is also investigated. The ADO method, an analytical version of the discrete ordinates method, is used to develop closed form solutions, to several problems and quantities of interest, as temperature profiles and heat flows. For the one gas case, an unified solution is developed for the BGK, S, Gross-Jackson and MRS models, derived from the Boltzmann equation. For binary mixtures, the mathematical formulation is based on the McCormack model. Particularly, when strong evaporation is investigated, and nonlinear aspects have to be included, the nonlinear BGK model is used. In this case, the ADO solution, provided by the linear model, is considered in a post-processing procedure which takes into account the nonlinear terms to evaluate the quantities of interest, and improved results are obtained, in comparison with the linear version. A series of numerical results are listed and, in general, an excellent accuracy and good computational efficiency are observed.

**Keywords:** Rarefied Gas Dynamics, Evaporation Problems, Kinetic Models, Discrete Ordinates Method.

## ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1	Os Problemas de Evaporação	10
1.2	Objetivos e Contribuições	14
<b>2</b>	<b>EVAPORAÇÃO FRACA: CASO DE UM GÁS</b>	<b>16</b>
2.1	Definição dos Problemas de Interesse	16
2.1.1	O Problema do Reverso de Temperatura	16
2.1.2	O Problema de Evaporação/Condensação em Semi-Espaço	19
2.2	Formulação Matemática	21
2.2.1	O Problema do Reverso de Temperatura	24
2.2.2	O Problema de Evaporação/Condensação em Semi-Espaço	26
2.3	Reformulação	29
2.3.1	Reverso de Temperatura	31
2.3.2	Evaporação/Condensação em Semi-Espaço	32
2.4	Solução em Ordenadas Discretas	33
2.5	Quantidades de Interesse	38
2.5.1	Reverso de Temperatura	38
2.5.2	Evaporação/Condensação em Semi-Espaço	40
2.6	Aspectos Computacionais e Resultados Numéricos	41
<b>3</b>	<b>EVAPORAÇÃO FRACA: CASO DE MISTURA DE DOIS GASES</b>	<b>59</b>
3.1	Formulação Matemática	59
3.1.1	O Problema do Reverso de Temperatura	65
3.1.2	O Problema de Evaporação/Condensação em Semi-Espaço	68
3.2	Reformulação	70
3.2.1	Reverso de Temperatura	73
3.2.2	Evaporação/Condensação em Semi-Espaço	75
3.3	Solução em Ordenadas Discretas	76
3.4	Quantidades de Interesse	83
3.4.1	Reverso de Temperatura	83

3.4.2	Evaporação/Condensação em Semi-Espaço .....	85
3.5	Aspectos Computacionais e Resultados Numéricos .....	86
<b>4</b>	<b>EVAPORAÇÃO FORTE: MODELO BGK NÃO LINEAR.....</b>	<b>111</b>
4.1	Definição do Problema .....	111
4.2	Formulação Matemática .....	113
4.3	Reformulação .....	116
4.4	Solução em Ordenadas Discretas .....	121
4.5	Quantidades de Interesse .....	129
4.6	Tratamento da Não Linearidade .....	130
4.6.1	Pós-processamento para recalculer os quocientes $n_\infty/n_0$ e $T_\infty/T_0$ .....	130
4.6.2	Pós-processamento para recalculer os perfis.....	136
4.7	Aspectos Computacionais e Resultados Numéricos .....	143
<b>5</b>	<b>EVAPORAÇÃO FORTE: SOLUÇÃO UNIFICADA.....</b>	<b>155</b>
5.1	Formulação Matemática .....	155
5.2	Reformulação .....	158
5.3	Solução em Ordenadas Discretas .....	161
5.4	Quantidades de Interesse .....	167
5.5	Aspectos Computacionais e Resultados Numéricos .....	167
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES .....</b>	<b>176</b>
<b>7</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>178</b>



## LISTA DE FIGURAS

2.1	Evaporação Fraca em Canal .....	16
2.2	Temperatura do Gás entre as Interfaces .....	17
2.3	Reverso de Temperatura .....	18
2.4	Evaporação em Semi-Espaço .....	20
2.5	Condensação em Semi-Espaço .....	20
2.6	Reverso de Temperatura: Perturbação de Temperatura $\Delta T(\tau)$ com $2a = 2.0$ , $\delta = 1.0$ , modelo Gross-Jackson e $\varepsilon = \varepsilon_t$ .....	57
2.7	Reverso de Temperatura: Fluxo de Calor $Q$ com $\delta = 1.0$ , modelo Gross-Jackson e $\varepsilon = \varepsilon_t$ .....	57
2.8	Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Variação de Densidade $\Omega(\tau)$ com $u =$ $1.0$ , modelo MRS e $\varepsilon = 1/\sqrt{8}$ .....	58
2.9	Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Variação de Temperatura $\Theta(\tau)$ com $u = 1.0$ , modelo MRS e $\varepsilon = 1/\sqrt{8}$ .....	58
3.1	Perturbação de Temperatura $\Delta T_1(\tau)$ para o Caso 1 com $2a = 2.0$ , $C = 0.8$ e $\delta = 1.0$ .....	109
3.2	Perturbação de Temperatura $\Delta T_2(\tau)$ para o Caso 1 com $2a = 2.0$ , $C = 0.8$ e $\delta = 1.0$ .....	109
3.3	Fluxo de Calor $Q_1(\tau)$ para o Caso 1 com $2a = 2.0$ , $C = 0.8$ e $\delta = 1.0$ .....	110
3.4	Fluxo de Calor $Q_2(\tau)$ para o Caso 1 com $2a = 2.0$ , $C = 0.8$ e $\delta = 1.0$ .....	110
4.1	Evaporação em Semi-Espaço .....	112
4.2	Condensação em Semi-Espaço .....	112
4.3	Evaporação Forte: $n_\infty/n_0$ com $u_w = 0.0$ .....	152
4.4	Evaporação Forte: $T_\infty/T_0$ com $u_w = 0.0$ .....	152
4.5	Evaporação Forte: Perturbações de Densidade $\Delta N(\tau)$ e $\Delta \hat{N}(\tau)$ com $u = 0.8$ e $u_w = 0.0$ .....	153
4.6	Evaporação Forte: Perturbações de Velocidade $\Delta U(\tau)$ e $\Delta \hat{U}(\tau)$ com $u = 0.8$ e $u_w = 0.0$ .....	153
4.7	Evaporação Forte: Perturbações de Temperatura $\Delta T(\tau)$ e $\Delta \hat{T}(\tau)$ com $u = 0.8$ e $u_w = 0.0$ .....	154

4.8 Evaporação Forte: Fluxos de Calor  $Q_x(\tau)$  e  $\widehat{Q}_x(\tau)$  com  $u = 0.8$  e  $u_w = 0.0$  ..... 154

## LISTA DE TABELAS

2.1	Reverso de Temperatura: Perturbação de Densidade $\Delta N_1(\tau)$ com $2a = 2.0$ . . . . .	45
2.2	Reverso de Temperatura: Perturbação de Densidade $\Delta N_2(\tau)$ com $2a = 2.0$ . . . . .	46
2.3	Reverso de Temperatura: Perturbação de Temperatura $\Delta T_1(\tau)$ com $2a = 2.0$ . . . . .	47
2.4	Reverso de Temperatura: Perturbação de Temperatura $\Delta T_2(\tau)$ com $2a = 2.0$ . . . . .	48
2.5	Reverso de Temperatura: Fluxo Mássico $U_1$ . . . . .	49
2.6	Reverso de Temperatura: Fluxo Mássico $U_2$ . . . . .	50
2.7	Reverso de Temperatura: Fluxo de Calor $Q_1$ . . . . .	51
2.8	Reverso de Temperatura: Fluxo de Calor $Q_2$ . . . . .	52
2.9	Reverso de Temperatura: $\beta_T$ . . . . .	53
2.10	Reverso de Temperatura: $\beta_Q$ . . . . .	53
2.11	Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Perturbação de Densidade $\Delta N(\tau)$ com $u = 1.0$ . . . . .	54
2.12	Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Perturbação de Temperatura $\Delta T(\tau)$ com $u = 1.0$ . . . . .	55
2.13	Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Saltos de Densidade e de Tempe- ratura com $u = 1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	56
3.1	Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade para o Caso 1 com $C = 0.3$ e $2a = 2.0$ . . . . .	90
3.2	Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 1 com $C =$ $0.3$ e $2a = 2.0$ . . . . .	90
3.3	Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 1 com $C = 0.3$ e $2a = 2.0$	91
3.4	Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 1 com $C = 0.3$ . . . . .	91
3.5	Reverso de Temperatura: $\beta_\alpha^T$ e $\beta_\alpha^Q$ para o Caso 1 com $C = 0.3$ . . . . .	91
3.6	Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade para o Caso 1 com $C = 0.8$ e $2a = 2.0$ . . . . .	92
3.7	Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 1 com $C =$ $0.8$ e $2a = 2.0$ . . . . .	92
3.8	Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 1 com $C = 0.8$ e $2a = 2.0$	93
3.9	Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 1 com $C = 0.8$ . . . . .	93
3.10	Reverso de Temperatura: $\beta_\alpha^T$ e $\beta_\alpha^Q$ para o Caso 1 com $C = 0.8$ . . . . .	93

3.11 Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade para o Caso 2 com $C = 0.3$ e $2a = 2.0$ .....	94
3.12 Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 2 com $C =$ $0.3$ e $2a = 2.0$ .....	94
3.13 Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 2 com $C = 0.3$ e $2a = 2.0$	95
3.14 Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 2 com $C = 0.3$ .....	95
3.15 Reverso de Temperatura: $\beta_\alpha^T$ e $\beta_\alpha^Q$ para o Caso 2 com $C = 0.3$ .....	96
3.16 Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade para o Caso 2 com $C = 0.8$ e $2a = 2.0$ .....	96
3.17 Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 2 com $C =$ $0.8$ e $2a = 2.0$ .....	97
3.18 Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 2 com $C = 0.8$ e $2a = 2.0$	97
3.19 Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 2 com $C = 0.8$ .....	98
3.20 Reverso de Temperatura: $\beta_\alpha^T$ e $\beta_\alpha^Q$ para o Caso 2 com $C = 0.8$ .....	98
3.21 Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade para o Caso 3 com $C = 0.3$ e $2a = 2.0$ .....	98
3.22 Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 3 com $C =$ $0.3$ e $2a = 2.0$ .....	99
3.23 Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 3 com $C = 0.3$ e $2a = 2.0$	99
3.24 Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 3 com $C = 0.3$ .....	100
3.25 Reverso de Temperatura: $\beta_\alpha^T$ e $\beta_\alpha^Q$ para o Caso 3 com $C = 0.3$ .....	100
3.26 Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade para o Caso 3 com $C = 0.8$ e $2a = 2.0$ .....	100
3.27 Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 3 com $C =$ $0.8$ e $2a = 2.0$ .....	101
3.28 Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 3 com $C = 0.8$ e $2a = 2.0$	101
3.29 Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 3 com $C = 0.8$ .....	102
3.30 Reverso de Temperatura: $\beta_\alpha^T$ e $\beta_\alpha^Q$ para o Caso 3 com $C = 0.8$ .....	102
3.31 Evaporação/Condensação em Semi-espaco: Caso 1 com $C = 0.3$ e $u = 1.0$ .....	103
3.32 Evaporação/Condensação em Semi-espaco: Caso 1 com $C = 0.8$ e $u = 1.0$ .....	103
3.33 Evaporação/Condensação em Semi-espaco: Caso 2 com $C = 0.3$ e $u = 1.0$ .....	104
3.34 Evaporação/Condensação em Semi-espaco: Caso 2 com $C = 0.8$ e $u = 1.0$ .....	104
3.35 Evaporação/Condensação em Semi-espaco: Caso 3 com $C = 0.3$ e $u = 1.0$ .....	105

3.36	Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Caso 3 com $C = 0.8$ e $u = 1.0$ . . . . .	105
3.37	Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Salto de Pressão $-\gamma^*$ com $d_2/d_1 = 1.0$	106
3.38	Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Salto de Concentração $\gamma^A - \gamma^B$ com $d_2/d_1 = 1.0$ . . . . .	106
3.39	Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Salto de Temperatura $-\delta^*$ com $d_2/d_1 =$ $1.0$ . . . . .	106
3.40	Reverso de Temperatura: $\beta_1^T$ com $d_2/d_1 = 1.0$ . . . . .	107
3.41	Reverso de Temperatura: $\beta_2^T$ com $d_2/d_1 = 1.0$ . . . . .	107
3.42	Reverso de Temperatura: $\beta_1^Q$ com $d_2/d_1 = 1.0$ . . . . .	108
3.43	Reverso de Temperatura: $\beta_2^Q$ com $d_2/d_1 = 1.0$ . . . . .	108
4.1	Tempo Computacional . . . . .	145
4.2	Evaporação Forte: $n_\infty/n_0$ com $u_w = 0.0$ . . . . .	146
4.3	Evaporação Forte: $T_\infty/T_0$ com $u_w = 0.0$ . . . . .	147
4.4	Evaporação Forte com $u = 0.1$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	147
4.5	Evaporação Forte com $u = 0.2$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	148
4.6	Evaporação Forte com $u = 0.3$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	148
4.7	Evaporação Forte com $u = 0.4$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	149
4.8	Evaporação Forte com $u = 0.5$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	149
4.9	Evaporação Forte com $u = 0.6$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	150
4.10	Evaporação Forte com $u = 0.7$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	150
4.11	Evaporação Forte com $u = 0.8$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	151
4.12	Evaporação Forte com $u = 0.9$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	151
5.1	Evaporação Forte: $n_\infty/n_0$ com $u_w = 0.0$ . . . . .	169
5.2	Evaporação Forte: $T_\infty/T_0$ com $u_w = 0.0$ . . . . .	169
5.3	Evaporação Forte: $\Delta N(\tau)$ com $u = 0.4$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	170
5.4	Evaporação Forte: $\Delta U(\tau)$ com $u = 0.4$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	170
5.5	Evaporação Forte: $\Delta T(\tau)$ com $u = 0.4$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	171
5.6	Evaporação Forte: $Q_x(\tau)$ com $u = 0.4$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	171
5.7	Evaporação Forte: $\Delta N(\tau)$ com $u = 0.7$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	172
5.8	Evaporação Forte: $\Delta U(\tau)$ com $u = 0.7$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	172
5.9	Evaporação Forte: $\Delta T(\tau)$ com $u = 0.7$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	173
5.10	Evaporação Forte: $Q_x(\tau)$ com $u = 0.7$ e $u_w = 0.0$ . . . . .	173

5.11	Evaporação Forte: $\Delta N(\tau)$ com $u = 0.9$ e $u_w = 0.0$ .....	174
5.12	Evaporação Forte: $\Delta U(\tau)$ com $u = 0.9$ e $u_w = 0.0$ .....	174
5.13	Evaporação Forte: $\Delta T(\tau)$ com $u = 0.9$ e $u_w = 0.0$ .....	175
5.14	Evaporação Forte: $Q_x(\tau)$ com $u = 0.9$ e $u_w = 0.0$ .....	175

## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ADO	Método Analítico de Ordenadas Discretas
DSMC	Direct Simulation Monte Carlo
ELB	Equação Linearizada de Boltzmann
MEMS	Sistemas Microeletromecânicos
PP	Pós-Processamento

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\bar{a}$	Meia largura do canal [ $m$ ]
$a$	Meia largura do canal adimensionalizada
$\hat{a}$	Comprimento característico [ $m$ ]
$\mathbf{c}$	Vetor velocidade das partículas adimensionalizado
$C$	Concentração molar
$d$	Diâmetro das partículas [ $m$ ]
$f$	Função de distribuição
$F$	Núcleo de espalhamento da equação linearizada de Boltzmann
$h$	Perturbação na distribuição Maxwelliana
$J$	Operador de colisão da equação de Boltzmann
$k$	Constante de Boltzmann [ $1.3805 \times 10^{-23} J/K$ ]
$Kn$	Número de Knudsen
$l$	Livre caminho médio [ $m$ ]
$\mathcal{L}$	Operador de colisão do modelo McCormack
$L$	Calor latente [ $J$ ]
$m$	Massa da partícula [ $Kg$ ]
$M$	Quantidade de pontos de quadratura no pós-processamento
$Ma$	Número de Mach
$n$	Densidade numérica [ $m^{-3}$ ]
$N$	Quantidade de pontos de quadratura no método ADO
$p$	Pressão [ $Pa$ ]
$Pr$	Número de Prandtl
$\mathbf{q}$	Fluxo de calor [ $W/m^2$ ]
$Q_x$	Fluxo de calor adimensionalizado
$\hat{Q}_x$	Fluxo de calor não linear adimensionalizado



$\mathbf{r}$	Vetor espacial [ $m$ ]
$Re$	Número de Reynolds
$t$	Tempo [ $s$ ]
$T$	Temperatura [ $K$ ]
$\hat{u}$	Velocidade característica [ $m/s$ ]
$U$	Fluxo mássico adimensionalizado
$\mathbf{u}$	Vetor velocidade do escoamento [ $m/s$ ]
$\mathbf{v}$	Vetor velocidade das partículas [ $m/s$ ]
$W$	Frequência de espalhamento diferencial
$w_k, v_j, w_j$	Pesos de quadratura
$x_j, y_j$	Pontos de quadratura
$\Delta N$	Perturbação de densidade
$\Delta \hat{N}$	Perturbação não linear de densidade
$\Delta U$	Perturbação de velocidade
$\Delta \hat{U}$	Perturbação não linear de velocidade
$\Delta T$	Perturbação de temperatura
$\Delta \hat{T}$	Perturbação não linear de temperatura

*Letras Gregas*

$\delta$	Desvio de temperatura na interface
$\delta^*$	Salto de temperatura
$\rho$	Desvio de densidade na interface
$\hat{\rho}$	Massa específica [ $Kg/m^3$ ]
$(\delta\rho)_{macro}$	Salto macroscópico de densidade
$(\delta T)_{macro}$	Salto macroscópico de temperatura
$(\delta\rho)_{micro}$	Salto microscópico de densidade
$(\delta T)_{micro}$	Salto microscópico de temperatura
$\gamma^*$	Salto de pressão

$\gamma^A - \gamma^B$	Salto de concentração
$\mu$	Viscosidade [ <i>Pa s</i> ]
$\eta, \gamma$	Frequências de colisão das partículas [ <i>s</i> <sup>-1</sup> ]
$\nu_j$	Constante de separação
$\Phi(\nu_j)$	Solução elementar
$\sigma_0$	Diâmetro de colisão das partículas [ <i>m</i> ]
$\Theta_K$	Correção da camada de Knudsen
$\tau$	Variável espacial adimensionalizada
$\xi_k$	Ponto de quadratura

## 1 INTRODUÇÃO

Sistemas microeletromecânicos (MEMS) são pequenas estruturas com dimensões menores que  $1mm$  e maiores que  $1\mu m$ , que combinam componentes elétricos e mecânicos [Gad-El-Hak, 2006]. Como exemplos podem-se citar acelerômetros para airbags, biochips para detecção de agentes químicos ou biológicos, resistores, capacitores e transistores elétricos usados em equipamentos de comunicação, sensores de pressão utilizados na extremidade de cateteres ou em pneus de automóveis, microfones de silício, micromotores, microbombas, microturbinas [Savoulides et al., 2008], micromolas [Liu et al., 2008], microválvulas [Galambos et al., 2009] e microespelhos [Yoo et al., 2009] entre outros. No interior dessas pequenas máquinas existem microcanais contendo fluidos, que usualmente são chamados de microfluidos.

Os primeiros estudos com MEMS surgiram na década de oitenta em pesquisas com micromáquinas [Karniadakis et al., 2005]. No entanto, segundo Gad-El-Hak [Gad-El-Hak, 2006], o rápido progresso na fabricação durante a última década não foi igual aos correspondentes avanços no entendimento da física não convencional envolvida na manufatura e operação destes pequenos artefatos.

Escoamentos de fluidos em pequenos projetos diferem de escoamentos em grandes máquinas. Em sistemas pequenos, nem sempre os modelos tradicionais de escoamento, como as equações de Navier Stokes [Schlichting, 1976] com condições de contorno de não escorregamento são os mais apropriados, pois a dinâmica de fluidos e a interação do fluido com a superfície em sistemas pequenos é muito diferente que em sistemas grandes. Ainda, de acordo com Gad-El-Hak [Gad-El-Hak, 2006], nota-se que em uma máquina com comprimento característico de  $1m$  a razão entre a área superficial e o volume é da ordem de  $1m^{-1}$ , enquanto que em uma micromáquina com tamanho de  $1\mu m$  esta razão é da ordem de  $10^6m^{-1}$ , ou seja, ela é  $10^6$  vezes maior. Por isso, obviamente os efeitos de superfície são muito mais importantes em sistemas pequenos que em sistemas grandes. O crescimento desta razão afeta substancialmente o transporte de massa, momento e energia através da superfície. Nesta dinâmica o material que compõe a superfície e sua rugosidade devem ser levados muito mais em conta do que em grandes geometrias. Torna-se necessário considerar fenômenos de rarefação que antes eram desprezíveis como o escorregamento, o salto de temperatura, o “creep” térmico, os efeitos de compressibilidade e de dissipação viscosa e as forças intermoleculares [Karniadakis e Beskok, 2002; Karniadakis et al., 2005; Gad-El-Hak, 2006]. Estes efeitos tornam-se tão importantes quanto outros princípios

como a conservação de massa, a segunda lei de Newton e a conservação de energia. Assim, para melhorar o desenvolvimento, a fabricação e a utilização de sistemas microeletromecânicos é necessário entender a dinâmica de fluidos envolvida nos escoamentos em pequenas escalas.

Neste sentido, no que diz respeito à modelagem de fluidos, é usual se considerar dois caminhos [Gad-El-Hak, 2006]. O primeiro é admitir que o fluido é um meio contínuo, onde a matéria pode ser dividida indefinidamente sem que suas características físicas ou químicas sejam afetadas. O segundo é considerar o fluido como uma coleção de moléculas. No contínuo, quantidades macroscópicas como massa específica, velocidade, temperatura e pressão são definidas em cada ponto do espaço e do tempo e os princípios de conservação de massa, momento e energia conduzem a um conjunto de equações diferenciais parciais não lineares – Euler, Navier Stokes, Burnett – para estas quantidades. Neste caso a natureza molecular do gás ou do líquido é ignorada e o comportamento do fluido é descrito em termos de suas variações espaciais e temporais de massa específica, velocidade, temperatura e pressão. Basicamente, os modelos contínuos comandam satisfatoriamente as situações onde as quantidades macroscópicas podem ser definidas como médias sobre elementos que são grandes se comparados com a estrutura microscópica do fluido, mas pequenos se comparados com a escala do fenômeno e, por isso, permitem usar o cálculo diferencial para descrevê-los. O atrito superficial e o fluxo de calor podem ser expressos em termos de quantidades macroscópicas, como velocidade e temperatura, e relações lineares são válidas quando o escoamento está próximo do equilíbrio termodinâmico [Gad-El-Hak, 2006]. Entretanto, à medida que as dimensões do escoamento vão diminuindo e a razão entre a área superficial e o volume vai aumentando, torna-se necessário considerar os efeitos de rarefação mencionados anteriormente.

Para fluidos gasosos usa-se um parâmetro adimensional para definir o seu estado de rarefação. Este parâmetro é o número de Knudsen [Williams, 1971] definido como a razão entre o livre caminho médio  $l$  (distância percorrida por uma partícula sem sofrer colisão) e o comprimento característico do escoamento  $\hat{a}$  (que pode ser a sua dimensão geométrica). Assim

$$Kn = \frac{l}{\hat{a}}. \quad (1.1)$$

De acordo com o valor do número de Knudsen o estado de rarefação do gás normalmente é definido na forma de quatro regimes [Karniadakis e Beskok, 2002]:

- Regime contínuo:  $Kn < 0.01$ ;
- Regime “slip-flow”:  $0.01 < Kn < 0.1$ ;

- Regime de transição:  $0.1 < Kn < 10$ ;
- Regime de moléculas livres:  $Kn > 10$ .

No regime contínuo a modelagem dos fenômenos se baseia nas equações de Navier Stokes [Schlichting, 1976] com condições de contorno de não deslizamento e sem salto de temperatura. Ainda, se o número de Reynolds ( $Re$ ), que expressa a razão entre as forças de inércia e as forças de atrito do escoamento, tender ao infinito valem as equações de Euler para fluidos invíscidos. O número de Reynolds pode ser definido matematicamente como [Schlichting, 1976; Gad-El-Hak, 2006]

$$Re = \frac{\hat{u}\hat{\rho}\hat{a}}{\mu}, \quad (1.2)$$

onde  $\hat{u}$  é a velocidade característica,  $\hat{\rho}$  é a massa específica e  $\mu$  é a viscosidade do fluido.

No regime “slip-flow” as equações de Navier Stokes continuam valendo mas as relações lineares entre atrito superficial e gradiente de velocidade, e entre fluxo de calor e gradiente temperatura tornam-se imprecisas [Gad-El-Hak, 2006]. Além disso, os efeitos de rarefação precisam ser considerados e torna-se necessário usar condições de contorno que incluam os efeitos de escorregamento e de salto de temperatura, o qual pode ser definido como a diferença entre a temperatura da parede e a temperatura do gás em contato com esta parede.

Nos outros dois regimes a hipótese do fluido ser considerado um meio contínuo deixa de existir e passa a se considerar os chamados estados de rarefação. Neste ponto as equações de Navier Stokes deixam de ser adequadas e surge a dinâmica de gases rarefeitos, que é a parte da teoria cinética que trata do estudo dos gases considerando-os como um conjunto de partículas e não como um meio contínuo [Chapman e Cowling, 1970; Williams, 1971; Ferziger e Kaper, 1972; Sone, 2002].

Escoamentos de gases rarefeitos são encontrados não só em pequenas geometrias, como MEMS [Karniadakis e Beskok, 2002; Karniadakis et al., 2005; Raju e Roy, 2005; Rinaldi et al., 2008; Lee et al., 2008; Peng et al., 2008; Martinelli e Viktorov, 2009; Ghisi et al., 2009; Kasagi et al., 2009], mas também em aplicações de baixa pressão, como dispositivos de vácuo [Dushman, 1949; Wutz et al., 1989; Roth, 1990; Sharipov e Seleznev, 1998; Varoutis et al., 2008a; Varoutis et al., 2009], ou mesmo em vãos em alta altitude [Anderson, 1969; Kogan, 1992; Fan et al., 2001] e aplicações ambientais como mecânica de aerossóis [Williams e Loyalka, 1992; Willett et al., 1999; Aleksandrov et al., 2008].

Surgem também os modelos moleculares que consideram o fluido, seja ele líquido ou

gás, como um conjunto discreto de moléculas, átomos, íons ou elétrons. O objetivo passa a ser determinar posição, velocidade e estado das partículas em todos os instantes de tempo. O movimento das partículas é determinado pelas leis de mecânica clássica e as vezes pelas leis da mecânica quântica, o que complica muito os problemas. A interação entre as partículas é prescrita por um potencial entre dois corpos e a sua posição é determinada a partir das equações de Newton para o movimento [Gad-El-Hak, 2006]. Os métodos de dinâmica molecular têm duas dificuldades: primeira, escolher um potencial de interação que seja adequado para as partículas; segunda, um enorme esforço computacional. Essa é uma séria limitação para a dinâmica molecular. Como uma partícula em um conjunto de  $N$  moléculas vai interagir com todas as  $N$  moléculas, o esforço computacional é da ordem de  $N^2$ . Isso pode requerer um tempo de computação de centenas de anos. Além disso, simulações em dinâmica molecular são ineficientes em gases rarefeitos, pois as interações entre as moléculas são infreqüentes e, por isso, elas são mais usadas em gases densos e em líquidos [Gad-El-Hak, 2006]. Para gases rarefeitos uma das alternativas são as aproximações estatísticas como o método de Monte Carlo (DSMC) [Bird, 1994], onde o objetivo é “seguir” um grande número de moléculas selecionadas aleatoriamente, usar seus movimentos e interações para modificar suas posições e estados e depois aplicar o comportamento observado em um número maior de partículas. O DSMC vale para qualquer valor do número de Knudsen e, além disso, pode-se incluir efeitos de radiação, reações químicas e concentrações das espécies nas simulações. O DSMC é baseado diretamente na física da interação de cada molécula e também é um método estatístico, pois cada molécula é uma amostra de um conjunto maior. Outra vantagem em relação à dinâmica molecular é que o esforço computacional é da ordem de  $N$  ao invés de  $N^2$  [Gad-El-Hak, 2006].

Outra alternativa para modelar situações de gases no regime de transição é usar a equação de Boltzmann [Chapman e Cowling, 1970; Williams, 1971; Ferziger e Kaper, 1972; Cercignani, 1988; Sone, 2002]. Esta é uma equação íntegro-diferencial não linear muito complexa cuja variável dependente é a função de distribuição de partículas  $f$ , que representa o número esperado de partículas de um gás em um determinado instante de tempo e espaço de fase. Esta equação pode ser escrita como [Williams, 1971; Cercignani, 1988]

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = J(f', f), \quad (1.3)$$

onde  $f$  é a função de distribuição de partículas,  $t$  é a variável temporal,  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  é o vetor espacial,  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$  é o vetor velocidade das partículas e  $J(f', f)$  é o operador de colisão. Considerando a hipótese das moléculas do gás serem monoatômicas, sem carga elétrica, sofrerem

apenas colisões binárias e serem do tipo esferas rígidas, o operador integral de colisão é dado por [Williams, 1971]

$$J(f', f) = \int \int \int W(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}'; \mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}'_1) [f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}') f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}'_1) - f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_1)] d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}', \quad (1.4)$$

onde  $f'$  e  $f$  estão associadas respectivamente com as distribuições antes e após as colisões e  $W$  é a frequência de espalhamento diferencial para colisão entre dois corpos.

As quantidades macroscópicas como densidade numérica (ou seja, número de partículas por unidade de volume [Sharipov e Bertoldo, 2009]), velocidade, temperatura e fluxo de calor do gás são calculadas a partir de integrais da função  $f$  dadas respectivamente por [Williams, 1971]

$$n(t, \mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z, \quad (1.5)$$

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{n(t, \mathbf{r})} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z, \quad (1.6)$$

$$T(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{3kn(t, \mathbf{r})} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\mathbf{v} - \mathbf{u}(t, \mathbf{r})|^2 f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z \quad (1.7)$$

e

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\mathbf{v} - \mathbf{u}(t, \mathbf{r})|^2 [\mathbf{v} - \mathbf{u}(t, \mathbf{r})] f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z, \quad (1.8)$$

onde  $m$  é a massa de uma partícula de gás e  $k$  é a constante de Boltzmann.

A equação de Boltzmann também é válida para o regime contínuo. De fato, Williams [Williams, 1971] apresenta uma derivação das equações de Navier Stokes a partir desta equação. No regime de moléculas livres, onde as colisões entre as moléculas podem ser desprezadas, a equação de Boltzmann também pode ser aplicada desconsiderando-se o termo de colisão, o que a simplifica consideravelmente e permite que se obtenham soluções analíticas para geometrias simples [Sharipov e Seleznev, 1998].

Para formulação dos problemas é necessário que se considere condições de contorno apropriadas. De forma geral, a condição de contorno para uma superfície localizada na posição  $\mathbf{r}_s$  é dada por [Williams, 1971]

$$-\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} f(t, \mathbf{r}_s, \mathbf{v}) = \int_{\mathbf{v}' \cdot \mathbf{n} > 0} \mathbf{v}' \cdot \mathbf{n} \Gamma(\mathbf{r}_s, \mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) f(t, \mathbf{r}_s, \mathbf{v}') d\mathbf{v}', \quad \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (1.9)$$

onde  $\mathbf{n}$  é um vetor normal unitário externo à região ocupada pelo gás e  $\Gamma(\mathbf{r}_s, \mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$  é a probabilidade de uma partícula que colide na superfície  $\mathbf{r}_s$  com velocidade  $\mathbf{v}'$  ser refletida com velocidade  $\mathbf{v}$ . Os modelos de condição de contorno se diferenciam particularmente no termo  $\Gamma(\mathbf{r}_s, \mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$  da Eq. (1.9), pois ele descreve como é o processo de interação entre as partículas do gás e a superfície. Usualmente adota-se o modelo de Maxwell [Williams, 2001], que considera que uma parte das partículas que colidem nas paredes é refletida difusamente e outra parte é refletida especularmente. Dessa forma, para incluir ao mesmo tempo reflexão difusa e especular, usa-se um coeficiente de acomodação  $\alpha$  que representa a fração de partículas refletida difusamente pela parede, enquanto que a fração  $(1 - \alpha)$  é refletida especularmente [Williams, 1971]. Modelos mais refinados de descrição da interação gás-superfície, como o modelo de Cercignani-Lampis [Cercignani e Lampis, 1971], também podem ser considerados. Neste modelo usam-se coeficientes de acomodação normais e tangenciais que descrevem melhor o processo de colisão das partículas com as paredes, em especial no caso de superfícies rugosas.

As dificuldades de se trabalhar com a equação de Boltzmann aparecem principalmente devido à não linearidade do operador de colisão e da multidimensionalidade da equação (sete variáveis independentes  $t, \mathbf{r}, \mathbf{v}$ ) para o caso geral. Para tratar a não linearidade do termo integral, considerando o caso estacionário, propõe-se para as situações fracamente fora do estado de equilíbrio uma linearização [Williams, 1971; Williams, 2001] da forma

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_{eq}(\mathbf{v})[1 + h(\mathbf{r}, \mathbf{v})], \quad (1.10)$$

onde  $h$  é uma perturbação na Maxwelliana absoluta  $f_{eq}$  dada por

$$f_{eq}(\mathbf{v}) = n_{eq} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{eq}} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m|\mathbf{v} - \mathbf{u}_{eq}|^2}{2k T_{eq}} \right\}, \quad (1.11)$$

onde  $n_{eq}$ ,  $\mathbf{u}_{eq}$  e  $T_{eq}$  são respectivamente a densidade, a velocidade e a temperatura do gás em seu estado de equilíbrio. Assim, substituindo-se a Eq. (1.10) na Eq. (1.3) e usando algumas propriedades do operador de colisão  $J$  obtém-se a equação linearizada de Boltzmann para a perturbação  $h$  [Williams, 1971; Williams, 2001]

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_r h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) + \eta(v)h(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H(\mathbf{v}, \mathbf{v}')h(\mathbf{r}, \mathbf{v}')dv'_x dv'_y dv'_z, \quad (1.12)$$

onde  $\eta(v)$  é a frequência de colisão das partículas que, em geral, pode depender da velocidade molecular.

Para simplificar o termo integral a alternativa que vem sendo utilizada [Cercignani, 1988; Barichello e Siewert, 2003] é substituir o núcleo de colisão  $H(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$  por uma expressão



simplicada que conserve as propriedades físicas do processo de colisão, como conservação de massa, momento e energia. Dessa forma, uma equação de Boltzmann que teve o seu núcleo de colisão substituído por um núcleo aproximado é chamada de modelo cinético ou equação modelo [Cercignani, 1988].

Ao longo dos anos foram desenvolvidos vários modelos cinéticos para descrever o processo de colisão entre as partículas de um gás. Entre eles destacam-se os modelos com frequência de colisão constante – isto é, que independe da velocidade das partículas do gás – BGK [Bhatnagar et al., 1954], Gross-Jackson [Gross e Jackson, 1959], S [Shakhov, 1968], MRS [Garcia e Siewert, 2006] e os modelos com frequência de colisão variável – que depende da velocidade das partículas do gás – CLF [Cercignani, 1966; Loyalka e Ferziger, 1968], CES e CEBS [Barichello e Siewert, 2003], todos estes para o caso de uma espécie de gás. Há também os modelos para misturas de dois gases como o modelo de Hamel [Hamel, 1965] e o de McCormack [McCormack, 1973]. É importante salientar um aspecto importante dos modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS, os quais são utilizados neste trabalho. De acordo com a derivação proposta por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2003] e estendida por Siewert e Sharipov [Siewert e Sharipov, 2002], os modelos BGK e S correspondem a uma expansão de dois termos na aproximação sintética do núcleo de espalhamento para esferas rígidas proposta por Pekeris e Alterman [Pekeris e Alterman, 1957], enquanto que os modelos Gross-Jackson e MRS representam uma expansão de três termos, conforme mostrado por Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2006]. Esta melhor aproximação implica em resultados mais precisos, na maior parte dos casos analisados [Scherer et al., 2009a], para as quantidades macroscópicas dos problemas como os perfis de velocidade e temperatura.

As equações modelo vêm sendo usadas há muitos anos com o propósito de resolver problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos e, mais recentemente, devido às aplicações em MEMS. Nestes problemas busca-se analisar diferentes efeitos em escoamentos de gases rarefeitos, como os provocados pela existência de gradientes de temperatura (“creep” térmico), pressão (Poiseuille) ou velocidade (Kramers), ou então os causados por diferenças de temperatura ou movimentos nas paredes de canais (transferência de calor ou Couette), ou ainda os provocados por diferentes concentrações de gases em uma mistura. Em alguns destes problemas consegue-se determinar coeficientes de deslizamento e de salto de temperatura usados nas condições de contorno do regime “slip-flow”. Para o tratamento de problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos, como os problemas de Poiseuille, “creep” térmico, Couette, deslizamento térmico, Kramers, transferência de calor e salto de temperatura, pode-se citar as referências [Welandar,

1954; Gross e Ziering, 1959; Frankowski et al., 1965; Bassanini et al., 1967; Bassanini et al., 1968; Loyalka e Ferziger, 1968; Cassell e Williams, 1972; Thomas et al., 1973; Onishi, 1974; Loyalka et al., 1978; Thomas, 1985; Valougeorgis e Thomas, 1985; Loyalka e Hickey, 1989; Ohwada et al., 1989; Loyalka, 1989; Sone et al., 1989b; Loyalka e Hickey, 1990; Sone et al., 1990; Cercignani e Lampis, 1991; Loyalka e Hickey, 1991; Wakabayashi et al., 1996; Onishi, 1997; Aoki et al., 2001; Sharipov, 2002; Sharipov, 2003; Zhang et al., 2008; Sharipov e Kalempa, 2008; Varoutis et al., 2008b; Breyiannis et al., 2008; Shakhov e Titarev, 2009; Taheri et al., 2009; Loyalka e Tompson, 2009], nas quais eles foram abordados. Nestas referências, em geral, foram utilizados métodos numéricos como esquemas de diferenças finitas ou o método de velocidades discretas, métodos analíticos mais sofisticados como o método das soluções elementares, expansões em séries ou ainda os métodos conhecidos como  $S_N$  e  $F_N$ .

Recentemente estes problemas têm sido abordados com o método analítico de ordenadas discretas (ADO) [Barichello e Siewert, 1999b], que é uma versão analítica do método de ordenadas discretas proposto, segundo Garcia [Garcia, 2002], por Wick [Wick, 1943] e utilizado posteriormente por Chandrasekhar [Chandrasekhar, 1960] para problemas de transferência radiativa. A principal diferença entre as duas abordagens é que no método utilizado por Chandrasekhar determinam-se as constantes de separação através das raízes de uma equação característica, enquanto que no método ADO as constantes de separação são determinadas resolvendo-se um problema matricial de autovalor. Além disso, no método ADO é utilizado um esquema de quadratura arbitrário. Devido ao caráter analítico, em geral soluções mais precisas e mais rápidas do ponto de vista computacional têm sido obtidas em problemas já tratados anteriormente por outras metodologias.

Muitos trabalhos foram feitos com o método ADO utilizando diferentes modelos cinéticos, ou de condições de contorno, para resolver os problemas da dinâmica de gases rarefeitos citados anteriormente. Alguns destes trabalhos estão registrados nas seguintes referências:

- Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 1999a], onde foi resolvido o problema de Poiseuille;
- Siewert [Siewert, 2001], onde foi resolvido o problema de Kramers;
- Siewert [Siewert, 2002a], onde foram resolvidos os problemas de Poiseuille e do “creep” térmico;
- Siewert e Sharipov [Siewert e Sharipov, 2002], onde foram resolvidos os problemas de Kramers e do deslizamento térmico;

- Siewert [Siewert, 1999] e Scherer e Barichello [Scherer e Barichello, 2006], [Scherer e Barichello, 2009], onde foi resolvido o problema de transferência de calor;
- Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2000], Barichello, Bartz, Camargo e Siewert [Barichello et al., 2002] e Siewert [Siewert, 2004], onde foi resolvido o problema do salto de temperatura;

todos estes para o caso de um gás. Há também os trabalhos feitos em misturas binárias de gases com o modelo McCormack, entre os quais estão:

- Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2004], onde foi resolvido o problema de transferência de calor;
- Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2004a], onde foram resolvidos os problemas de Kramers e do deslizamento térmico;
- Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2004b], onde foram resolvidos os problemas de Poiseuille e do “creep” térmico;
- Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2005], onde foi resolvido o problema de Couette;
- Siewert [Siewert, 2005] e Knackfuss e Barichello [Knackfuss e Barichello, 2006], onde foi resolvido o problema do salto de temperatura.

Há também os trabalhos onde foi usada a equação linearizada de Boltzmann propriamente dita. Neste caso foi proposta uma expansão da solução em termos de polinômios de Legendre e o método ADO foi usado para determinar os coeficientes desta expansão. Para o caso de uma espécie de gás podem-se citar os seguintes trabalhos:

- Siewert [Siewert, 2003a], onde foi resolvido o problema de transferência de calor;
- Siewert [Siewert, 2003b], onde foi resolvido o problema do salto de temperatura;
- Siewert [Siewert, 2003c], onde foram resolvidos os problemas de Poiseuille, “creep” térmico, Couette, deslizamento térmico e Kramers.

Complementando, destacam-se as seguintes referências onde foi usada a equação linearizada de Boltzmann para misturas binárias de gases em procedimentos também baseados em expansões polinomiais combinados com o método ADO:

- Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2007a], onde foram resolvidos os problemas de Poiseuille e “creep” térmico;
- Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2007b], onde foi resolvido o problema de transferência de calor;
- Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2007c], onde foi resolvido o problema do salto de temperatura;
- Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2007d], onde foram resolvidos os problemas de Kramers e do deslizamento térmico;
- Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2008], onde foi resolvido o problema de Couette.

Além disso, o método ADO tem sido usado na tentativa de estabelecer soluções “unificadas” e, por isso, diferente das demais. Neste caso para uma classe de problemas relativos a fluxo de um gás (Poiseuille, “creep” térmico, Couette, Kramers e deslizamento térmico) foi desenvolvida uma solução genérica baseada em uma metodologia de caráter analítico. Para o caso de uma espécie de gás os seguintes trabalhos destacam-se ao se tratar de soluções unificadas para os problemas mencionados:

- Barichello, Camargo, Rodrigues e Siewert [Barichello et al., 2001], onde o modelo usado foi o BGK;
- Siewert [Siewert, 2002b], onde foi usado o modelo CES;
- Camargo e Barichello [Camargo e Barichello, 2004], onde foi usado o modelo CLF;
- Cabrera e Barichello [Cabrera e Barichello, 2006], onde foi usado o modelo S.
- Scherer, Prolo Filho e Barichello [Scherer et al., 2009a], onde os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS foram usados.

Para os problemas de transferência de calor e do salto de temperatura pode-se citar a Ref. [Scherer et al., 2009b], onde foram usados os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS.

## 1.1 Os Problemas de Evaporação

No que diz respeito à análise dos fenômenos de evaporação em gases rarefeitos, neste trabalho iniciou-se o estudo de alguns problemas clássicos de evaporação onde deseja-se determinar o comportamento de um gás rarefeito que se encontra em contato com uma fase condensada

na qual ocorre a mudança de estado físico. Existem problemas em semi-espaço como os casos de um gás em contato com uma interface plana, cilíndrica ou esférica e que ocupa uma região semi-infinita, e também problemas em canal como gases confinados entre duas interfaces planas, dois cilindros ou duas esferas. Estes problemas são de interesse em diversas áreas de aplicação como as mencionadas por Ytrehus [Ytrehus, 1976]: estudos meteorológicos em altas altitudes, resfriamento de reatores nucleares, projeto de aeronaves e indústria petroquímica, ou ainda destilação em baixa pressão [Atkins et al., 1959], radiação a laser [Kuznetsova et al., 1997], deposição de filmes metálicos [Garno, 1978; Orr e Goldman, 1985; Kaito et al., 1998], aquecimento de dutos, vaporização à laser [Aoki e Masukawa, 1994] e estudos em astrofísica [Luiten et al., 1996; Østmo et al., 1997]. O objetivo é determinar as relações entre as propriedades físicas do fluido, como densidade, velocidade, temperatura e pressão, nas interfaces e ao longo do domínio espacial de cada problema. A fim de estudar estes problemas, muitos trabalhos já foram escritos ao longo das últimas décadas usando esquemas de diferenças finitas, métodos de momentos ou variacionais, métodos de Monte Carlo (DSMC) e simulações em dinâmica molecular. Entre eles podem-se citar as Refs. [Pao, 1971a; Pao, 1971b; Cipolla et al., 1974; Ytrehus, 1976; Aoki e Cercignani, 1983; Koffman et al., 1984; Soga, 1985; Sone et al., 1989a; Aoki et al., 1990; Sibold e Urbassek, 1991; Aoki et al., 1991; Sone e Sugimoto, 1993; Sone e Sugimoto, 1995; Sone et al., 1996; Østmo et al., 1997; Aoki et al., 1998; Takata et al., 1998; Sone et al., 1999; Takata e Aoki, 1999; Sone et al., 2001; Taguchi et al., 2003; Meland et al., 2004; Taguchi et al., 2004; Frezzotti et al., 2005; Frezzotti e Ytrehus, 2006; Takata et al., 2006; Frezzotti, 2007; Takata e Golse, 2007; Yano, 2008].

Segundo Sone [Sone, 1998] os problemas de evaporação podem ser divididos em duas classes:

- *evaporação fraca*: quando a velocidade de escoamento do gás que está evaporando é pequena e o seu número de Mach ( $Ma$ ) é próximo de zero;
- *evaporação forte*: quando a velocidade de escoamento do gás que está evaporando é alta e o seu número de Mach é próximo de um.

Segundo Gad-El-Hak [Gad-El-Hak, 2006], o número de Mach é dado pela razão entre a velocidade do escoamento e a velocidade do som. Na dinâmica de gases rarefeitos a expressão mais comumente usada para o número de Mach é dada por [Sone et al., 2001]

$$Ma = u_{eq} \sqrt{\frac{3m}{5kT_{eq}}}, \quad (1.13)$$

onde  $u_{eq}$  é a velocidade de equilíbrio do gás. Ainda seguindo Sone [Sone, 1998] e Aoki e Masukawa [Aoki e Masukawa, 1994], os problemas de evaporação fraca podem ser tratados com modelos lineares da equação de Boltzmann, onde é comum propor para a função de distribuição a linearização dada pela Eq. (1.10) considerando-se que a velocidade de equilíbrio  $u_{eq}$  é nula. Já os problemas de evaporação forte necessitam de um modelo não linear para melhor descrever os efeitos provocados pela alta velocidade do escoamento devido a evaporação.

Segundo Sone, Takata e Golse [Sone et al., 2001], os problemas de evaporação forte podem ser classificados em

- *evaporação subsônica* quando  $Ma \leq 1$

ou

- *evaporação supersônica* quando  $Ma > 1$ .

Além do interesse físico nestes problemas há também o interesse matemático relacionado à existência e unicidade de solução para os casos estacionários. De acordo com Sone, Takata e Golse [Sone et al., 2001], entre os problemas de evaporação forte em semi-espaço apenas os casos de evaporação subsônica possuem solução estacionária, ou seja, quando o número de Mach do escoamento é menor ou igual a um. Entretanto, nota-se na Eq. (1.13) que o número de Mach depende diretamente da velocidade de equilíbrio  $u_{eq}$  do gás. Por isso, existe um valor limite para a velocidade  $u_{eq}$ , equivalente a  $Ma = 1$ , para que os problemas de evaporação forte em semi-espaço tenham solução. Este valor limite já havia sido determinado anteriormente por Arthur e Cercignani [Arthur e Cercignani, 1980] que encontraram

$$u_{crit} = \sqrt{\frac{5kT_{eq}}{3m}} \quad (1.14)$$

para moléculas com três graus de liberdade e, por isso, estes problemas possuem solução apenas se  $u_{eq} \leq u_{crit}$ .

Em relação a problemas em canal, segundo Aoki e Masukawa [Aoki e Masukawa, 1994] a evaporação será fraca somente se as diferenças entre as temperaturas e as pressões de saturação das fases condensadas forem pequenas. Um dos aspectos de grande interesse nos problemas de evaporação fraca em canal é a existência do chamado *reverso de temperatura*. Este é um fenômeno onde, sob certas condições, ocorre a inversão de sentido do gradiente de temperatura do gás em relação à diferença de temperatura imposta pelas fases condensadas.

Outro aspecto de grande interesse no estudo dos problemas de evaporação em gases rarefeitos é a existência dos chamados “saltos” de temperatura e de pressão existentes nas fases

condensadas. O salto de temperatura, como já foi falado, consiste em uma diferença entre a temperatura da fase condensada e a temperatura do gás em contato com esta superfície. O mesmo é válido para o salto de pressão, pois a pressão do vapor em contato com a fase condensada é diferente da pressão de saturação na temperatura da superfície. No regime contínuo o comportamento de um gás em contato com a superfície sólida de um corpo é descrito pelas equações de Euler ou Navier-Stokes com condições de contorno de não deslizamento e sem salto de temperatura. Entretanto, essas condições são inválidas se uma fase de transição está no lugar da superfície do corpo, isto é, se vapores ao redor da fase de transição são considerados [Yasuda et al., 2005]. Para este caso é necessário incluir nas equações de Euler e Navier-Stokes condições de contorno que descrevam estes saltos corretamente. Estes saltos podem ser determinados resolvendo-se os problemas com a equação de Boltzmann. Quando a evaporação ou condensação é forte, conforme dito anteriormente o problema deve incluir efeitos não lineares e as condições de salto obtidas são válidas para as equações de Euler [Yasuda et al., 2005]. Se a evaporação/condensação é fraca o problema pode ser modelado pela equação linearizada de Boltzmann e as condições de salto são válidas para as equações de Navier-Stokes. O mesmo também é válido para misturas de gases [Yasuda et al., 2005]. Assim, para estudar escoamentos de gases em contato com fases de transição usando as equações do regime contínuo é necessário condições de contorno que descrevam esses saltos corretamente. Tais condições são chamadas de “condições de salto para evaporação e condensação”.

Ainda em relação aos problemas de evaporação forte, segundo Cercignani [Cercignani, 1980] é possível fazer uma linearização, diferente da usada na evaporação fraca, que de certa forma leve em conta os efeitos causados pela alta velocidade de escoamento do gás que está evaporando. Agora, a linearização será feita usando novamente a Eq. (1.10), mas considerando que na distribuição Maxwelliana a velocidade de equilíbrio do gás  $\mathbf{u}_{eq}$  não seja nula. Isso faz com que o termo de espalhamento da equação linearizada de Boltzmann contenha um parâmetro que represente esta velocidade, o que não ocorre nos demais problemas da dinâmica de gases rarefeitos mencionados até o momento.

Para listar mais especificamente algumas referências em que problemas de evaporação fraca foram tratados com equações modelo, nos seguintes trabalhos foi usado o modelo BGK:

- Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1973], onde foi resolvido o problema em semi-espaço usando o método das soluções elementares;
- Thomas, Chang e Siewert [Thomas et al., 1974], onde foi resolvido o problema do reverso

de temperatura usando o método das soluções elementares;

- Thomas e Valougeorgis [Thomas, 1985], onde foi resolvido o problema em semi-espaço usando o método  $F_N$ .

Há também os trabalhos de evaporação fraca onde foi usada a equação linearizada de Boltzmann propriamente dita, entre os quais estão:

- Sone, Ohwada e Aoki [Sone et al., 1989a], onde foi resolvido o problema em semi-espaço (para o caso de uma espécie de gás) usando um método de diferenças finitas;
- Siewert [Siewert, 2003a], onde foram resolvidos os problemas em semi-espaço e do reverso de temperatura (para o caso de uma espécie de gás) usando o método ADO;
- Yasuda, Takata e Aoki [Yasuda et al., 2005], onde foi resolvido o problema em semi-espaço (para misturas binárias de gases) usando um método de diferenças finitas.

Entre os trabalhos de evaporação forte já feitos com equações modelo destacam-se as seguintes referências:

- Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1981], onde foi resolvido o problema linearizado em semi-espaço usando a versão unidimensional do modelo BGK e o método das soluções elementares;
- Loyalka, Siewert e Thomas [Loyalka et al., 1981], onde foi resolvido o problema linearizado em semi-espaço usando a versão unidimensional do modelo BGK e o método  $F_N$ ;
- Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1982], onde foi resolvido o problema linearizado em semi-espaço usando o modelo BGK e o método das soluções elementares.

O problema original (e não linear) de evaporação forte em semi-espaço foi abordado no trabalho de Ytrehus [Ytrehus, 1976], onde um conjunto de equações de momento em que a equação de Boltzmann é satisfeita em um sentido médio é resolvido numericamente.

## 1.2 Objetivos e Contribuições

Este trabalho tem como um dos objetivos construir soluções unificadas para problemas de evaporação em gases rarefeitos usando o método ADO e modelos cinéticos. Serão apresentados a descrição física dos problemas, a formulação matemática, o desenvolvimento da solução



em ordenadas discretas e também alguns resultados numéricos. São abordados um problema de evaporação fraca em semi-espço, o problema do reverso de temperatura e um problema de evaporação forte em semi-espço. Os modelos cinéticos utilizados são os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS (estes para o caso de uma espécie de gás) e o McCormack (para misturas binárias de gases). Também são comparados os resultados obtidos aqui com os de outras referências onde foram usados métodos numéricos como esquemas de diferenças finitas. Em relação ao problema de evaporação forte, os efeitos de não linearidade são levados em conta. É importante salientar que o método ADO tem se mostrado muito bom e preciso para vários problemas e por isso segue-se trabalhando com ele. Devido ao seu caráter analítico e também por fornecer uma solução em forma fechada, ele se mostra adequado para o tratamento dos aspectos não lineares.

As contribuições deste trabalho para a área da dinâmica de gases rarefeitos ficam por conta dos novos resultados com os modelos S, Gross-Jackson, MRS e McCormack obtidos com o método ADO, os quais ainda não haviam sido determinados. A solução em ordenadas discretas com o modelo BGK também é uma contribuição, pois até o momento os problemas de evaporação tratados com este modelo foram resolvidos apenas com o método das soluções elementares,  $F_N$ , ou então métodos numéricos. Além disso, alguns aspectos matemáticos do método ADO utilizado na resolução dos problemas também são de grande contribuição, como a obtenção de problemas de autovalor ainda não construídos em outras referências, particularmente o desenvolvimento de um problema de autovalor quadrático para o caso de evaporação forte. O tratamento da não linearidade feito aqui também é uma contribuição, pois foi possível obter analiticamente resultados antes obtidos com métodos numéricos.

Dessa forma, organizou-se o trabalho a seguir de modo que no capítulo 2 são abordados os problemas de evaporação fraca em semi-espço e do reverso de temperatura, construindo-se uma solução unificada com o método ADO para os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS. No capítulo 3 são abordados novamente os problemas de evaporação fraca em semi-espço e do reverso de temperatura, construindo-se uma solução unificada com o método ADO e o modelo McCormack. No capítulo 4 é abordado o problema de evaporação forte em semi-espço. Neste capítulo é construída a solução ADO com o modelo BGK para a versão linearizada do problema e esta solução é usada para fazer pós-processamentos a fim de resolver também o problema original, que é não linear. No capítulo 5 é construída uma solução unificada com o método ADO para o problema linearizado de evaporação forte em semi-espço usando os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS. No capítulo 6 são mostradas algumas conclusões e comentários finais.

## 2 EVAPORAÇÃO FRACA: CASO DE UM GÁS

Neste capítulo são abordados os problemas de evaporação fraca definidos por um gás mantido em um canal plano ou em um semi-espço. O objetivo é construir uma solução unificada com o método ADO para os problemas do reverso de temperatura (canal) e de evaporação/condensação (semi-espço) usando os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS. Dessa forma, além de apresentar novos resultados para os modelos S, Gross-Jackson e MRS, também é feita uma análise comparativa entre os resultados dos modelos cinéticos e os da ELB encontrados em outras referências. Resultados para os saltos de densidade e de temperatura também são apresentados.

### 2.1 Definição dos Problemas de Interesse

#### 2.1.1 O Problema do Reverso de Temperatura

Neste problema considera-se um gás confinado entre duas interfaces (canal com largura  $2\bar{a}$ ) com diferentes temperaturas. A interface (gás-líquido ou gás-sólido) localizada em  $x = -\bar{a}$  é mantida à temperatura  $T_{a-}$ , enquanto que a interface localizada em  $x = \bar{a}$  possui temperatura  $T_{a+}$  (com  $T_{a-} < T_{a+}$ ), de modo que o gás evapora na interface com maior temperatura e condensa na outra conforme mostra a Figura 2.1.



Figura 2.1 – Evaporação Fraca em Canal

Aqui  $n_{a-}$  e  $n_{a+}$  são respectivamente as densidades de saturação do gás nas temperaturas  $T_{a-}$  e  $T_{a+}$ . Como a interface localizada em  $x = \bar{a}$  é mais quente que a interface em  $x = -\bar{a}$ , é esperado que a temperatura do gás próximo à interface quente seja maior que a temperatura

do gás próximo à interface fria e, conseqüentemente, o gradiente de temperatura será positivo conforme mostra a Figura 2.2.

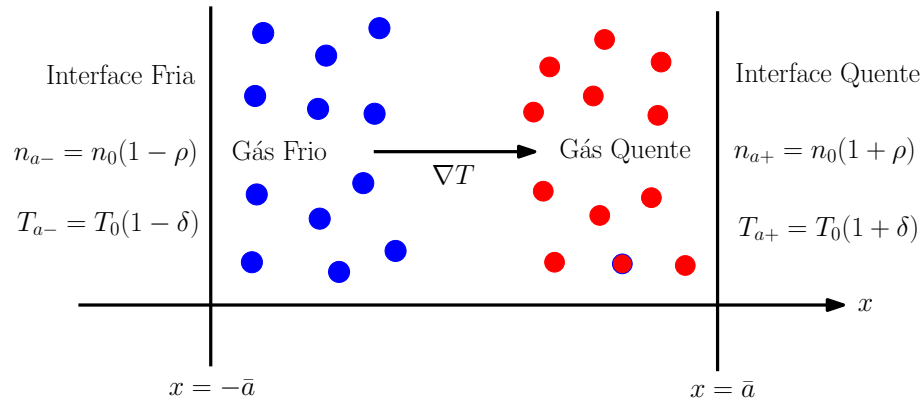


Figura 2.2 – Temperatura do Gás entre as Interfaces

Considera-se aqui que  $T_{a-} = T_0(1 - \delta)$  e  $T_{a+} = T_0(1 + \delta)$ , onde  $T_0$  é uma temperatura de referência e  $\delta$  é um desvio de temperatura (positivo) na interface. Da mesma forma  $n_{a-} = n_0(1 - \rho)$  e  $n_{a+} = n_0(1 + \rho)$ , onde  $n_0$  é a densidade de equilíbrio do gás e

$$\rho = \hat{\beta}\delta, \quad (2.1)$$

onde  $\hat{\beta}$  é a declividade da curva de densidade-temperatura de saturação do gás na temperatura  $T_0$  [Pao, 1971a]. Usando a equação de Clausius-Clapeyron [Pao, 1971a], o parâmetro  $\hat{\beta}$  é dado por

$$\hat{\beta} = \frac{L}{kT_0} - 1, \quad (2.2)$$

onde  $L$  é o calor latente da fase em transição na temperatura  $T_0$  e  $k$  é a constante de Boltzmann. Conforme foi sugerido por Pao [Pao, 1971a], considerando que o gás está em estado de rarefação a sua temperatura pode ter um comportamento diferente do esperado, ou seja, a temperatura do gás próximo à interface quente pode ser menor que a temperatura do gás próximo à interface fria e, conseqüentemente, o gradiente de temperatura será negativo conforme indicado na Figura 2.3.

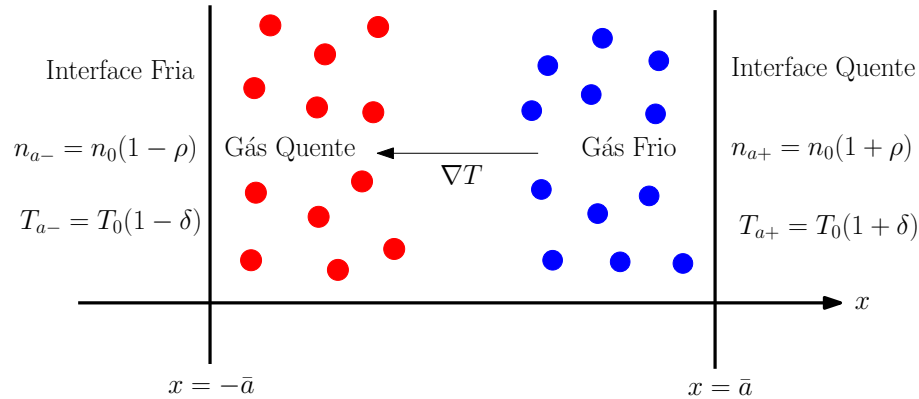


Figura 2.3 – Reverso de Temperatura

Este fenômeno é chamado de *reverso de temperatura* e, de acordo com Pao [Pao, 1971a], ele ocorrerá se o valor de  $L/(kT_0)$  for suficientemente grande. Assim, usando a Eq. (2.2), existirá um valor crítico para o parâmetro  $\hat{\beta}$  tal que, para  $\hat{\beta} > \hat{\beta}_{crit}$ , o gradiente de temperatura do gás estará em sentido oposto à diferença de temperatura imposta pelas interfaces. Assim, seguindo Pao [Pao, 1971a] novamente e usando a Eq. (2.2), o critério formal para a existência do reverso de temperatura é que o calor latente  $L$  da fase em transição satisfaça a condição

$$L > (\hat{\beta}_{crit} + 1)kT_0. \quad (2.3)$$

Ao resolver este problema deseja-se determinar os valores de  $\hat{\beta}_{crit}$  para canais com diferentes larguras, além de avaliar as quantidades macroscópicas do gás como as perturbações de densidade, temperatura e os fluxos de massa e de calor.

A fim de justificar a existência do reverso de temperatura algumas referências foram consultadas, porém não se encontrou uma explicação única. Segundo Thomas, Chang e Siewert [Thomas et al., 1974], uma aparente explicação para o inesperado comportamento da temperatura do gás é que para grandes valores de  $\hat{\beta}$  a evaporação é tão rápida que a transferência de energia pelo escoamento de massa precisa ser contrabalanceada por uma condução de calor na direção oposta. Segundo Mills e Phillips [Mills e Phillips, 2003], a inversão de sentido do gradiente de temperatura do gás ocorrerá sempre que o escoamento de calor provocado pelo calor latente da fase em transição representar a maior parte do fluxo de calor total do gás. Segundo Popov, Melling, Durst e Ward [Popov et al., 2005], alguns pesquisadores consideram que estes perfis de temperatura contradizem as leis da física e, por isso, são chamados de “anômalos”, “invertidos” ou “paradójicos”. Porém, outros argumentam fortemente em seu favor. Neste sentido Hermans e Beenakker [Hermans e Beenakker, 1986] verificaram que o reverso de tem-

peratura não viola nenhuma lei fundamental da física. Entretanto não conseguiram provar que este fenômeno necessariamente ocorre, mas mostraram que ele não pode ser excluído em situações de desequilíbrio termodinâmico.

Estudos experimentais também não têm resolvido esta controvérsia [Popov et al., 2005], mas alguns dados publicados ao menos não excluem a possibilidade de existir o reverso de temperatura. Shankar e Deshpande [Shankar e Deshpande, 1990] verificaram a existência dos saltos de temperatura em interfaces gás-líquido com experimentos usando água, freon e mercúrio. Entretanto não chegaram a observar a existência do reverso de temperatura, pois não conseguiram controlar os níveis de contaminação com ar em seus experimentos.

Dessa forma não se encontrou uma explicação conclusiva para a inversão de sentido do gradiente de temperatura e nem se conseguiu observar experimentalmente se ele ocorre ou não. Neste sentido este trabalho tem como um dos objetivos apresentar uma solução matemática para este problema, baseada principalmente nas Refs. [Siewert, 2003a] e [Scherer et al., 2009b], evidenciando os aspectos analíticos e computacionais da mesma. Devido à insuficiência de dados publicados não se encontrou um melhor entendimento físico do problema nem uma comprovação experimental e, por isso, o embasamento teórico e a viabilidade física do mesmo não serão tratados.

### 2.1.2 O Problema de Evaporação/Condensação em Semi-Espaço

Neste problema considera-se um gás rarefeito em contato com uma interface plana, com temperatura uniforme  $T_0$ , localizada na posição  $x = 0$  [Sone et al., 1989a]. Considera-se também que as partículas de gás que são emitidas por esta interface possuem a mesma temperatura  $T_0$  e pressão  $p_0$ , que é a pressão de saturação na temperatura  $T_0$ . O gás ocupa o semi-espaco  $x > 0$  e, na região afastada da interface, ele encontra-se em seu estado de equilíbrio caracterizado pela temperatura  $T_\infty$ , pressão  $p_\infty$  e velocidade normal à interface  $\mathbf{u}_\infty = (u_\infty, 0, 0)$ . Dependendo da pressão  $p_\infty$  ser menor ou maior que a pressão  $p_0$ , o gás irá evaporar ou condensar na superfície da fase condensada conforme mostram as Figuras 2.4 e 2.5.

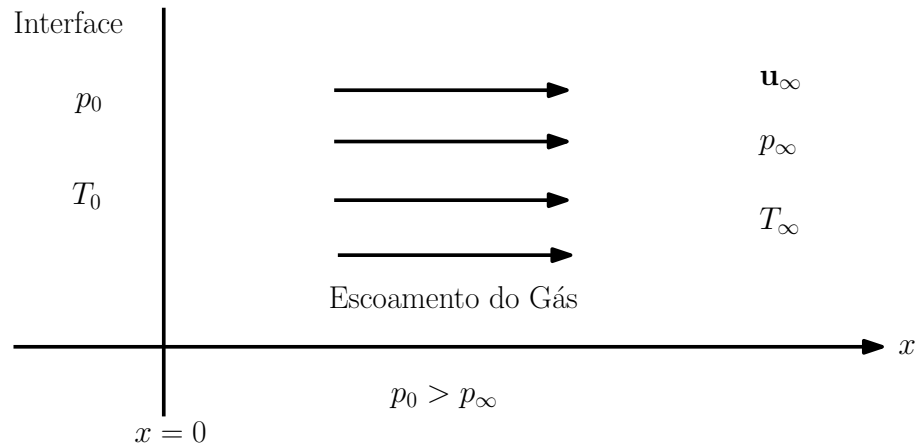


Figura 2.4 – Evaporação em Semi-Espaço

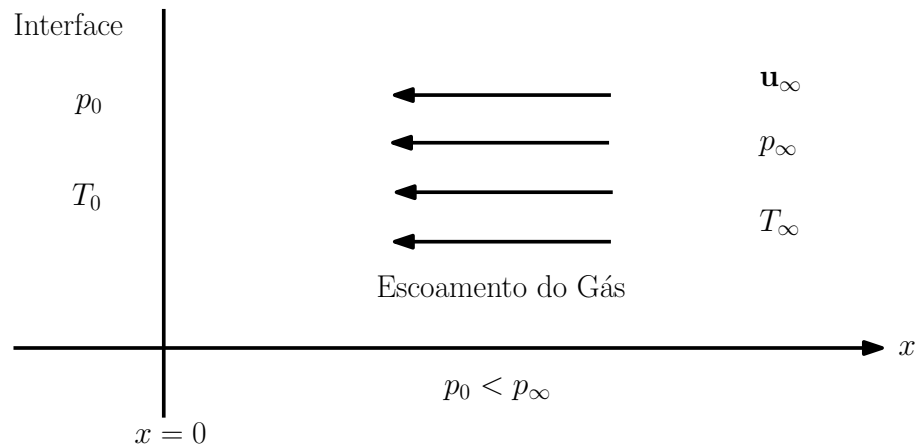


Figura 2.5 – Condensação em Semi-Espaço

Assim como no problema anterior, aqui também busca-se determinar as perturbações de densidade e de temperatura do gás, bem como os fluxos de massa e de calor na região de semi-espaço localizada entre a interface e a região de equilíbrio. Além disso, segundo a Ref. [Sone et al., 1989a], as quantidades  $T_0$ ,  $p_0$ ,  $T_\infty$ ,  $p_\infty$  e  $u_\infty$  são relacionadas e é também de interesse determinar as relações existentes entre elas. Dessa forma, seguindo novamente a Ref. [Sone et al., 1989a], considera-se que as quantidades  $T_\infty$  e  $p_\infty$  são próximas de  $T_0$  e  $p_0$ , o que caracteriza uma evaporação fraca, e por isso o problema pode ser tratado por modelos lineares da equação de Boltzmann.

## 2.2 Formulação Matemática

Para derivação da formulação matemática dos problemas de interesse, repete-se aqui a equação não linear de Boltzmann escrita em sua forma estacionária como [Williams, 2001]

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = J(f', f), \quad (2.4)$$

onde  $f$  é a função de distribuição de partículas ( $f'$  e  $f$  estão associadas respectivamente com as distribuições antes e após as colisões) e  $J$  é o operador de colisão [Williams, 1971; Williams, 2001]. Para situações onde o gás está fracamente fora do seu estado de equilíbrio, é usual escrever  $f$  como [Williams, 2001; Barichello e Siewert, 2003]

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{v})[1 + h(\mathbf{r}, \mathbf{v})], \quad (2.5)$$

onde  $h$  é uma perturbação na distribuição Maxwelliana absoluta  $f_0$ , dada por

$$f_0(\mathbf{v}) = n_0(\lambda_0/\pi)^{3/2}e^{-\lambda_0 v^2}, \quad \lambda_0 = m/(2kT_0), \quad (2.6)$$

a qual é considerada a distribuição de equilíbrio  $f_{eq}$  mostrada na Eq. (1.11). Aqui  $m$  é a massa da partícula de gás. Substituindo a Eq. (2.5) na Eq. (2.4), seguindo os procedimentos mostrados nas Refs. [Williams, 1971; Williams, 2001] e utilizando algumas considerações físicas do processo de colisão [Williams, 1971; Barichello e Siewert, 2003], obtém-se a equação linearizada unidimensional para a perturbação  $h$

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) + \varepsilon h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') F(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (2.7)$$

onde

$$\mathbf{c} = \mathbf{v}[m/(2kT_0)]^{1/2} \quad (2.8)$$

é o vetor velocidade de partículas  $\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)$ , com magnitude  $c$ , adimensionalizado. A variável espacial adimensionalizada  $\tau = x/l$  é escrita em termos do livre caminho médio  $l$ , que até este ponto é considerado arbitrário. Continuando

$$\varepsilon = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} l, \quad (2.9)$$

onde  $\sigma_0$  é o diâmetro de colisão das partículas de gás (na forma de esferas rígidas).

Neste capítulo são utilizados os modelos cinéticos BGK, S, Gross-Jackson e MRS para descrever o processo de colisão das partículas de gás. As derivações destes modelos não são

apresentadas neste trabalho, mas podem ser encontradas em detalhes respectivamente nas Refs. [Bhatnagar et al., 1954], [Shakhov, 1968], [Gross e Jackson, 1959] e [Garcia e Siewert, 2006]. De fato, seguindo Siewert [Siewert, 2002a], Scherer [Scherer, 2005] e Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2006], mediante escolha apropriada dos parâmetros  $\beta$  e  $\varpi$  pode-se escrever o núcleo de espalhamento de maneira unificada para estes quatro modelos e, desta forma, definir quatro equações cinéticas. Assim, na Eq. (2.7) tem-se

$$F(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = 1 + 2(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}) + (2/3)(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2) + \beta M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) + \varpi N(\mathbf{c}' : \mathbf{c}), \quad (2.10)$$

onde

$$M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = (4/5)(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2) \quad (2.11)$$

e

$$N(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = 2 [(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2]. \quad (2.12)$$

Continuando, conforme mostrado por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2003], dependendo do modelo cinético o parâmetro  $\varepsilon$  assumirá diferentes valores quando definido em termos do livre caminho médio baseado na viscosidade ( $\varepsilon_p$ ) ou da condutividade térmica ( $\varepsilon_t$ ). Desta forma, seguindo novamente Siewert e Sharipov [Siewert e Sharipov, 2002], Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2003], Scherer [Scherer, 2005] e Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2006] completa-se as definições da Eq. (2.10) da seguinte maneira:

- **modelo BGK**

$$\beta = \varpi = 0, \quad \varepsilon_t = \varepsilon_p = 1 \quad \text{e} \quad \varepsilon_p/\varepsilon_t = 1 \quad (2.13)$$

- **modelo S**

$$\beta = 1/3, \quad \varpi = 0, \quad \varepsilon_t = 3/2, \quad \varepsilon_p = 1 \quad \text{e} \quad \varepsilon_p/\varepsilon_t = 2/3 \quad (2.14)$$

- **modelo Gross-Jackson (GJ)**

$$\beta = 5/9, \quad \varpi = 1/3, \quad \varepsilon_t = 9/4, \quad \varepsilon_p = 3/2 \quad \text{e} \quad \varepsilon_p/\varepsilon_t = 2/3 \quad (2.15)$$



- modelo MRS

$$\beta = 1 - (16/15)2^{1/2}, \quad \varpi = 1 - (8/5)2^{1/2}, \quad \varepsilon_t = (15/32)2^{1/2}, \quad \varepsilon_p = (5/16)2^{1/2}$$

$$\text{e } \varepsilon_p/\varepsilon_t = 2/3. \quad (2.16)$$

Ainda em relação aos modelos cinéticos citados, nota-se nas Eqs. (2.13) a (2.16) uma diferença importante entre o modelo BGK e os demais (apesar de que em todos os modelos a frequência de colisão das partículas é independente da velocidade) na razão  $\varepsilon_p/\varepsilon_t$ , usada como avaliação para o número de Prandtl [Barichello e Siewert, 2003].

Na Ref. [Barichello e Siewert, 2003] foram determinados os valores exatos de  $\varepsilon_p$  e  $\varepsilon_t$  para a equação linearizada de Boltzmann calculados a partir das equações de Chapman-Enskog para viscosidade e condutividade térmica [Pekeris e Alterman, 1957; Loyalka e Hickey, 1989]. Os resultados são

$$\varepsilon_p = 0.449027806... \quad \text{e} \quad \varepsilon_t = 0.679630049... \quad (2.17)$$

e com isso o número de Prandtl para a ELB é

$$Pr = 0.660694457... , \quad (2.18)$$

que é um valor próximo a 2/3, o qual segundo Cercignani [Cercignani, 1988] é normalmente usado em teoria cinética. Assim, nota-se que os modelos S, Gross-Jackson e MRS possuem o valor de  $Pr$  mais próximo do resultado da ELB do que o modelo BGK.

Algumas das quantidades de interesse físico a serem determinadas nos problemas de interesse já mencionados são as perturbações de densidade e temperatura, e também os fluxos de massa e de calor do gás, definidas em termos da função de distribuição. Assim, seguindo Williams [Williams, 2001] substitui-se a Eq. (2.5) nas Eqs. (1.5) a (1.8) e encontra-se para as perturbações de densidade e de temperatura, em termos agora de  $h$ ,

$$\Delta N(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} h(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z \quad (2.19)$$

e

$$\Delta T(\tau) = \frac{2}{3} \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 3/2) h(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z, \quad (2.20)$$

para o fluxo mássico

$$U_x(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} h(\tau, \mathbf{c}) c_x dc_x dc_y dc_z \quad (2.21)$$

e para o fluxo de calor

$$Q_x(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 5/2) h(\tau, \mathbf{c}) c_x dc_x dc_y dc_z. \quad (2.22)$$

Nota-se que multiplicando a Eq. (2.7) por  $c^k e^{-c^2}$ , para  $k = 0, 2$ , e integrando a equação resultante para todo  $c_x$ ,  $c_y$  e  $c_z$ , obtém-se

$$\frac{d}{d\tau} U_x(\tau) = 0 \quad (2.23)$$

e

$$\frac{d}{d\tau} Q_x(\tau) = 0, \quad (2.24)$$

ou seja, o fluxo mássico e o fluxo de calor independem da variável espacial [Siewert, 2003a] e são representados a partir daqui apenas como  $U$  e  $Q$ , respectivamente.

### 2.2.1 O Problema do Reverso de Temperatura

Para completar a formulação matemática é necessário definir condições de contorno apropriadas para o problema em canal, aqui chamado de reverso de temperatura. Seguindo Aoki e Masukawa [Aoki e Masukawa, 1994], o estado do gás em contato com cada uma das interfaces é dado pelas distribuições Maxwellianas nas temperaturas destas interfaces, ou seja, tem-se para  $x = -\bar{a}$  e  $v_x > 0$

$$f_{a-}(\mathbf{v}) = n_{a-} (\lambda_{a-}/\pi)^{3/2} e^{-\lambda_{a-} v^2}, \quad \lambda_{a-} = m/(2kT_{a-}) \quad (2.25)$$

e para  $x = \bar{a}$  e  $v_x < 0$

$$f_{a+}(\mathbf{v}) = n_{a+} (\lambda_{a+}/\pi)^{3/2} e^{-\lambda_{a+} v^2}, \quad \lambda_{a+} = m/(2kT_{a+}). \quad (2.26)$$

Como o problema tratado aqui é de evaporação fraca, ou seja, a diferença entre as temperaturas das interfaces é pequena [Aoki e Masukawa, 1994], considera-se que  $T_{a-} = T_0(1 - \delta)$  e  $T_{a+} = T_0(1 + \delta)$  para um  $\delta$  pequeno e positivo. Assim, linearizando  $f_{a-}$  e  $f_{a+}$  em torno de  $f_0$  dada pela Eq. (2.6) e usando novamente a adimensionalização dada pela Eq. (2.8) encontram-se as condições de contorno para  $c_x > 0$

$$h(-a, c_x, c_y, c_z) = -\rho - (c^2 - 3/2)\delta \quad (2.27)$$

e

$$h(a, -c_x, c_y, c_z) = \rho + (c^2 - 3/2)\delta, \quad (2.28)$$

para todo  $c_y$  e  $c_z$ , onde  $a = \bar{a}/l$ . Ainda é importante salientar que o desvio de temperatura  $\delta$  representa a variação de temperatura entre as interfaces que causa o fenômeno de evaporação/condensação. Seguindo Pao [Pao, 1971a] e usando a Eq. (2.1) reescreve-se as Eqs. (2.27) e (2.28) como

$$h(-a, c_x, c_y, c_z) = -(\hat{\beta} + c^2 - 3/2)\delta \quad (2.29)$$

e

$$h(a, -c_x, c_y, c_z) = (\hat{\beta} + c^2 - 3/2)\delta, \quad (2.30)$$

para  $c_x > 0$  e todo  $c_y$  e  $c_z$ .

Assim, além das quantidades de interesse dadas pelas Eqs. (2.19) a (2.22), neste problema também deseja-se encontrar o valor crítico  $\hat{\beta}_{crit}$  para que ocorra o fenômeno do reverso de temperatura. Dessa forma, segue-se Siewert [Siewert, 2003a] e decompõe-se o problema dado pelas Eqs. (2.7), (2.29) e (2.30) em dois problemas tais que

$$h(\tau, \mathbf{c}) = [(\hat{\beta} - 3/2)h_1(\tau, \mathbf{c}) + h_2(\tau, \mathbf{c})]\delta. \quad (2.31)$$

Aqui  $h_1$  e  $h_2$  satisfazem a Eq. (2.7) com condições de contorno definidas para  $c_x > 0$  como

$$h_1(-a, c_x, c_y, c_z) = -1, \quad (2.32)$$

$$h_1(a, -c_x, c_y, c_z) = 1, \quad (2.33)$$

$$h_2(-a, c_x, c_y, c_z) = -c^2 \quad (2.34)$$

e

$$h_2(a, -c_x, c_y, c_z) = c^2. \quad (2.35)$$

Conforme proposto na decomposição dada pela Eq. (2.31), em termos dos dois problemas encontra-se para as perturbações de densidade e temperatura

$$\Delta N(\tau) = [(\hat{\beta} - 3/2)\Delta N_1(\tau) + \Delta N_2(\tau)]\delta \quad (2.36)$$

e

$$\Delta T(\tau) = [(\hat{\beta} - 3/2)\Delta T_1(\tau) + \Delta T_2(\tau)]\delta, \quad (2.37)$$

onde  $\Delta N_l(\tau)$  e  $\Delta T_l(\tau)$ , para  $l = 1, 2$ , podem ser expressas, respectivamente, na forma dada pelas Eqs. (2.19) e (2.20) com  $h = h_l$ . Da mesma forma o fluxo de massa e o fluxo de calor são expressos por

$$U = [(\hat{\beta} - 3/2)U_1 + U_2]\delta \quad (2.38)$$

e

$$Q = [(\hat{\beta} - 3/2)Q_1 + Q_2]\delta, \quad (2.39)$$

onde  $U_l$  e  $Q_l$ , para  $l = 1, 2$ , são definidos nas Eqs. (2.21) e (2.22) com  $h = h_l$ .

A fim de determinar o valor crítico  $\hat{\beta}_{crit}$  para que o gradiente de temperatura do gás mude de sentido, deriva-se a Eq. (2.37) em relação a  $\tau$ , iguala-se a equação resultante (calculada em  $\tau = 0$ ) a zero e, resolvendo para  $\hat{\beta}$ , encontra-se o valor crítico

$$\beta_T = 3/2 - \Delta T_2'(0)/\Delta T_1'(0), \quad (2.40)$$

tal que, para  $\hat{\beta} > \beta_T$  o gradiente de temperatura do gás estará com sentido oposto à diferença de temperatura imposta pelas interfaces.

Da mesma forma pode-se encontrar o valor crítico  $\hat{\beta}_{crit}$  para que o fluxo de calor do gás mude de sentido no canal. Para isso iguala-se a Eq. (2.39) a zero e, resolvendo para  $\hat{\beta}$ , encontra-se o valor crítico

$$\beta_Q = 3/2 - Q_2/Q_1, \quad (2.41)$$

tal que, para  $\hat{\beta} > \beta_Q$  o fluxo de calor do gás terá o mesmo sentido da diferença de temperatura imposta pelas interfaces. Posteriormente, neste capítulo, são apresentados os resultados encontrados com o método ADO para as quantidades de interesse dadas pelas Eqs. (2.36) a (2.39), e também para os valores críticos de  $\beta_T$  e  $\beta_Q$  dados pelas Eqs. (2.40) e (2.41).

### 2.2.2 O Problema de Evaporação/Condensação em Semi-Espaço

No caso do problema de evaporação fraca de um gás em semi-espaco, complementa-se a formulação matemática do problema dado pela Eq. (2.7) considerando que, no infinito, o estado

do gás é dado pela distribuição Maxwelliana

$$f_{\infty}(\mathbf{v}) = n_{\infty}(\lambda_{\infty}/\pi)^{3/2}e^{-\lambda_{\infty}|\mathbf{v}-\mathbf{u}_{\infty}|^2}, \quad \lambda_{\infty} = m/(2kT_{\infty}). \quad (2.42)$$

Sendo assim, lineariza-se  $f_{\infty}$  em torno de  $f_0$  e de acordo com a Eq. (2.5) obtém-se em termos de  $h$  a condição de contorno para o infinito

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} h(\tau, \mathbf{c}) = \Delta N(\infty) + 2c_x u + (c^2 - 3/2)\Delta T(\infty), \quad (2.43)$$

onde

$$\Delta N(\infty) = \frac{n_{\infty} - n_0}{n_0}, \quad (2.44)$$

$$\Delta T(\infty) = \frac{T_{\infty} - T_0}{T_0} \quad (2.45)$$

e

$$u = u_{\infty}[m/(2kT_0)]^{1/2}. \quad (2.46)$$

É importante salientar que neste problema consideram-se conhecidas somente a temperatura  $T_0$ , a pressão  $p_0$  e a velocidade do gás no infinito  $u_{\infty}$ . A densidade  $n_0$  pode ser determinada através da equação de estado  $p_0 = n_0 k T_0$  e por isso também é conhecida. A temperatura  $T_{\infty}$  e a densidade  $n_{\infty}$  são desconhecidas, mas se relacionam com  $T_0$  e  $n_0$  [Sone et al., 1989a]. Estas relações são evidenciadas nas definições das perturbações de densidade e de temperatura calculadas no infinito, dadas pelas Eqs. (2.44) e (2.45), as quais serão determinadas. Estas quantidades são usadas para calcular os saltos de densidade e de temperatura do gás [Pao, 1971a; Pao, 1971b] conforme é mostrado logo a seguir. Estes saltos são usados para formular condições de contorno em problemas de evaporação no regime contínuo [Sone, 2002].

Em relação à condição de contorno para a interface, em  $x = 0$  tem-se  $f(0, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{v})$  e assim, usando a Eq. (2.5), obtém-se

$$h(0, \mathbf{c}) = 0 \quad (2.47)$$

para  $c_x > 0$  e todo  $c_y$  e  $c_z$ .

Para resolver o problema dado pelas Eqs. (2.7), (2.43) e (2.47), determinar  $\Delta N(\infty)$  e  $\Delta T(\infty)$  e também as quantidades de interesse dadas pelas Eqs. (2.19) a (2.22), segue-se Sone,

Ohwada e Aoki [Sone et al., 1989a] e propõe-se uma decomposição da forma

$$h(\tau, \mathbf{c}) = \Theta_H(\mathbf{c}) + \Theta_K(\tau, \mathbf{c}), \quad (2.48)$$

onde

$$\Theta_H(\mathbf{c}) = \Delta N(\infty) + 2c_x u + (c^2 - 3/2)\Delta T(\infty) \quad (2.49)$$

e  $\Theta_K$  é um termo de correção chamado de “correção da camada de Knudsen”. Substituindo a Eq. (2.48) nas Eqs. (2.7), (2.43) e (2.47) e, notando que  $\Theta_H$  satisfaz a Eq. (2.7), encontra-se que  $\Theta_K$  deve satisfazer a equação íntegro-diferencial

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} \Theta_K(\tau, \mathbf{c}) + \varepsilon \Theta_K(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} \Theta_K(\tau, \mathbf{c}') F(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (2.50)$$

com a condição de contorno para a interface (para  $c_x > 0$ )

$$\Theta_K(0, c_x, c_y, c_z) = -\Delta N(\infty) - 2c_x u - (c^2 - 3/2)\Delta T(\infty), \quad (2.51)$$

e a condição de contorno para o infinito

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Theta_K(\tau, \mathbf{c}) = 0. \quad (2.52)$$

Em termos da definição dada pela Eq. (2.48), as quantidades de interesse são reescritas de forma que a perturbação de densidade é expressa agora como

$$\Delta N(\tau) = \Delta N(\infty) + \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} \Theta_K(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z \quad (2.53)$$

e a perturbação de temperatura

$$\Delta T(\tau) = \Delta T(\infty) + \frac{2}{3} \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 3/2) \Theta_K(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z. \quad (2.54)$$

De acordo com as Eqs. (2.23) e (2.24) os fluxos de massa e de calor independem da variável espacial. Assim, substituindo a Eq. (2.43) nas Eqs. (2.21) e (2.22) encontra-se para o fluxo mássico

$$U = u \quad (2.55)$$

e para o fluxo de calor

$$Q = 0. \quad (2.56)$$

Conforme foi mencionado anteriormente, um dos interesses ao se resolver este problema é determinar os saltos de densidade e temperatura na interface, usualmente associados com as formulações de condições de contorno para o regime contínuo. Seguindo Pao [Pao, 1971a] estas quantidades são definidas em termos das perturbações na interface (Eqs. (2.53) e (2.54))

$$(\delta\rho)_{micro} = -\Delta N(0) \quad (2.57)$$

e

$$(\delta T)_{micro} = -\Delta T(0). \quad (2.58)$$

Pao [Pao, 1971a] também define os chamados “macro” saltos, onde a idéia é usar apenas a parte assintótica das perturbações de densidade e de temperatura para definir os saltos, como é usual na definição do coeficiente de salto de temperatura [Welander, 1954; Pao, 1971b]. Neste caso usando apenas a parte assintótica das Eqs. (2.53) e (2.54) tem-se

$$(\delta\rho)_{macro} = -\Delta N(0)_{asy} = -\Delta N(\infty) \quad (2.59)$$

e

$$(\delta T)_{macro} = -\Delta T(0)_{asy} = -\Delta T(\infty). \quad (2.60)$$

Após definir os problemas que serão resolvidos neste capítulo, bem como as quantidades de interesse a serem calculadas, na próxima seção será introduzida uma notação matricial a fim de simplificar a formulação e resolução dos problemas.

### 2.3 Reformulação

Como as quantidades de interesse a serem calculadas são definidas, de acordo com as Eqs. (2.19) a (2.22), em termos de momentos da função  $h$ , serão construídos problemas mais simples, para estes momentos, que facilitam a resolução do problema original. Assim, seguindo as Refs. [Williams, 2001] e [Scherer, 2005], define-se

$$g_1(\tau, c_x) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \hat{h}(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z \quad (2.61)$$

e

$$g_2(\tau, c_x) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (c_y^2 + c_z^2 - 1) e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \hat{h}(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z. \quad (2.62)$$

Para o problema do reverso de temperatura (seção 2.2.1) considera-se  $\hat{h} = h$  nas Eqs. (2.61) e (2.62), multiplica-se a Eq. (2.7) por

$$\phi_1(c_y, c_z) = \pi^{-1} e^{-(c_y^2 + c_z^2)}, \quad (2.63)$$

e integra-se a equação resultante para todo  $c_y$  e todo  $c_z$ . Fazendo  $c_x = \xi$  obtém-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} g_1(\tau, \xi) + \varepsilon g_1(\tau, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{11}(\xi', \xi) g_1(\tau, \xi') + k_{12}(\xi', \xi) g_2(\tau, \xi')] d\xi', \quad (2.64)$$

onde

$$k_{11}(\xi', \xi) = 1 + 2\xi\xi' + (2/3)(\xi^2 - 1/2)(\xi'^2 - 1/2) + (4/5)\beta\xi\xi'(\xi^2 - 3/2)(\xi'^2 - 3/2) + 2\varpi [(2/3)\xi^2\xi'^2 - (1/3)(\xi^2 + \xi'^2) + 1/6] \quad (2.65)$$

e

$$k_{12}(\xi', \xi) = (2/3)(\xi^2 - 1/2) + (4/5)\beta\xi\xi'(\xi^2 - 3/2) + 2\varpi [1/6 - (1/3)\xi^2]. \quad (2.66)$$

Da mesma forma, multiplica-se a Eq. (2.7) por

$$\phi_2(c_y, c_z) = \pi^{-1}(c_y^2 + c_z^2 - 1)e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \quad (2.67)$$

e integra-se a equação resultante para todo  $c_y$  e todo  $c_z$ . Fazendo  $c_x = \xi$  novamente encontra-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} g_2(\tau, \xi) + \varepsilon g_2(\tau, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{21}(\xi', \xi) g_1(\tau, \xi') + k_{22}(\xi', \xi) g_2(\tau, \xi')] d\xi', \quad (2.68)$$

onde

$$k_{21}(\xi', \xi) = (2/3)(\xi'^2 - 1/2) + (4/5)\beta\xi\xi'(\xi'^2 - 3/2) + 2\varpi [1/6 - (1/3)\xi'^2] \quad (2.69)$$

e

$$k_{22}(\xi', \xi) = 2/3 + (4/5)\beta\xi\xi' + (1/3)\varpi. \quad (2.70)$$

As Eqs. (2.64) e (2.68) podem ser escritas vetorialmente como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (2.71)$$

onde  $\mathbf{G}(\tau, \xi)$  é o vetor  $2 \times 1$  com componentes  $g_1(\tau, \xi)$  e  $g_2(\tau, \xi)$ ,

$$\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \quad (2.72)$$



e as componentes  $k_{ij}(\xi', \xi)$  da matriz de dimensão  $2 \times 2$   $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  são definidas nas Eqs. (2.65), (2.66), (2.69) e (2.70). Naturalmente, as condições de contorno e as quantidades de interesse a serem calculadas devem ser reescritas em termos do problema  $\mathbf{G}$ . Este procedimento será apresentado nas próximas seções para as diferentes situações físicas que deseja-se avaliar.

### 2.3.1 Reverso de Temperatura

Conforme o procedimento mostrado anteriormente, multiplicam-se as Eqs. (2.29) e (2.30) por  $\phi_1(c_y, c_z)$  e  $\phi_2(c_y, c_z)$  e, usando as Eqs. (2.61) e (2.62), as condições de contorno são reescritas para  $\xi > 0$  como

$$\mathbf{G}(-a, \xi) = - \begin{bmatrix} \hat{\beta} + \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \delta \quad (2.73)$$

e

$$\mathbf{G}(a, -\xi) = \begin{bmatrix} \hat{\beta} + \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \delta. \quad (2.74)$$

Entretanto, de acordo com a decomposição dada pela Eq. (2.31), que introduz problemas para  $h_1$  e  $h_2$ , as Eqs. (2.73) e (2.74) não são usadas como condições de contorno para este problema. É conveniente usar o procedimento anterior nas Eqs. (2.32) a (2.35) e com isso obter para  $\xi > 0$  as condições de contorno

$$\mathbf{G}_1(-a, \xi) = - \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.75)$$

$$\mathbf{G}_1(a, -\xi) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.76)$$

$$\mathbf{G}_2(-a, \xi) = - \begin{bmatrix} \xi^2 + 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.77)$$

e

$$\mathbf{G}_2(a, -\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 + 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.78)$$

Em termos das definições dadas pelas Eqs. (2.61) e (2.62) as quantidades de interesse também são expressas na forma vetorial. Dessa forma, a solução do problema  $\mathbf{G}$ , para cada um

dos dois conjuntos de condições de contorno ( $l = 1, 2$ ), é usada para calcular na Eq. (2.36) as perturbações de densidade

$$\Delta N_l(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}_l(\tau, \xi) d\xi, \quad (2.79)$$

na Eq. (2.37) as perturbações de temperatura

$$\Delta T_l(\tau) = \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}_l(\tau, \xi) d\xi, \quad (2.80)$$

os fluxos de massa na Eq. (2.38)

$$U_l = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \xi \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}_l(\tau, \xi) d\xi, \quad (2.81)$$

e na Eq. (2.39) os fluxos de calor

$$Q_l = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \xi \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}_l(\tau, \xi) d\xi, \quad (2.82)$$

onde  $T$  denota a operação de transposição.

### 2.3.2 Evaporação/Condensação em Semi-Espaço

A derivação do problema  $\mathbf{G}$  para resolver o problema de evaporação/condensação em semi-espaco é baseada nas Eqs. (2.50) a (2.52). Assim, considera-se nas Eqs. (2.61) e (2.62) que  $\hat{h} = \Theta_K$ , multiplica-se as Eqs. (2.50) a (2.52) sucessivamente pelas expressões das Eqs. (2.63) e (2.67) e, integrando as equações resultantes sobre todo  $c_y$  e  $c_z$ , encontra-se o problema  $\mathbf{G}$  definido na Eq. (2.71), agora com a condição de contorno para  $\xi > 0$

$$\mathbf{G}(0, \xi) = -N(\infty)\mathbf{\Omega}_1 - 2u\mathbf{\Omega}_2(\xi) - \Delta T(\infty)\mathbf{\Omega}_3(\xi), \quad (2.83)$$

onde

$$\mathbf{\Omega}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{\Omega}_2(\xi) = \begin{bmatrix} \xi \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{\Omega}_3(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.84)$$

Para o infinito tem-se a condição

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{0}. \quad (2.85)$$

Pelas Eqs. (2.53) e (2.54) as perturbações de densidade e de temperatura são calculadas por

$$\Delta N(\tau) = \Delta N(\infty) + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi \quad (2.86)$$

e

$$\Delta T(\tau) = \Delta T(\infty) + \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi. \quad (2.87)$$

Na próxima seção desenvolve-se a solução pelo método ADO [Barichello e Siewert, 1999b], baseada num esquema “half-range” de quadratura, para o problema  $\mathbf{G}$ , que é o mesmo para os problemas do reverso de temperatura e de evaporação/condensação em semi-espaço.

## 2.4 Solução em Ordenadas Discretas

Primeiramente nota-se na Eq. (2.72) que a função  $\psi(\xi)$  é uma função par, ou seja,

$$\psi(\xi) = \psi(-\xi) \quad (2.88)$$

e reescreve-se o termo integral da Eq. (2.71) como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \int_0^{\infty} \psi(\xi') [\mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') + \mathbf{K}(-\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, -\xi')] d\xi'. \quad (2.89)$$

Introduzindo um esquema de quadratura “half-range” no intervalo  $[0, \infty)$  pode-se aproximar o termo integral da equação acima da forma

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \xi) \mathbf{G}(\tau, -\xi_k)]. \quad (2.90)$$

Aqui  $\xi_k$  e  $w_k$  são, respectivamente, os  $N$  pontos e pesos do esquema (arbitrário) de quadratura. Calculando a Eq. (2.90) em  $\xi = \pm \xi_i$ , para  $i = 1, \dots, N$ , obtém-se versão em ordenadas discretas da Eq. (2.90)

$$\pm \xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) = \varepsilon \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{G}(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{G}(\tau, -\xi_k)], \quad (2.91)$$

para a qual procura-se soluções da forma

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \Phi(\nu, \xi) e^{-\varepsilon \tau / \nu}, \quad (2.92)$$

onde

$$\mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \begin{bmatrix} \Phi_1(\nu, \xi) \\ \Phi_2(\nu, \xi) \end{bmatrix}. \quad (2.93)$$

Assim, substituindo a Eq. (2.92) na Eq. (2.91) obtém-se, para  $i = 1, \dots, N$ ,

$$(1 \mp \xi_i/\nu) \mathbf{\Phi}(\nu, \pm \xi_i) = \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{\Phi}(\nu, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{\Phi}(\nu, -\xi_k)] \quad (2.94)$$

e pode-se escrever a Eq. (2.94) na forma matricial

$$(\mathbf{I} - \mathbf{M}\nu^{-1}) \mathbf{\Phi}_+(\nu) = \mathbf{W}(+, +) \mathbf{\Phi}_+(\nu) + \mathbf{W}(-, +) \mathbf{\Phi}_-(\nu) \quad (2.95)$$

e

$$(\mathbf{I} + \mathbf{M}\nu^{-1}) \mathbf{\Phi}_-(\nu) = \mathbf{W}(+, -) \mathbf{\Phi}_+(\nu) + \mathbf{W}(-, -) \mathbf{\Phi}_-(\nu), \quad (2.96)$$

onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade  $2N \times 2N$ ,  $\mathbf{M}$  é a matriz  $2N \times 2N$  definida como

$$\mathbf{M} = \text{diag} \{ \xi_1, \dots, \xi_N, \xi_1, \dots, \xi_N \} \quad (2.97)$$

e  $\mathbf{\Phi}_\pm(\nu)$  são vetores  $2N \times 1$  dados por

$$\mathbf{\Phi}_\pm(\nu) = \begin{bmatrix} \Phi_1(\nu, \pm \xi_1) & \cdots & \Phi_1(\nu, \pm \xi_N) & \Phi_2(\nu, \pm \xi_1) & \cdots & \Phi_2(\nu, \pm \xi_N) \end{bmatrix}^T. \quad (2.98)$$

Continuando,  $\mathbf{W}(\pm, \pm)$  são as matrizes  $2N \times 2N$

$$\mathbf{W}(\pm, \pm) = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{11}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{12}(\pm, \pm) \\ \mathbf{W}_{21}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{22}(\pm, \pm) \end{bmatrix} \quad (2.99)$$

com componentes que são submatrizes  $N \times N$  dadas por

$$[\mathbf{W}_{mn}(\pm, \pm)]_{i,j} = w_j \psi(\xi_j) k_{mn}(\pm \xi_j, \pm \xi_i), \quad (2.100)$$

para  $m, n = 1, 2$  e  $i, j = 1, \dots, N$ .

Nota-se pelas Eqs. (2.65), (2.66), (2.69) e (2.70) que a matriz  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  da Eq. (2.71) é tal que

$$\mathbf{K}(\xi', \xi) = \mathbf{K}(-\xi', -\xi) \quad \text{e} \quad \mathbf{K}(-\xi', \xi) = \mathbf{K}(\xi', -\xi). \quad (2.101)$$

Novamente pelas Eqs. (2.65), (2.66), (2.69) e (2.70) é possível ver na Eq. (2.100) que

$$\mathbf{W}(+, +) = \mathbf{W}(-, -) \quad \text{e} \quad \mathbf{W}(+, -) = \mathbf{W}(-, +). \quad (2.102)$$

Assim, define-se as matrizes

$$\mathbf{W}_+ = \mathbf{W}(+, +) = \mathbf{W}(-, -) \quad \text{e} \quad \mathbf{W}_- = \mathbf{W}(+, -) = \mathbf{W}(-, +) \quad (2.103)$$

e reescreve-se as Eqs. (2.95) e (2.96) como

$$(\mathbf{I} - \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_+(\nu) = \mathbf{W}_+ \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}_- \Phi_-(\nu) \quad (2.104)$$

e

$$(\mathbf{I} + \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_-(\nu) = \mathbf{W}_- \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}_+ \Phi_-(\nu). \quad (2.105)$$

Definindo

$$\mathbf{U} = \Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu), \quad (2.106)$$

onde  $\Phi_+(\nu)$  e  $\Phi_-(\nu)$  são os vetores  $2N \times 1$  dados pela Eq. (2.98), pode-se somar e subtrair as Eqs. (2.104) e (2.105) de modo a obter o problema de autovalor

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \lambda\mathbf{X}. \quad (2.107)$$

Aqui,  $\mathbf{A}$  é a matriz  $2N \times 2N$

$$\mathbf{A} = (\mathbf{W}_+ - \mathbf{W}_- - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{W}_+ + \mathbf{W}_- - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}, \quad (2.108)$$

$\mathbf{X}$  é o vetor  $2N \times 1$

$$\mathbf{X} = \mathbf{M}\mathbf{U}, \quad (2.109)$$

onde  $\mathbf{M}$  é a matriz dada pela Eq. (2.97) e os autovalores se relacionam com as constantes de separação como

$$\lambda = \nu^{-2}. \quad (2.110)$$

Assim, usa-se os  $2N$  autovalores (constantes de separação  $\nu_j$ ) e os  $2N$  autovetores  $\mathbf{X}(\nu_j)$  obtidos na Eq. (2.107) para expressar as soluções elementares  $\Phi_{\pm}(\nu_j)$  na forma

$$\Phi_+(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1} [\mathbf{I} - \nu_j(\mathbf{W}_+ + \mathbf{W}_- - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}] \mathbf{X}(\nu_j) \quad (2.111)$$

e

$$\Phi_-(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1} [\mathbf{I} + \nu_j(\mathbf{W}_+ + \mathbf{W}_- - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}] \mathbf{X}(\nu_j), \quad (2.112)$$

onde os vetores  $\Phi_+(\nu_j)$  correspondem a  $\Phi(\nu_j, \xi_i)$ , dados na Eq. (2.93), para  $i = 1, \dots, N$ . Analogamente  $\Phi_-(\nu_j)$  correspondem a  $\Phi(\nu_j, -\xi_i)$ .

Neste momento pode-se escrever a solução geral em ordenadas discretas para o problema dado pela Eq. (2.91) como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{2N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}]. \quad (2.113)$$

É importante enfatizar que, exceto pelas expressões que definem as componentes do núcleo de espalhamento - Eqs. (2.65), (2.66), (2.69) e (2.70) - que são entradas da matriz escrita nas Eqs. (2.99) e (2.100), o problema de autovalor encontrado aqui, na Eq. (2.107), é exatamente o mesmo obtido quando a solução em ordenadas discretas foi desenvolvida para os problemas de escoamento na Ref. [Scherer et al., 2009a]. As expressões para as soluções elementares dadas nas Eqs. (2.111) e (2.112) também são as mesmas. Isso é um bom aspecto da solução ADO, pois parte da estrutura do programa usado para obter os resultados numéricos dos problemas tratados na Ref. [Scherer et al., 2009a] pode ser aproveitada aqui. Da mesma forma, a solução desenvolvida para o problema  $\mathbf{G}$  nesta seção é exatamente como no caso dos problemas de transferência de calor e do salto de temperatura tratados na Ref. [Scherer et al., 2009b], exceto pelas condições de contorno. Esse aspecto é particularmente importante, tendo em vista o caráter analítico da solução, pois permite que uma classe de problemas possa ser resolvida com uma mesma metodologia. Ainda, é importante salientar que o desenvolvimento da solução construída aqui resulta em um problema de autovalor bem mais simples que o encontrado na Ref. [Knackfuss e Barichello, 2006], onde o problema do salto de temperatura foi resolvido com o modelo S.

Continuando, como estes problemas são conservativos, de acordo com Case e Zweifel [Case e Zweifel, 1967] alguns autovalores se aproximam de zero (constantes de separação tendem ao infinito) quando  $N$  tende ao infinito. Para estes dois problemas específicos resolvidos neste capítulo encontra-se dois autovalores com este comportamento. Por esse motivo deve-se acrescentar quatro soluções exatas da Eq. (2.71) à Eq. (2.113) e reescrever a solução geral em ordenadas discretas da forma

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \mathbf{G}^*(\tau, \pm\xi_i) + \sum_{j=3}^{2N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}], \quad (2.114)$$

onde

$$\mathbf{G}^*(\tau, \xi) = A_1 \mathbf{G}_1^* + A_2 \mathbf{G}_2^*(\xi) + B_1 \mathbf{G}_3^*(\xi) + B_2 \mathbf{G}_4^*(\tau, \xi). \quad (2.115)$$

Para o problema de evaporação/condensação em semi-espaço, aplica-se  $a = 0$  na Eq. (2.114). Como até este ponto a solução em ordenadas discretas construída aqui é igual à do problema de transferência de calor, seguindo as Refs. [Scherer, 2005] e [Scherer et al., 2009b] as soluções exatas são

$$\mathbf{G}_1^* = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_2^*(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_3^*(\xi) = \begin{bmatrix} \xi \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.116)$$

e

$$\mathbf{G}_4^*(\tau, \xi) = \tau \mathbf{H}(\xi) + \mathbf{F}(\xi), \quad (2.117)$$

onde

$$\mathbf{H}(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.118)$$

e  $\mathbf{F}(\xi)$  é uma função a ser determinada para que se conheça a função  $\mathbf{G}_4^*(\tau, \xi)$ . Seguindo as Refs. [Siewert, 2005], [Knackfuss e Barichello, 2006] e [Scherer, 2005], substitui-se a Eq. (2.117) na Eq. (2.71) obtendo-se

$$\mathbf{F}(\xi) = -(\xi/\varepsilon)\mathbf{H}(\xi) + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{F}(\xi') d\xi'. \quad (2.119)$$

A função  $\mathbf{F}(\xi)$  pode ser expressa como

$$\mathbf{F}(\xi) = \sum_{\alpha=0}^3 P_\alpha(\xi) \mathbf{F}_\alpha, \quad (2.120)$$

onde

$$P_0(\xi) = 1, \quad P_1(\xi) = \xi, \quad P_2(\xi) = \xi^2 - 1/2 \quad \text{e} \quad P_3(\xi) = \xi (\xi^2 - 3/2). \quad (2.121)$$

Assim, substituindo a Eq. (2.120) na Eq. (2.119) encontra-se

$$\sum_{\alpha=0}^3 P_\alpha(\xi) \mathbf{F}_\alpha = -(\xi/\varepsilon)\mathbf{H}(\xi) + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \sum_{\alpha=0}^3 P_\alpha(\xi') \mathbf{F}_\alpha d\xi'. \quad (2.122)$$

Multiplicando a Eq. (2.122) por  $\psi(\xi) P_k(\xi)$ , para  $k = 0, 1, 2, 3$ , e integrando a equação resultante

para todo  $\xi$  obtém-se o sistema linear  $8 \times 8$

$$\sum_{\alpha=0}^3 \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \psi(\xi) P_{\alpha}(\xi') P_k(\xi) \mathbf{K}(\xi', \xi) d\xi' d\xi - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) P_k(\xi) P_{\alpha}(\xi) \mathbf{Id} \xi \right] \mathbf{F}_{\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} (\xi/\varepsilon) \psi(\xi) P_k(\xi) \mathbf{H}(\xi) d\xi, \quad (2.123)$$

para  $k = 0, 1, 2, 3$ , o qual pode ser resolvido analiticamente para encontrar as componentes dos vetores  $\mathbf{F}_{\alpha}$ . Resolvendo-se este sistema linear encontra-se

$$\mathbf{F}(\xi) = \frac{\xi}{\varepsilon(\beta - 1)} \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.124)$$

É importante ressaltar que o procedimento usado aqui para encontrar a solução exata  $\mathbf{G}_4^*(\tau, \xi)$  é uma particularização, para o caso de uma espécie de gás, do método utilizado na Ref. [Siewert, 2005] para o problema do salto de temperatura com o modelo McCormack para mistura de dois gases.

O próximo passo é determinar os  $4N$  coeficientes  $A_j$  e  $B_j$ ,  $j = 1, \dots, 2N$ , para cada um dos dois problemas, a fim de determinar as quantidades de interesse.

## 2.5 Quantidades de Interesse

### 2.5.1 Reverso de Temperatura

Devido à decomposição proposta na Eq. (2.31), é necessário que se resolva de fato dois problemas. Assim, considera-se a versão em ordenadas discretas das condições de contorno dadas pelas Eqs. (2.75) a (2.78)

$$\mathbf{G}_1(-a, \xi_i) = - \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.125)$$

$$\mathbf{G}_1(a, -\xi_i) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.126)$$

$$\mathbf{G}_2(-a, \xi_i) = - \begin{bmatrix} \xi_i^2 + 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.127)$$



e

$$\mathbf{G}_2(a, -\xi_i) = \begin{bmatrix} \xi_i^2 + 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (2.128)$$

onde aplica-se a solução geral em ordenadas discretas dada pela Eq. (2.114). Em cada um dos dois problemas ( $l = 1, 2$ ) obtém-se um sistema linear  $4N \times 4N$  onde as  $2N$  primeiras equações são (notando as Eqs. (2.116) e (2.117))

$$A_1^l \mathbf{G}_1^* + A_2^l \mathbf{G}_2^*(\xi_i) + B_1^l \mathbf{G}_3^*(\xi_i) + B_2^l \mathbf{G}_4^*(-a, \xi_i) + \sum_{j=3}^{2N} [A_j^l \Phi(\nu_j, \xi_i) + B_j^l \Phi(\nu_j, -\xi_i) e^{-2a\varepsilon/\nu_j}] = \mathbf{G}_l(-a, \xi_i), \quad (2.129)$$

para  $i = 1, \dots, N$ , e as  $2N$  últimas equações são

$$A_1^l \mathbf{G}_1^* + A_2^l \mathbf{G}_2^*(\xi_i) + B_1^l \mathbf{G}_3^*(-\xi_i) + B_2^l \mathbf{G}_4^*(a, -\xi_i) + \sum_{j=3}^{2N} [A_j^l \Phi(\nu_j, -\xi_i) e^{-2a\varepsilon/\nu_j} + B_j^l \Phi(\nu_j, \xi_i)] = \mathbf{G}_l(a, -\xi_i), \quad (2.130)$$

para  $i = 1, \dots, N$  e  $l = 1, 2$ , onde  $\mathbf{G}_l(-a, \xi_i)$  e  $\mathbf{G}_l(a, -\xi_i)$  são dadas pelas Eqs. (2.125) a (2.128) e  $\Phi(\nu_j, \pm\xi_i)$  estão definidos nas Eqs. (2.111) e (2.112).

Resolvendo estes sistemas lineares a solução em ordenadas discretas dos dois problemas definidos na Eq. (2.71) com condições de contorno dadas, respectivamente, pelas Eqs. (2.75) a (2.78) está agora completamente estabelecida. Assim, aplica-se a Eq. (2.114) nas Eqs. (2.79) e (2.80) para obter as perturbações de densidade

$$\Delta N_l(\tau) = A_1^l - B_2^l \tau + \sum_{j=3}^{2N} [A_j^l e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j^l e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{V}(\nu_j) \quad (2.131)$$

e as perturbações de temperatura

$$\Delta T_l(\tau) = A_2^l + B_2^l \tau + \frac{2}{3} \sum_{j=3}^{2N} [A_j^l e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j^l e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{Y}(\nu_j), \quad (2.132)$$

onde

$$\mathbf{V}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (2.133)$$

e

$$\mathbf{Y}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} \xi_k^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (2.134)$$

Continuando, pelas Eqs. (2.81) e (2.82) encontra-se, respectivamente, para os fluxos de massa e de calor

$$U_l = \frac{B_1^l}{2} \quad (2.135)$$

e

$$Q_l = \frac{5}{4\varepsilon(\beta - 1)} B_2^l. \quad (2.136)$$

Nota-se que a Eq. (2.132) pode ser usada para calcular o valor de  $\beta_T$  na Eq. (2.40), pois

$$\Delta T_l'(0) = B_2^l - \frac{2\varepsilon}{3} \sum_{j=3}^{2N} (A_j^l - B_j^l) \frac{e^{-\varepsilon a/\nu_j}}{\nu_j} \mathbf{Y}(\nu_j). \quad (2.137)$$

Assim, substituindo a Eq. (2.137) na Eq. (2.40) encontra-se  $\beta_T$ . Da mesma forma, substituindo a Eq. (2.136) na Eq. (2.41) encontra-se  $\beta_Q$ .

### 2.5.2 Evaporação/Condensação em Semi-Espaço

Devido ao comportamento imposto no infinito dado pela Eq. (2.85), a solução geral em ordenadas discretas (Eq. (2.114)) é reescrita para este problema como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=3}^{2N} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon\tau/\nu_j}. \quad (2.138)$$

Por outro lado, a versão em ordenadas discretas da condição de contorno para a interface (Eq. (2.83)) é dada por

$$\mathbf{G}(0, \xi_i) = -\Delta N(\infty)\mathbf{\Omega}_1 - 2u\mathbf{\Omega}_2(\xi_i) - \Delta T(\infty)\mathbf{\Omega}_3(\xi_i). \quad (2.139)$$

Assim, substitui-se a Eq. (2.138) na Eq. (2.139) e obtém-se um sistema linear  $2N \times 2N$  para  $A_j$ ,  $j = 3, \dots, 2N$ ,  $\Delta N(\infty)$  e  $\Delta T(\infty)$ . Cada duas linhas deste sistema são escritas como

$$\sum_{j=3}^{2N} A_j \Phi(\nu_j, \xi_i) + \Delta N(\infty)\mathbf{\Omega}_1 + \Delta T(\infty)\mathbf{\Omega}_3(\xi_i) = -2u\mathbf{\Omega}_2(\xi_i), \quad (2.140)$$

para  $i = 1, \dots, N$ .

Resolvendo-se este sistema linear pode-se usar a Eq. (2.138) para calcular, de acordo

com as Eq. (2.86) e (2.87), as perturbações de densidade e de temperatura

$$\Delta N(\tau) = \Delta N(\infty) + \sum_{j=3}^{2N} A_j e^{-\varepsilon\tau/\nu_j} \mathbf{V}(\nu_j) \quad (2.141)$$

e

$$\Delta T(\tau) = \Delta T(\infty) + \frac{2}{3} \sum_{j=3}^{2N} A_j e^{-\varepsilon\tau/\nu_j} \mathbf{Y}(\nu_j), \quad (2.142)$$

onde  $\mathbf{V}(\nu_j)$  e  $\mathbf{Y}(\nu_j)$  são dados pelas Eqs. (2.133) e (2.134). Observa-se que os “macro” saltos na interface, conforme definidos nas Eqs. (2.59) e (2.60), são dados pelos primeiros termos nas Eqs. (2.141) e (2.142).

## 2.6 Aspectos Computacionais e Resultados Numéricos

Para iniciar a implementação computacional da solução ADO, o primeiro passo é definir o esquema de quadratura. Assim, conforme vem sendo utilizado em muitos outros trabalhos, usa-se aqui um esquema *half-range* para o intervalo  $[0, \infty)$ . Seguindo as Refs. [Barichello et al., 2001], [Scherer et al., 2009a] e [Scherer et al., 2009b], utiliza-se a transformação não linear

$$u(\xi) = e^{-\xi} \quad (2.143)$$

para mapear o intervalo  $[0, \infty)$  no intervalo  $[0, 1]$ , onde usa-se a quadratura de Gauss-Legendre com a mudança de variáveis

$$v(u) = 2u - 1. \quad (2.144)$$

É importante salientar que outros mapeamentos como

$$u(\xi) = \frac{1}{1 + \xi} \quad (2.145)$$

também podem ser usados para mapear o intervalo  $[0, \infty)$  no intervalo  $[0, 1]$  [Barichello et al., 2001]. Assim, uma vez especificados os  $N$  pontos  $\xi_k$  e pesos  $w_k$ , a solução é rápida e fácil de implementar. As etapas desta implementação são as seguintes:

- resolver o problema de autovalor dado pela Eq. (2.107) para obter as constantes de separação  $\nu_j$  e as soluções elementares  $\Phi_{\pm}(\nu_j)$ ;
- resolver os sistemas lineares dados pelas Eqs. (2.129) e (2.130), para o problema em canal, e também o sistema dado pela Eq. (2.140) para o problema em semi-espço;

- calcular as perturbações de densidade e de temperatura dadas pelas Eqs. (2.131), (2.132), (2.141) e (2.142), bem como os micro saltos (Eqs. (2.57) e (2.58)) e os fluxos de massa e de calor (Eqs. (2.135) e (2.136)). Ainda, com a solução do sistema linear dado na Eq. (2.140) obtém-se os macro saltos de densidade e de temperatura (Eqs. (2.59) e (2.60)).

Os resultados numéricos mostrados aqui foram obtidos em FORTRAN usando  $N = 80$  pontos de quadratura. Todos os dígitos mostrados aqui são preservados (com a tolerância de mais ou menos 1 no último dígito) variando-se  $N$  até 200. O tempo computacional para resolver o problema em canal ou o problema em semi-espço e obter os resultados das quantidades de interesse, usando um dos modelos cinéticos, é de 15 segundos. Este tempo é igual para os dois problemas. Foi usado um PC com processador Pentium IV de 2.66 GHz, memória RAM de 1.5 Gbytes e não se fez nenhuma otimização no programa. Embora não se tenha feito um estudo rigoroso do programa, pode-se ter noção do número de operações envolvidas pelos passos básicos de implementação mencionados anteriormente, que são: resolver problemas de autovalor, resolver sistemas lineares e calcular somatórios.

Alguns parâmetros precisam ser definidos como, por exemplo, os utilizados nas Eqs. (2.10) a (2.12) para estabelecer o modelo cinético. Para o caso do  $\varepsilon$ , diferentes valores são assumidos de acordo com um modelo cinético específico [Barichello e Siewert, 2003] e dependem do livre caminho médio ser baseado na viscosidade ( $\varepsilon_p$ ) ou na condutividade térmica ( $\varepsilon_t$ ). Estes valores são listados nas Eqs. (2.13) a (2.16).

Para ter confiabilidade no programa elaborado e comparar resultados numéricos, inicialmente foram resolvidos casos onde já haviam resultados na literatura. De fato, os resultados para o problema de semi-espço com o modelo BGK, previamente conhecidos na Ref. [Siewert e Thomas, 1973], foram obtidos (com concordância em todos os dígitos listados naquela referência) na formulação apresentada neste capítulo mediante a escolha dos parâmetros da Eq. (2.13).

Para o problema do reverso de temperatura não foi possível checar cuidadosamente os resultados, pois na Ref. [Thomas et al., 1974] há apenas gráficos e um único resultado para  $\beta_T$ , o qual foi obtido na formulação desenvolvida aqui. Continuando, foram gerados resultados para os outros modelos cinéticos, mostrados nas Tabelas 2.1 a 2.10, para o problema do reverso de temperatura, que foram comparados com os resultados obtidos com a equação linearizada de Boltzmann (ELB) e o método ADO [Siewert, 2003a]. De fato, para obtenção dos resultados com a ELB uma expansão polinomial para a variável velocidade é usada de modo que um problema auxiliar é resolvido com o método ADO. Nesta expansão são utilizados nove termos para aproximar o termo original de espalhamento [Pekeris e Alterman, 1957]. Neste problema

nota-se melhor concordância entre os resultados dos modelos cinéticos para as perturbações de temperatura do que para as perturbações de densidade. Entretanto, aqui foi encontrado no máximo um dígito significativo de concordância entre os resultados dos modelos cinéticos e os da ELB, o que é o pior caso se comparado com os problemas estudados nas Refs. [Scherer et al., 2009a] e [Scherer et al., 2009b]. Para os valores críticos de  $\beta_Q$  os resultados dos diferentes modelos concordam muito bem. O mesmo não pode ser dito para  $\beta_T$ . Em ambos os casos os resultados apresentam no máximo dois dígitos significativos de concordância com a ELB, conforme é mostrado nas Tabelas 2.9 e 2.10. Continuando, não é possível identificar qual modelo cinético produz melhores resultados se comparados com a ELB. Por isso, nas Tabelas 2.1 a 2.10 o resultado mais próximo à ELB (considerando  $\varepsilon_t$ ) está destacado em negrito.

Nas Figuras 2.6 e 2.7 foram escolhidos alguns casos, baseados nos resultados listados nas tabelas, para indicar o fenômeno do reverso de temperatura. Observa-se na Figura 2.6 que para  $\hat{\beta} = 2.0$  e  $\hat{\beta} = 4.0$  (que são menores que o valor crítico  $\beta_T = 4.560345$ ) as perturbações de temperatura  $\Delta T(\tau)$  são crescentes e, por isso, os gradientes de temperatura  $\Delta T'(\tau)$  são positivos indicando que o gás próximo à interface fria (em  $\tau = -1$ ) possui temperatura menor que o gás próximo à interface quente (em  $\tau = 1$ ). Da mesma forma, observa-se que para  $\hat{\beta} = 5.0$  e  $\hat{\beta} = 7.0$  (que são maiores que o valor crítico de  $\beta_T$ ) as perturbações de temperatura  $\Delta T(\tau)$  são decrescentes e, conseqüentemente, os gradientes de temperatura  $\Delta T'(\tau)$  são negativos indicando que o gás próximo à interface fria (em  $\tau = -1$ ) possui temperatura maior que o gás próximo à interface quente (em  $\tau = 1$ ), observando-se assim o fenômeno do reverso de temperatura, pois o gradiente de temperatura do gás possui sentido contrário à diferença de temperatura imposta pelas interfaces. Na Figura 2.7 observa-se que para  $\hat{\beta} = 1.0$  e  $\hat{\beta} = 3.0$  (que são menores que os valores críticos de  $\beta_Q$  mostrados na Tabela 2.10) os fluxos de calor são negativos mostrando que a temperatura do gás próximo à interface quente (em  $\tau = 1$ ) é maior que a temperatura do gás próximo à interface fria (em  $\tau = -1$ ). Para  $\hat{\beta} = 4.0$  e  $\hat{\beta} = 6.0$  (que são maiores que os valores críticos de  $\beta_Q$  mostrados na Tabela 2.10) os fluxos de calor são positivos indicando que a temperatura do gás próximo à interface fria (em  $\tau = -1$ ) é maior que a temperatura do gás próximo à interface quente (em  $\tau = 1$ ) observando-se assim o fenômeno do reverso de temperatura, pois neste caso o fluxo de calor do gás possui o mesmo sentido da diferença de temperatura imposta pelas interfaces.

Em relação ao problema em semi-espço, os resultados originais das perturbações de densidade e de temperatura para os modelos S, Gross-Jackson e MRS são listados nas Tabelas 2.11 e 2.12 e comparados com os resultados da ELB encontrados por Siewert [Siewert, 2003a].

Neste caso os resultados apresentam um ou dois dígitos significativos de concordância com os da ELB. Resultados para os saltos microscópicos e macroscópicos de densidade e temperatura são mostrados na Tabela 2.13. Nesta tabela os resultados dos modelos cinéticos também são comparados com os resultados da ELB encontrados por Sone, Ohwada e Aoki [Sone et al., 1989a] utilizando um esquema de diferenças finitas. Novamente não é possível identificar qual modelo cinético produz melhores resultados se comparados com a ELB. Por isso, nas Tabelas 2.11 a 2.13 o resultado mais próximo à ELB (considerando  $\varepsilon_t$ ) também está destacado em negrito. Continuando, analisando a formulação do problema de semi-espaço mostrada neste capítulo pode-se observar que todos os resultados numéricos dependem linearmente de  $u$ .

Também foi possível estabelecer comparações entre os resultados das perturbações de densidade e de temperatura encontrados aqui com os modelos cinéticos e os obtidos com a ELB por Sone, Ohwada e Aoki [Sone et al., 1989a]. Neste caso, nas Figuras 2.8 e 2.9 são mostrados resultados definidos nesta referência como as variações de densidade

$$\Omega(\tau) = \sum_{j=3}^{2N} A_j e^{-\varepsilon\tau/\nu_j} \mathbf{V}(\nu_j) \quad (2.146)$$

e de temperatura

$$\Theta(\tau) = \frac{2}{3} \sum_{j=3}^{2N} A_j e^{-\varepsilon\tau/\nu_j} \mathbf{Y}(\nu_j) \quad (2.147)$$

na região de semi-espaço, chamada de “Camada de Knudsen”. Aqui  $\mathbf{V}(\nu_j)$  e  $\mathbf{Y}(\nu_j)$  são definidos nas Eqs. (2.133) e (2.134). Analisando as Figuras 2.8 e 2.9 observa-se maior concordância entre os resultados do modelo MRS e da ELB para a variação de temperatura do que para a variação de densidade. Para que a mesma adimensionalização da variável espacial utilizada na Ref. [Sone et al., 1989a] fosse usada aqui foi necessário usar  $\varepsilon = 1/\sqrt{8}$  na formulação do problema.

Neste capítulo a solução em ordenadas discretas para os problemas do reverso de temperatura e de evaporação/condensação em semi-espaço foi construída de forma unificada com os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS. Assim, foi possível gerar os novos resultados para os modelos S, Gross-Jackson e MRS e fazer uma análise comparativa com os resultados para a ELB encontrados em outras referências. O estudo realizado neste capítulo encontra-se também na Ref. [Scherer e Barichello, 2008], a qual está submetida à publicação. No próximo capítulo os problemas do reverso de temperatura e de evaporação/condensação em semi-espaço são abordados com o modelo McCormack para mistura de dois gases.

Tabela 2.1 – Reverso de Temperatura: Perturbação de Densidade

$\Delta N_1(\tau)$  com  $2a = 2.0$

$\tau$	BGK		S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	1.833633(-2)	1.662968(-2)	<b>1.617744(-2)</b>	1.574980(-2)	1.503394(-2)	1.719314(-2)	1.759507(-2)	1.6599(-2)	
0.2	3.694141(-2)	3.353659(-2)	<b>3.264195(-2)</b>	3.180538(-2)	3.036959(-2)	3.459315(-2)	3.542081(-2)	3.3490(-2)	
0.3	5.611107(-2)	5.102588(-2)	<b>4.971406(-2)</b>	4.850515(-2)	4.634663(-2)	5.242581(-2)	5.373186(-2)	5.1000(-2)	
0.4	7.620241(-2)	6.946581(-2)	<b>6.779054(-2)</b>	6.626167(-2)	6.339169(-2)	7.095947(-2)	7.283718(-2)	6.9529(-2)	
0.5	9.768643(-2)	8.934201(-2)	<b>8.741143(-2)</b>	8.562609(-2)	8.209568(-2)	9.054078(-2)	9.314664(-2)	8.9622(-2)	
0.6	1.212424(-1)	1.113548(-1)	<b>1.093827(-1)</b>	1.074055(-1)	1.033573(-1)	1.116576(-1)	1.152545(-1)	1.1208(-1)	
0.7	1.479560(-1)	1.366230(-1)	1.350377(-1)	1.329119(-1)	1.286937(-1)	1.350679(-1)	<b>1.401137(-1)</b>	1.3824(-1)	
0.8	1.798193(-1)	1.672002(-1)	1.669124(-1)	1.646034(-1)	1.610554(-1)	1.621180(-1)	<b>1.694718(-1)</b>	1.7061(-1)	
0.9	2.214825(-1)	2.078792(-1)	<b>2.111553(-1)</b>	2.083737(-1)	2.078076(-1)	1.958199(-1)	2.073738(-1)	2.1534(-1)	
1.0	2.991500(-1)	2.856797(-1)	<b>3.045663(-1)</b>	2.994505(-1)	3.161319(-1)	2.517598(-1)	2.757077(-1)	3.1031(-1)	

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]

Tabela 2.2 – Reverso de Temperatura: Perturbação de Densidade

$$\Delta N_2(\tau) \text{ com } 2a = 2.0$$

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	-9.794921(-3)	-5.913636(-3)	-1.343541(-2)	-5.923578(-3)	-1.400434(-2)	-6.670583(-3)	<b>-1.299155(-2)</b>	-1.2010(-2)
0.2	-1.913849(-2)	-1.139522(-2)	-2.639854(-2)	-1.137868(-2)	-2.751205(-2)	-1.300211(-2)	<b>-2.558828(-2)</b>	-2.3504(-2)
0.3	-2.753310(-2)	-1.596829(-2)	-3.835985(-2)	-1.584702(-2)	-3.996343(-2)	-1.862339(-2)	<b>-3.735190(-2)</b>	-3.3908(-2)
0.4	-3.437635(-2)	-1.905588(-2)	-4.865930(-2)	-1.869713(-2)	-5.065453(-2)	-2.309087(-2)	<b>-4.774559(-2)</b>	-4.2509(-2)
0.5	-3.887125(-2)	-1.989426(-2)	-5.639154(-2)	-1.908619(-2)	-5.860914(-2)	-2.582796(-2)	<b>-5.604918(-2)</b>	-4.8346(-2)
0.6	<b>-3.986486(-2)</b>	-1.737823(-2)	-6.019557(-2)	-1.578161(-2)	-6.234170(-2)	-2.601812(-2)	-6.120688(-2)	-4.9982(-2)
0.7	<b>-3.551129(-2)</b>	-9.737800(-3)	-5.780653(-2)	-6.783132(-3)	-5.934593(-2)	-2.238657(-2)	-6.151008(-2)	-4.5053(-2)
0.8	<b>-2.241888(-2)</b>	6.279631(-3)	-4.489936(-2)	1.164972(-2)	-4.475304(-2)	-1.266228(-2)	-5.380168(-2)	-2.9062(-2)
0.9	<b>7.322147(-3)</b>	3.825885(-2)	-1.097099(-2)	4.846554(-2)	-6.435125(-3)	8.235864(-3)	-3.074618(-2)	8.9304(-3)
1.0	9.803564(-2)	1.286700(-1)	1.065545(-1)	1.569405(-1)	<b>1.329972(-1)</b>	6.636732(-2)	4.715164(-2)	1.3620(-1)

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]



Tabela 2.3 – Reverso de Temperatura: Perturbação de Temperatura

$\Delta T_1(\tau)$  com  $2a = 2.0$

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	<b>-1.051541(-2)</b>	-8.837002(-3)	-1.029009(-2)	-7.952030(-3)	-9.518492(-3)	-1.017891(-2)	-1.176630(-2)	-1.0697(-2)
0.2	<b>-2.105684(-2)</b>	-1.770779(-2)	-2.060329(-2)	-1.593590(-2)	-1.904754(-2)	-2.038220(-2)	-2.355681(-2)	-2.1398(-2)
0.3	<b>-3.165369(-2)</b>	-2.665025(-2)	-3.096624(-2)	-2.398874(-2)	-2.860164(-2)	-3.063619(-2)	-3.539756(-2)	-3.2105(-2)
0.4	<b>-4.234319(-2)</b>	-3.571166(-2)	-4.141378(-2)	-3.215994(-2)	-3.820477(-2)	-4.097170(-2)	-4.731878(-2)	-4.2826(-2)
0.5	<b>-5.317753(-2)</b>	-4.495715(-2)	-5.199687(-2)	-4.052259(-2)	-4.790017(-2)	-5.142786(-2)	-5.935844(-2)	-5.3569(-2)
0.6	<b>-6.423728(-2)</b>	-5.448558(-2)	-6.279785(-2)	-4.919541(-2)	-5.777057(-2)	-6.205910(-2)	-7.156896(-2)	-6.4352(-2)
0.7	<b>-7.566112(-2)</b>	-6.446414(-2)	-7.396547(-2)	-5.839173(-2)	-6.798634(-2)	-7.294997(-2)	-8.403134(-2)	-7.5214(-2)
0.8	-8.772503(-2)	-7.522015(-2)	<b>-8.581183(-2)</b>	-6.855198(-2)	-7.894355(-2)	-8.425336(-2)	-9.689305(-2)	-8.6239(-2)
0.9	-1.011366(-1)	-8.757883(-2)	<b>-9.918734(-2)</b>	-8.084207(-2)	-9.181557(-2)	-9.632784(-2)	-1.105091(-1)	-9.7687(-2)
1.0	-1.205806(-1)	-1.068773(-1)	-1.203598(-1)	-1.033071(-1)	<b>-1.161035(-1)</b>	-1.113072(-1)	-1.272076(-1)	-1.1178(-1)

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]

Tabela 2.4 – Reverso de Temperatura: Perturbação de Temperatura

$\Delta T_2(\tau)$  com  $2a = 2.0$

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	3.008133(-2)	2.626427(-2)	2.914301(-2)	2.685419(-2)	2.916335(-2)	2.423398(-2)	<b>2.785305(-2)</b>	2.7426(-2)
0.2	6.029969(-2)	5.268325(-2)	5.846589(-2)	5.390688(-2)	5.856119(-2)	4.856270(-2)	<b>5.581197(-2)</b>	5.5063(-2)
0.3	9.080177(-2)	7.942289(-2)	8.816287(-2)	8.137056(-2)	8.844650(-2)	7.308831(-2)	<b>8.399196(-2)</b>	8.3140(-2)
0.4	1.217556(-1)	1.066741(-1)	1.184600(-1)	1.094887(-1)	1.191132(-1)	9.792952(-2)	<b>1.125290(-1)</b>	1.1193(-1)
0.5	1.533679(-1)	1.346730(-1)	1.496411(-1)	1.385605(-1)	1.509283(-1)	1.232349(-1)	<b>1.415972(-1)</b>	1.4180(-1)
0.6	1.859119(-1)	1.637344(-1)	1.820905(-1)	1.689818(-1)	1.843856(-1)	1.492062(-1)	<b>1.714383(-1)</b>	1.7324(-1)
0.7	2.197826(-1)	1.943183(-1)	2.163774(-1)	2.013257(-1)	2.202080(-1)	1.761428(-1)	<b>2.024212(-1)</b>	2.0706(-1)
0.8	2.556239(-1)	2.271851(-1)	<b>2.534522(-1)</b>	2.365286(-1)	2.595820(-1)	2.045497(-1)	2.351837(-1)	2.4468(-1)
0.9	<b>2.947240(-1)</b>	2.638906(-1)	2.952606(-1)	2.764782(-1)	3.048752(-1)	2.354826(-1)	2.710894(-1)	2.8942(-1)
1.0	3.423316(-1)	3.111673(-1)	3.498214(-1)	3.290612(-1)	<b>3.651570(-1)</b>	2.736918(-1)	3.162960(-1)	3.5985(-1)

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]

Tabela 2.5 – Reverso de Temperatura: Fluxo Mássico  $U_1$

$a$	BGK	S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	
0.1	-5.423141(-1)	-5.438692(-1)	<b>-5.377129(-1)</b>	-5.390814(-1)	-5.323883(-1)	-5.511720(-1)	-5.463846(-1)	-5.3688(-1)
0.5	-5.112357(-1)	-5.151942(-1)	<b>-5.074229(-1)</b>	-5.101810(-1)	-5.031282(-1)	-5.255155(-1)	-5.170266(-1)	-5.0653(-1)
1.0	-4.975624(-1)	-5.022508(-1)	<b>-4.956528(-1)</b>	-4.985203(-1)	-4.926306(-1)	-5.110226(-1)	-5.030450(-1)	-4.9467(-1)
1.5	-4.909040(-1)	-4.956528(-1)	<b>-4.899511(-1)</b>	-4.926306(-1)	-4.874002(-1)	-5.030450(-1)	-4.960618(-1)	-4.8885(-1)
2.0	-4.869220(-1)	-4.915152(-1)	-4.864350(-1)	-4.888559(-1)	<b>-4.840581(-1)</b>	-4.979681(-1)	-4.918569(-1)	-4.8522(-1)
2.5	-4.842474(-1)	-4.886141(-1)	-4.839922(-1)	-4.861410(-1)	<b>-4.816799(-1)</b>	-4.944468(-1)	-4.890375(-1)	-4.8267(-1)
5.0	-4.779220(-1)	-4.811951(-1)	-4.779085(-1)	-4.789117(-1)	<b>-4.756241(-1)</b>	-4.859414(-1)	-4.824841(-1)	-4.7628(-1)
9.0	-4.744232(-1)	-4.766729(-1)	-4.744230(-1)	-4.743842(-1)	<b>-4.721253(-1)</b>	-4.812252(-1)	-4.789675(-1)	-4.7263(-1)
13.0	-4.729036(-1)	-4.746053(-1)	-4.729036(-1)	-4.723084(-1)	<b>-4.705997(-1)</b>	-4.791494(-1)	-4.774551(-1)	-4.7105(-1)

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]

Tabela 2.6 – Reverso de Temperatura: Fluxo Mássico  $U_2$ 

$a$	BGK		S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.1	-1.117864	-1.114552	-1.111312	-1.107805	<b>-1.103429</b>	-1.124520	-1.123673	-1.1036	
0.5	-1.114933	-1.106021	-1.108136	-1.096812	<b>-1.099467</b>	-1.123803	-1.126109	-1.0991	
1.0	-1.122030	-1.111368	-1.118243	-1.103307	<b>-1.111128</b>	-1.128828	-1.134270	-1.1108	
1.5	-1.129055	-1.118243	-1.127060	-1.111128	<b>-1.120704</b>	-1.134270	-1.141319	-1.1207	
2.0	-1.134826	-1.124371	-1.133772	-1.117829	<b>-1.127741</b>	-1.139140	-1.146919	-1.1279	
2.5	-1.139443	-1.129509	-1.138879	-1.123294	<b>-1.132984</b>	-1.143334	-1.151359	-1.1333	
5.0	-1.152457	-1.145019	-1.152426	-1.139199	<b>-1.146629</b>	-1.156926	-1.163969	-1.1473	
9.0	-1.160342	-1.155231	-1.160342	-1.149434	<b>-1.154545</b>	-1.166713	-1.171782	-1.1553	
13.0	-1.163795	-1.159928	-1.163794	-1.154131	<b>-1.157997</b>	-1.171369	-1.175231	-1.1588	

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]

Tabela 2.7 – Reverso de Temperatura: Fluxo de Calor  $Q_1$

$a$	BGK	S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.1	<b>2.379204(-1)</b>	2.451204(-1)	2.329694(-1)	2.398983(-1)	2.275419(-1)	2.534097(-1)	2.422883(-1)	2.3857(-1)
0.5	1.631562(-1)	1.819639(-1)	1.604211(-1)	1.786399(-1)	1.583531(-1)	1.899851(-1)	<b>1.664570(-1)</b>	1.6728(-1)
1.0	1.218753(-1)	1.442588(-1)	1.208884(-1)	1.429939(-1)	1.204483(-1)	1.487276(-1)	<b>1.233426(-1)</b>	1.2586(-1)
1.5	9.820461(-2)	1.208884(-1)	9.781778(-2)	1.204483(-1)	9.779575(-2)	1.233426(-1)	<b>9.883504(-2)</b>	1.0147(-1)
2.0	8.247916(-2)	1.044161(-1)	8.231495(-2)	1.043101(-1)	8.240363(-2)	1.057797(-1)	<b>8.272328(-2)</b>	8.5124(-2)
2.5	7.117535(-2)	9.202562(-2)	7.110077(-2)	9.205771(-2)	7.121503(-2)	9.278232(-2)	<b>7.123432(-2)</b>	7.3351(-2)
5.0	4.234747(-2)	5.796871(-2)	4.234447(-2)	5.807978(-2)	<b>4.243073(-2)</b>	5.792677(-2)	4.224057(-2)	4.3408(-2)
9.0	2.571516(-2)	3.645120(-2)	2.571509(-2)	3.652597(-2)	<b>2.576813(-2)</b>	3.634984(-2)	2.563642(-2)	2.6263(-2)
13.0	1.846410(-2)	2.658510(-2)	1.846409(-2)	2.663993(-2)	<b>1.850228(-2)</b>	2.650407(-2)	1.840666(-2)	1.8827(-2)

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]

Tabela 2.8 – Reverso de Temperatura: Fluxo de Calor  $Q_2$

$a$	BGK	S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	
0.1	-5.066897(-1)	-5.220231(-1)	-5.037499(-1)	-5.188234(-1)	<b>-4.997755(-1)</b>	-5.257982(-1)	-5.086856(-1)	-5.0037(-1)
0.5	-3.673037(-1)	-4.096443(-1)	<b>-3.638211(-1)</b>	-4.051357(-1)	-3.600816(-1)	-4.165312(-1)	-3.700703(-1)	-3.6307(-1)
1.0	-2.771704(-1)	-3.280754(-1)	<b>-2.752415(-1)</b>	-3.250766(-1)	-2.733220(-1)	-3.334622(-1)	-2.791047(-1)	-2.7541(-1)
1.5	-2.235945(-1)	-2.752415(-1)	<b>-2.225793(-1)</b>	-2.733220(-1)	-2.215157(-1)	-2.791047(-1)	-2.249645(-1)	-2.2268(-1)
2.0	-1.877249(-1)	-2.376542(-1)	<b>-1.871859(-1)</b>	-2.363769(-1)	-1.865139(-1)	-2.404398(-1)	-1.887461(-1)	-1.8705(-1)
2.5	-1.619170(-1)	-2.093494(-1)	-1.616259(-1)	-2.084503(-1)	<b>-1.611452(-1)</b>	-2.114053(-1)	-1.627139(-1)	-1.6127(-1)
5.0	-9.623913(-2)	-1.317400(-1)	-9.622202(-2)	-1.314056(-1)	<b>-9.599665(-2)</b>	-1.324204(-1)	-9.660269(-2)	-9.5481(-2)
9.0	-5.843368(-2)	-8.282965(-2)	-5.843335(-2)	-8.263743(-2)	<b>-5.829858(-2)</b>	-8.313683(-2)	-5.863791(-2)	-5.7770(-2)
13.0	-4.195666(-2)	-6.041032(-2)	-4.195665(-2)	-6.027095(-2)	<b>-4.186009(-2)</b>	-6.062229(-2)	-4.210215(-2)	-4.1413(-2)

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]

Tabela 2.9 – Reverso de Temperatura:  $\beta_T$ 

$a$	BGK	S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.1	3.959438	4.005519	4.173077	4.351809	<b>4.598517</b>	3.592011	3.675401	5.1637
0.5	4.402886	4.530868	<b>4.526582</b>	5.102516	5.028708	3.858334	3.879265	4.5030
1.0	4.359698	4.471052	4.330302	4.875101	4.560345	3.880208	<b>3.866511</b>	4.0607
1.5	4.248874	4.330302	4.151428	4.560345	4.226311	3.866511	<b>3.843929</b>	3.8468
2.0	4.146957	4.204449	4.028264	4.318845	4.032504	3.850799	<b>3.827842</b>	3.7443
2.5	4.064349	4.104784	3.946213	4.149359	3.921483	3.837845	<b>3.817094</b>	3.6979
5.0	3.857571	3.865319	3.800500	3.829897	<b>3.775478</b>	3.806224	3.796125	3.6838
9.0	3.785703	3.786471	3.774267	3.767477	<b>3.762758</b>	3.793099	3.788798	3.6984
13.0	3.774639	3.774734	3.772484	3.762872	<b>3.762439</b>	3.789074	3.787229	3.6996
15.0	3.773311	3.773347	3.772377	3.762566	<b>3.762430</b>	3.788150	3.787053	3.6996

†[Siewert, 2003a]

Tabela 2.10 – Reverso de Temperatura:  $\beta_Q$ 

$a$	BGK	S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.1	3.629660	3.629660	3.662300	3.662680	3.696410	3.574893	<b>3.599504</b>	3.5974
0.5	3.751238	3.751238	3.767912	3.767889	3.773915	3.692440	<b>3.723218</b>	3.6705
1.0	3.774212	3.774212	3.776823	3.773360	3.769204	3.742099	<b>3.762840</b>	3.6882
1.5	3.776823	3.776823	3.775449	3.769204	<b>3.765085</b>	3.762840	3.776161	3.6946
2.0	3.776028	3.776028	3.774020	3.766097	<b>3.763418</b>	3.773023	3.781656	3.6974
2.5	3.774903	3.774903	3.773194	3.764343	<b>3.762797</b>	3.778509	3.784207	3.6986
5.0	3.772606	3.772606	3.772363	3.762501	<b>3.762432</b>	3.785996	3.786964	3.6996
9.0	3.772343	3.772343	3.772336	3.762429	<b>3.762428</b>	3.787130	3.787289	3.6996
13.0	3.772337	3.772337	3.772336	3.762428	<b>3.762428</b>	3.787281	3.787331	3.6996
15.0	3.772336	3.772336	3.772336	3.762428	<b>3.762428</b>	3.787307	3.787336	3.6996

†[Siewert, 2003a]

Tabela 2.11 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Perturbação de Densidade  $\Delta N(\tau)$  com  $u = 1.0$

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	-1.322259	-1.322259	-1.322259	-1.308058	<b>-1.308058</b>	-1.353605	-1.353605	-1.3073
0.1	-1.438465	-1.438465	-1.467986	-1.446757	-1.479865	-1.432843	<b>-1.455016</b>	-1.4586
0.2	-1.491298	-1.491298	<b>-1.526635</b>	-1.505545	-1.543685	-1.473057	-1.501365	-1.5190
0.3	-1.526635	-1.526635	<b>-1.563222</b>	-1.543685	-1.582092	-1.501365	-1.532090	-1.5570
0.4	-1.552600	-1.552600	<b>-1.588596</b>	-1.571065	-1.607966	-1.523002	-1.554470	-1.5835
0.5	-1.572639	-1.572639	<b>-1.607199</b>	-1.591777	-1.626438	-1.540279	-1.571615	-1.6031
0.6	-1.588596	-1.588596	<b>-1.621326</b>	-1.607966	-1.640112	-1.554470	-1.585186	-1.6180
0.7	-1.601582	-1.601582	<b>-1.632324</b>	-1.620912	-1.650493	-1.566361	-1.596181	-1.6296
0.8	-1.612325	-1.612325	<b>-1.641046</b>	-1.631439	-1.658521	-1.576477	-1.605248	-1.6389
0.9	-1.621326	-1.621326	<b>-1.648063</b>	-1.640112	-1.664820	-1.585186	-1.612832	-1.6463
1.0	-1.628946	-1.628946	<b>-1.653775</b>	-1.647332	-1.669820	-1.592757	-1.619247	-1.6524
2.0	-1.666570	-1.666570	<b>-1.677941</b>	-1.680454	-1.688825	-1.634779	-1.651294	-1.6779
5.0	-1.683859	-1.683859	<b>-1.685057</b>	-1.692242	-1.692689	-1.663504	-1.667976	-1.6853
7.0	-1.684960	-1.684960	<b>-1.685257</b>	-1.692662	-1.692730	-1.667454	-1.669563	-1.6855

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]



Tabela 2.12 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Perturbação de Temperatura  $\Delta T(\tau)$  com  $u = 1.0$

$\tau$	BGK		S		GJ		MRS		ELB <sup>†</sup>
	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	-4.095776(-1)	-4.095776(-1)	-4.095776(-1)	-4.017941(-1)	<b>-4.017941(-1)</b>	-4.259078(-1)	-4.259078(-1)	-4.0355(-1)	
0.1	-4.103591(-1)	-4.103591(-1)	-4.119030(-1)	-4.013655(-1)	-4.034959(-1)	-4.285514(-1)	<b>-4.296067(-1)</b>	-4.2151(-1)	
0.2	-4.134704(-1)	-4.134704(-1)	-4.164618(-1)	-4.057451(-1)	-4.101393(-1)	-4.305183(-1)	<b>-4.320201(-1)</b>	-4.3036(-1)	
0.3	-4.164618(-1)	-4.164618(-1)	-4.204252(-1)	-4.101393(-1)	-4.160332(-1)	-4.320201(-1)	<b>-4.337168(-1)</b>	-4.3636(-1)	
0.4	-4.191754(-1)	-4.191754(-1)	-4.237827(-1)	-4.141721(-1)	-4.210196(-1)	-4.332099(-1)	<b>-4.349749(-1)</b>	-4.4074(-1)	
0.5	-4.216073(-1)	-4.216073(-1)	-4.266288(-1)	-4.177921(-1)	-4.252079(-1)	-4.341760(-1)	<b>-4.359404(-1)</b>	-4.4406(-1)	
0.6	-4.237827(-1)	-4.237827(-1)	-4.290542(-1)	-4.210196(-1)	-4.287290(-1)	-4.349749(-1)	<b>-4.366998(-1)</b>	-4.4663(-1)	
0.7	-4.257310(-1)	-4.257310(-1)	-4.311330(-1)	-4.238922(-1)	-4.316981(-1)	-4.356449(-1)	<b>-4.373088(-1)</b>	-4.4865(-1)	
0.8	-4.274800(-1)	-4.274800(-1)	-4.329247(-1)	-4.264496(-1)	-4.342107(-1)	-4.362132(-1)	<b>-4.378046(-1)</b>	-4.5024(-1)	
0.9	-4.290542(-1)	-4.290542(-1)	-4.344766(-1)	-4.287290(-1)	-4.363443(-1)	-4.366998(-1)	<b>-4.382136(-1)</b>	-4.5152(-1)	
1.0	-4.304746(-1)	-4.304746(-1)	-4.358269(-1)	-4.307634(-1)	-4.381622(-1)	-4.371200(-1)	<b>-4.385545(-1)</b>	-4.5254(-1)	
2.0	-4.392284(-1)	-4.392284(-1)	-4.429883(-1)	-4.425362(-1)	<b>-4.468546(-1)</b>	-4.393563(-1)	-4.401617(-1)	-4.5611(-1)	
5.0	-4.456740(-1)	-4.456740(-1)	-4.464889(-1)	-4.493062(-1)	<b>-4.498122(-1)</b>	-4.407258(-1)	-4.409381(-1)	-4.5576(-1)	
7.0	-4.464067(-1)	-4.464067(-1)	-4.466955(-1)	-4.497719(-1)	<b>-4.498927(-1)</b>	-4.409123(-1)	-4.410205(-1)	-4.5563(-1)	

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]

Tabela 2.13 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Saltos de Densidade e de Temperatura com  $u = 1.0$  e  $\varepsilon = \varepsilon_t$

	BGK	S	GJ	MRS	ELB <sup>†</sup>	ELB <sup>‡</sup>
$-\Delta N(0)$	1.322259	1.322259	<b>1.308058</b>	1.353605	1.3073	1.30741
$-\Delta N(\infty)$	<b>1.685289</b>	<b>1.685289</b>	1.692732	1.670394	1.6855	1.68556
$-\Delta T(0)$	4.095776(-1)	4.095776(-1)	<b>4.017941(-1)</b>	4.259078(-1)	4.0355(-1)	4.0360(-1)
$-\Delta T(\infty)$	4.467493(-1)	4.467493(-1)	<b>4.499041(-1)</b>	4.410467(-1)	4.5559(-1)	4.5566(-1)

<sup>†</sup>[Siewert, 2003a]<sup>‡</sup>[Sone et al., 1989a]

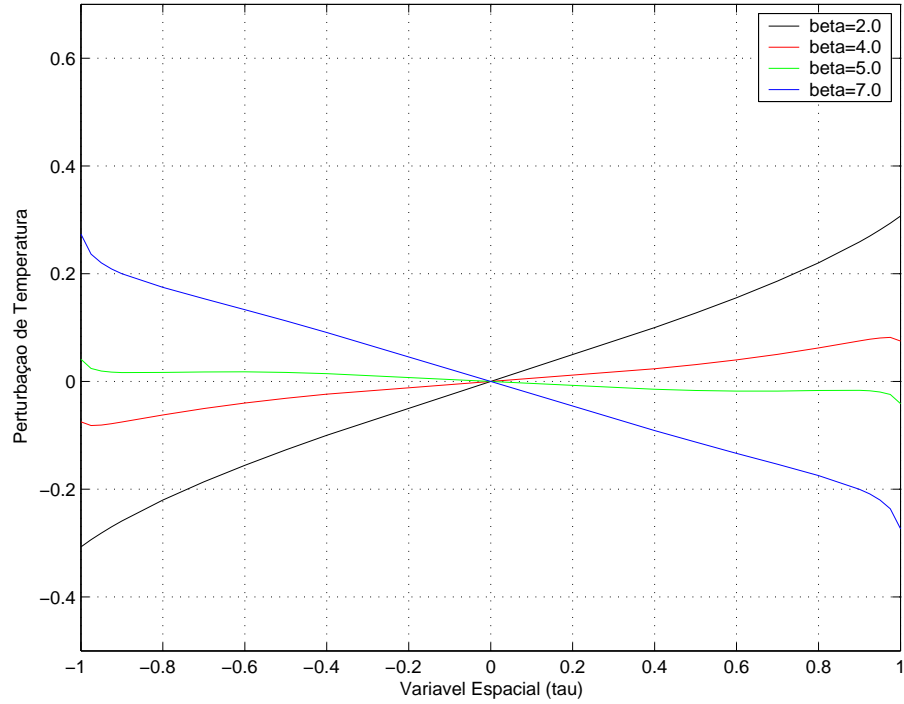


Figura 2.6 – Reverso de Temperatura: Perturbação de Temperatura  $\Delta T(\tau)$  com  $2a = 2.0$ ,  $\delta = 1.0$ , modelo Gross-Jackson e  $\varepsilon = \varepsilon_t$

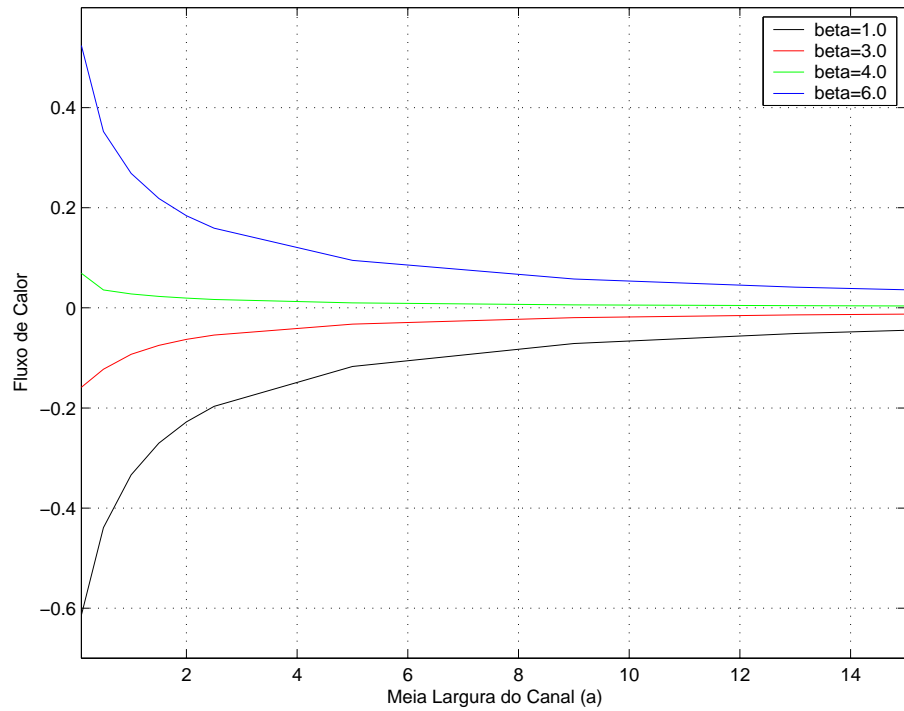


Figura 2.7 – Reverso de Temperatura: Fluxo de Calor  $Q$  com  $\delta = 1.0$ , modelo Gross-Jackson e  $\varepsilon = \varepsilon_t$

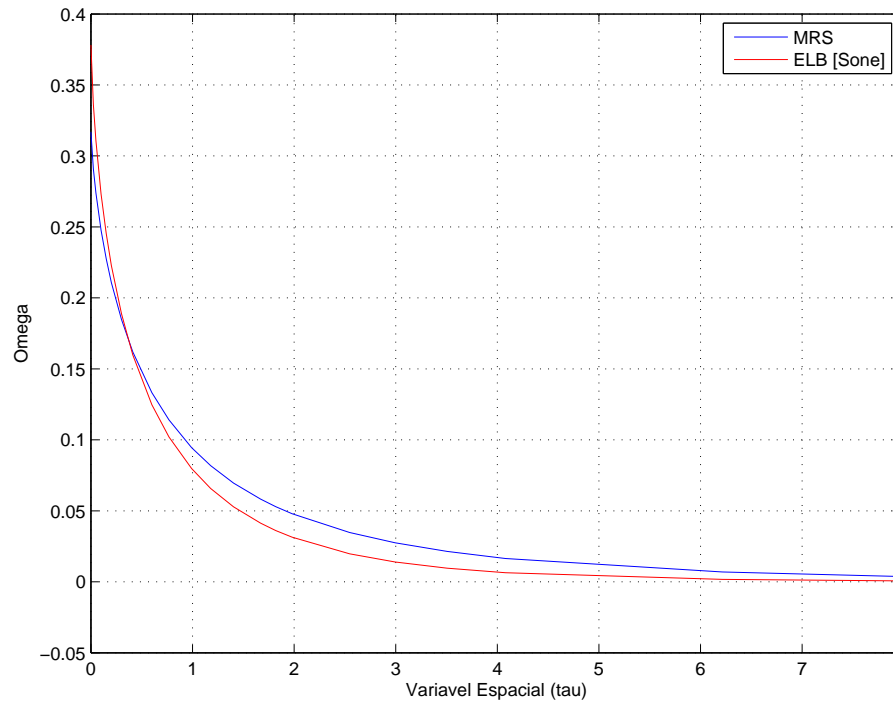


Figura 2.8 – Evaporação/Condensação em Semi-espço: Variação de Densidade  $\Omega(\tau)$  com  $u = 1.0$ , modelo MRS e  $\varepsilon = 1/\sqrt{8}$

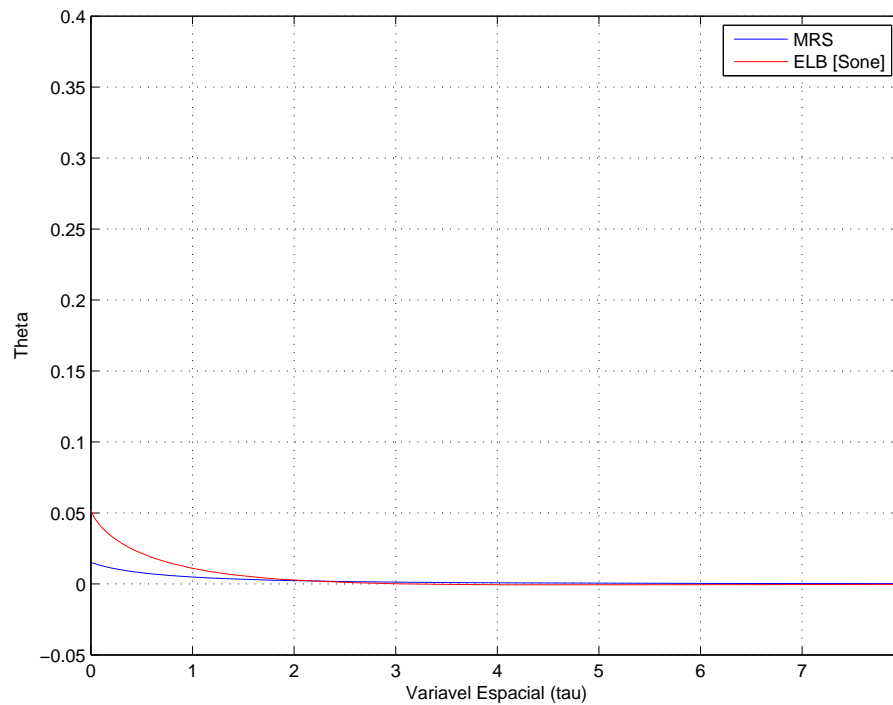


Figura 2.9 – Evaporação/Condensação em Semi-espço: Variação de Temperatura  $\Theta(\tau)$  com  $u = 1.0$ , modelo MRS e  $\varepsilon = 1/\sqrt{8}$

### 3 EVAPORAÇÃO FRACA: CASO DE MISTURA DE DOIS GASES

Neste capítulo os problemas de evaporação fraca abordados no capítulo anterior, isto é, o problema do reverso de temperatura e o problema de evaporação/condensação em semi-espaço, são resolvidos com o modelo McCormack para mistura de dois gases [McCormack, 1973]. Novamente é de interesse determinar os saltos de densidade e de temperatura usados para formular condições de contorno para as equações de Navier-Stokes quando a mistura de gases está em contato com uma fase de transição [Yasuda et al., 2005]. Além disso, são determinados os valores críticos de  $\hat{\beta}$  para que ocorram as inversões de sentido do gradiente de temperatura e do fluxo de calor dos gases. É importante salientar que o termo de espalhamento do modelo McCormack satisfaz os princípios de conservação de massa, momento e energia do processo de colisão.

#### 3.1 Formulação Matemática

Na derivação das equações para mistura de dois gases, de acordo com o modelo McCormack, será usada a notação proposta por Siewert na Ref. [Siewert, 2005]. Desta forma, para derivar a equação de balanço, consideram-se as funções  $h_\alpha$  para os dois tipos de partículas ( $\alpha = 1$  e  $\alpha = 2$ ) que denotam perturbações nas distribuições Maxwellianas de cada espécie, ou seja,

$$f_\alpha(x, \mathbf{v}) = f_{\alpha,0}(v)[1 + h_\alpha(x, \mathbf{v})], \quad (3.1)$$

onde

$$f_{\alpha,0}(v) = n_\alpha(\lambda_\alpha/\pi)^{3/2}e^{-\lambda_\alpha v^2}, \quad \lambda_\alpha = m_\alpha/(2kT_0). \quad (3.2)$$

Aqui  $k$  é a constante de Boltzmann,  $m_\alpha$  é a massa da partícula e  $n_\alpha$  é a densidade de equilíbrio da espécie  $\alpha$ ,  $T_0$  é uma temperatura de referência,  $x$  é a variável espacial e o vetor  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ , com magnitude  $v$ , é a velocidade das partículas. Seguindo McCormack [McCormack, 1973] a equação de balanço encontrada é da forma

$$c_x \frac{\partial}{\partial x} h_\alpha(x, \mathbf{c}) + \omega_\alpha \gamma_\alpha h_\alpha(x, \mathbf{c}) = \omega_\alpha \gamma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(x, \mathbf{c}), \quad \alpha = 1, 2, \quad (3.3)$$

onde o vetor  $\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)$ , com magnitude  $c$ , é agora a variável velocidade adimensionalizada. Na obtenção da Eq. (3.3), seguindo Siewert [Siewert, 2005] a variável adimensional  $\mathbf{c}$  é expressa

de maneira diferente em cada equação: para o caso  $\alpha = 1$  define-se  $\mathbf{c} = \omega_1 \mathbf{v}$ , e, analogamente, para o caso  $\alpha = 2$  define-se  $\mathbf{c} = \omega_2 \mathbf{v}$ , onde

$$\omega_\alpha = [m_\alpha / (2kT_0)]^{1/2}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (3.4)$$

Ainda na Eq. (3.3), as freqüências de colisão  $\gamma_\alpha$ , para  $\alpha = 1, 2$ , são definidas posteriormente neste capítulo e o operador de colisão é dado por

$$\mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(x, \mathbf{c}) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_{\beta=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\beta(x, \mathbf{c}') K_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) d\mathbf{c}'_x d\mathbf{c}'_y d\mathbf{c}'_z, \quad (3.5)$$

onde

$$K_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = K_{\beta,\alpha}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + K_{\beta,\alpha}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + K_{\beta,\alpha}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + K_{\beta,\alpha}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad (3.6)$$

é o núcleo de espalhamento.

Neste ponto faz-se necessário expressar uma lista de notações e definições de interesse utilizadas. Assim, na Eq. (3.6)

$$K_{1,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{1,2}^{(1)}] - \eta_{1,2}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (3.7)$$

$$K_{1,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (3.8)$$

$$K_{1,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_1[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (3.9)$$

$$K_{1,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\beta_1(c'^2 - 5/2) - \eta_{1,2}^{(2)}](c^2 - 5/2) \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (3.10)$$

$$K_{2,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = r\{2\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(2)}[r^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (3.11)$$

$$K_{2,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)r^* \eta_{1,2}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (3.12)$$

$$K_{2,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{1,2}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (3.13)$$

$$K_{2,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2) \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (3.14)$$

$$K_{2,2}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{2,1}^{(1)}] - \eta_{2,1}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (3.15)$$

$$K_{2,2}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (3.16)$$

$$K_{2,2}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_2[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (3.17)$$

$$K_{2,2}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\beta_2(c'^2 - 5/2) - \eta_{2,1}^{(2)}](c^2 - 5/2)\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (3.18)$$

$$K_{1,2}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = s\{2\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(2)}[s^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\}\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (3.19)$$

$$K_{1,2}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)s^*\eta_{2,1}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (3.20)$$

$$K_{1,2}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{2,1}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2] \quad (3.21)$$

e

$$K_{1,2}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}. \quad (3.22)$$

Nas equações acima foi usado que

$$r = (m_1/m_2)^{1/2}, \quad (3.23)$$

$$s = (m_2/m_1)^{1/2}, \quad (3.24)$$

$$r^* = r^2/(1 + r^2) \quad (3.25)$$

e

$$s^* = s^2/(1 + s^2). \quad (3.26)$$

Continuando,

$$\varpi_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(4)} - \eta_{1,1}^{(3)} - \eta_{1,2}^{(3)}, \quad (3.27)$$

$$\varpi_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(4)} - \eta_{2,2}^{(3)} - \eta_{2,1}^{(3)}, \quad (3.28)$$

$$\beta_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(6)} - \eta_{1,1}^{(5)} - \eta_{1,2}^{(5)} \quad (3.29)$$

e

$$\beta_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(6)} - \eta_{2,2}^{(5)} - \eta_{2,1}^{(5)}, \quad (3.30)$$

onde

$$\eta_{i,j}^{(k)} = \nu_{i,j}^{(k)} / \gamma_i. \quad (3.31)$$

Segundo McCormack [McCormack, 1973] e Siewert [Siewert, 2005] tem-se

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} n_\beta \Omega_{\alpha,\beta}^{11}, \quad (3.32)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 n_\beta \left( \Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} \right), \quad (3.33)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha,\beta}^{22} \right), \quad (3.34)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \Omega_{\alpha,\beta}^{22} \right), \quad (3.35)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} \quad (3.36)$$

e

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \left( \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{3/2} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)}, \quad (3.37)$$

onde

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} = \Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \left( \frac{15m_\alpha}{4m_\beta} + \frac{25m_\beta}{8m_\alpha} \right) \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \left( \frac{m_\beta}{2m_\alpha} \right) \left( 5\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \Omega_{\alpha,\beta}^{13} \right) \quad (3.38)$$

e, após correção de Pan e Storvick [Pan e Storvick, 1992],

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)} = -\Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{12} + \frac{1}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{13}. \quad (3.39)$$

Ainda,

$$m_{\alpha,\beta} = m_\alpha m_\beta / (m_\alpha + m_\beta) \quad (3.40)$$

e as funções  $\Omega$  são as integrais de Chapman-Cowling [Chapman e Cowling, 1970; Ferziger e



Kaper, 1972] que, para o caso de interações do tipo esferas rígidas, possuem a forma simplificada

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{12} = 3\Omega_{\alpha,\beta}^{11}, \quad \Omega_{\alpha,\beta}^{13} = 12\Omega_{\alpha,\beta}^{11} \quad \text{e} \quad \Omega_{\alpha,\beta}^{22} = 2\Omega_{\alpha,\beta}^{11}, \quad (3.41)$$

onde

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{11} = \frac{1}{4} \left( \frac{\pi k T_0}{2m_{\alpha,\beta}} \right)^{1/2} (d_\alpha + d_\beta)^2. \quad (3.42)$$

Aqui,  $d_1$  and  $d_2$  são os diâmetros das duas espécies de partículas.

Ainda seguindo Siewert [Siewert, 2005], na Eq. (3.3) introduz-se a variável espacial adimensionalizada

$$\tau = x/l, \quad (3.43)$$

onde  $l$  é o livre caminho médio (baseado na viscosidade) sugerido por Sharipov e Kalempa [Sharipov e Kalempa, 2003] e definido como

$$l = \frac{\mu v_0}{P_0}, \quad (3.44)$$

sendo

$$v_0 = (2kT_0/m)^{1/2} \quad (3.45)$$

e

$$m = \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 + n_2}. \quad (3.46)$$

Em relação à Eq. (3.44), seguindo Sharipov e Kalempa [Sharipov e Kalempa, 2003] e Siewert [Siewert, 2005] expressa-se a viscosidade  $\mu$  da mistura em termos das pressões  $P_\alpha$  e das frequências de colisão  $\gamma_\alpha$  como

$$\mu = P_1/\gamma_1 + P_2/\gamma_2, \quad (3.47)$$

onde

$$\frac{P_\alpha}{P_0} = \frac{n_\alpha}{n_1 + n_2}, \quad (3.48)$$

$$\gamma_1 = [\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}] [\Psi_2 + \nu_{1,2}^{(4)}]^{-1} \quad (3.49)$$

e

$$\gamma_2 = [\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}] [\Psi_1 + \nu_{2,1}^{(4)}]^{-1}. \quad (3.50)$$

Nas Eqs. (3.49) e (3.50)

$$\Psi_1 = \nu_{1,1}^{(3)} + \nu_{1,2}^{(3)} - \nu_{1,1}^{(4)}, \quad (3.51)$$

$$\Psi_2 = \nu_{2,2}^{(3)} + \nu_{2,1}^{(3)} - \nu_{2,2}^{(4)} \quad (3.52)$$

e as expressões  $\nu_{i,j}^{(k)}$  são definidas nas Eqs. (3.32) a (3.37). Seguindo Siewert [Siewert, 2005] novamente define-se

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \omega_\alpha l \quad (3.53)$$

ou mais explicitamente

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \frac{n_1/\gamma_1 + n_2/\gamma_2}{n_1 + n_2} (m_\alpha/m)^{1/2}, \quad (3.54)$$

de modo que a Eq. (3.3) pode ser reescrita de forma que se possa definir o problema do reverso de temperatura e o problema de evaporação/condensação em semi-espaco baseados no modelo McCormack.

Finalmente, tendo em vista as definições apresentadas até aqui, inicia-se com a equação cinética

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) + \sigma_\alpha h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) = \sigma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(\tau, \mathbf{c}), \quad \alpha = 1, 2, \quad (3.55)$$

onde  $\tau$  é a variável espacial adimensionalizada (medida em termos do livre caminho médio  $l$ ),  $\sigma_\alpha$  são dados pela Eq. (3.54) e o operador de colisão é definido na Eq. (3.5).

Continuando, as perturbações de densidade e temperatura são definidas para a espécie  $\alpha$  como [Siewert, 2005]

$$\Delta N_\alpha(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z \quad (3.56)$$

e

$$\Delta T_\alpha(\tau) = \frac{2}{3} \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 3/2) h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z, \quad (3.57)$$

e os fluxos de massa e de calor são dados, respectivamente, por [Garcia e Siewert, 2004]

$$U_\alpha(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) c_x dc_x dc_y dc_z \quad (3.58)$$

e

$$Q_\alpha(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 5/2) h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) c_x dc_x dc_y dc_z. \quad (3.59)$$

Seguindo Garcia e Siewert [Garcia e Siewert, 2004], multiplicando a Eq. (3.55) por  $e^{-c^2}$  e integrando a equação resultante para todo  $c_x$ ,  $c_y$  e  $c_z$  encontra-se que

$$\frac{d}{d\tau} U_\alpha(\tau) = 0, \quad (3.60)$$

ou seja, os fluxos mássicos independem da variável espacial e são indicados a partir daqui apenas como  $U_\alpha$ . Para completar a formulação matemática dos problemas abordados deve-se suplementar a Eq. (3.55) com condições de contorno apropriadas, o que será mostrado nas próximas seções.

### 3.1.1 O Problema do Reverso de Temperatura

Neste problema considera-se uma mistura de dois gases confinados entre duas interfaces (vapor-líquido ou vapor-sólido) com diferentes temperaturas, formando um canal (com largura  $2a$ ). A interface localizada em  $\tau = -a$  é mantida com temperatura  $T_0(1 - \delta)$  e com densidade  $n_\alpha(1 - \rho_\alpha)$ , enquanto que a interface localizada em  $\tau = a$  possui temperatura  $T_0(1 + \delta)$  e densidade  $n_\alpha(1 + \rho_\alpha)$ , para um  $\delta$  pequeno e positivo. Dessa forma a mistura de gases evapora na fase com maior temperatura e condensa na outra. Assim, generalizando para uma mistura de dois gases o procedimento utilizado no capítulo 2 e nas Refs. [Pao, 1971a], [Thomas et al., 1974], [Siewert, 2003a] e [Scherer e Barichello, 2008] para o caso de um gás, escreve-se para este problema as condições de contorno (para  $\alpha = 1, 2$ )

$$h_\alpha(-a, c_x, c_y, c_z) = -\rho_\alpha - (c^2 - 3/2)\delta \quad (3.61)$$

e

$$h_\alpha(a, -c_x, c_y, c_z) = \rho_\alpha + (c^2 - 3/2)\delta, \quad (3.62)$$

para  $c_x > 0$  e todo  $c_y$  e  $c_z$ . Nas Eqs. (3.61) e (3.62),  $\rho_\alpha$  são os desvios de densidade nas interfaces para as espécies  $\alpha = 1$  e  $\alpha = 2$ . De acordo com Pao [Pao, 1971a], a equação de Clausius-Clapeyron pode ser usada para relacionar os desvios de densidade e temperatura nas

interfaces como

$$\rho_\alpha = \hat{\beta}_\alpha \delta, \quad (3.63)$$

onde

$$\hat{\beta}_\alpha = \frac{L_\alpha}{kT_0} - 1 \quad (3.64)$$

e  $L_\alpha$  é o calor latente da espécie  $\alpha$  na fase de transição na temperatura  $T_0$ . Assim, usando a Eq. (3.63), reescreve-se as Eqs. (3.61) e (3.62) como

$$h_\alpha(-a, c_x, c_y, c_z) = -(\hat{\beta}_\alpha + c^2 - 3/2)\delta \quad (3.65)$$

e

$$h_\alpha(a, -c_x, c_y, c_z) = (\hat{\beta}_\alpha + c^2 - 3/2)\delta, \quad (3.66)$$

para  $c_x > 0$  e todo  $c_y$  e  $c_z$ .

Como no caso de um gás abordado no capítulo anterior e também nas Refs. [Pao, 1971a], [Thomas et al., 1974], [Siewert, 2003a] e [Scherer e Barichello, 2008], existem alguns valores para os parâmetros  $\hat{\beta}_\alpha$  que fazem com que as declividades dos perfis de temperatura dos gases tenham sentido contrário à diferença de temperatura imposta pelas interfaces. Este fenômeno é chamado de reverso de temperatura e, conforme foi feito no capítulo anterior, deseja-se determinar os valores críticos de  $\hat{\beta}_\alpha$  para que este fenômeno seja observado. Ainda, conforme feito nas Refs. [Siewert, 2003a] e [Scherer e Barichello, 2008], decompõe-se o problema definido pela Eq. (3.55), com condições de contorno dadas pelas Eqs. (3.65) e (3.66), em dois novos problemas de modo que

$$h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) = [(\hat{\beta}_\alpha - 3/2)h_\alpha^1(\tau, \mathbf{c}) + h_\alpha^2(\tau, \mathbf{c})]\delta. \quad (3.67)$$

Aqui  $h_\alpha^1$  e  $h_\alpha^2$  devem satisfazer a Eq. (3.55) com condições de contorno dadas respectivamente (para  $c_x > 0$ ) por

$$h_\alpha^1(-a, c_x, c_y, c_z) = -1, \quad (3.68)$$

$$h_\alpha^1(a, -c_x, c_y, c_z) = 1, \quad (3.69)$$

$$h_\alpha^2(-a, c_x, c_y, c_z) = -c^2 \quad (3.70)$$

e

$$h_\alpha^2(a, -c_x, c_y, c_z) = c^2. \quad (3.71)$$

Conforme proposto na decomposição dada pela Eq. (3.67), em termos dos dois novos problemas encontra-se para as perturbações de densidade e temperatura

$$\Delta N_\alpha(\tau) = [(\hat{\beta}_\alpha - 3/2)\Delta N_\alpha^1(\tau) + \Delta N_\alpha^2(\tau)]\delta \quad (3.72)$$

e

$$\Delta T_\alpha(\tau) = [(\hat{\beta}_\alpha - 3/2)\Delta T_\alpha^1(\tau) + \Delta T_\alpha^2(\tau)]\delta, \quad (3.73)$$

onde  $\Delta N_\alpha^l(\tau)$  e  $\Delta T_\alpha^l(\tau)$ , para  $l = 1, 2$ , podem ser expressas, respectivamente, na forma dada pelas Eqs. (3.56) e (3.57) com  $h_\alpha = h_\alpha^l$ . Da mesma forma os fluxos de massa e de calor são expressos por

$$U_\alpha = [(\hat{\beta}_\alpha - 3/2)U_\alpha^1 + U_\alpha^2]\delta \quad (3.74)$$

e

$$Q_\alpha(\tau) = [(\hat{\beta}_\alpha - 3/2)Q_\alpha^1(\tau) + Q_\alpha^2(\tau)]\delta, \quad (3.75)$$

onde  $U_\alpha^l$  e  $Q_\alpha^l(\tau)$ , para  $l = 1, 2$ , são definidos nas Eqs. (3.58) e (3.59) com  $h_\alpha = h_\alpha^l$ .

A fim de determinar os valores críticos de  $\hat{\beta}_\alpha$  para que o gradiente de temperatura da espécie  $\alpha$  mude de sentido, deriva-se a Eq. (3.73) em relação a  $\tau$ , iguala-se a equação resultante (calculada em  $\tau = 0$ ) a zero e, resolvendo para  $\hat{\beta}_\alpha$ , encontra-se os valores críticos

$$\beta_\alpha^T = 3/2 - \Delta T_\alpha'^2(0)/\Delta T_\alpha'^1(0) \quad (3.76)$$

tais que, para  $\hat{\beta}_\alpha > \beta_\alpha^T$  o gradiente de temperatura da espécie  $\alpha$  estará com sentido oposto à diferença de temperatura imposta pelas interfaces.

Analogamente pode-se obter os valores críticos de  $\hat{\beta}_\alpha$  para que os fluxos de calor dos gases mudem de sentido no canal. Para isso aplica-se  $\tau = 0$  na Eq. (3.75), iguala-se a equação resultante a zero e, resolvendo para  $\hat{\beta}_\alpha$ , encontra-se os valores críticos

$$\beta_\alpha^Q = 3/2 - Q_\alpha^2(0)/Q_\alpha^1(0). \quad (3.77)$$

Em outras palavras, para  $\hat{\beta}_\alpha > \beta_\alpha^Q$  o fluxo de calor da espécie  $\alpha$  terá o mesmo sentido da diferença de temperatura imposta pelas interfaces.

### 3.1.2 O Problema de Evaporação/Condensação em Semi-Espaço

Neste problema considera-se uma mistura de gases rarefeitos em contato com uma fase condensada plana com temperatura uniforme  $T_0$ . A mistura binária ocupa o semi-espaco  $\tau > 0$  e, dependendo da pressão no infinito, a mistura está condensando ou evaporando na superfície da fase condensada. Assim, seguindo as Refs. [Yasuda et al., 2005] e [Takata et al., 2006], considera-se que  $h_\alpha$  definem perturbações nas distribuições Maxwellianas absolutas escritas em termos das condições da interface (densidades  $n_\alpha$ , temperatura  $T_0$  e velocidade  $u_0 = 0$ ) dadas pela Eq. (3.2). Dessa forma as funções  $h_\alpha$  precisam satisfazer a Eq. (3.55) e também a condição de contorno para a interface em  $\tau = 0$

$$h_\alpha(0, c_x, c_y, c_z) = 0 \quad (3.78)$$

para  $\alpha = 1, 2$ ,  $c_x > 0$  e todo  $c_y$  e  $c_z$ . Generalizando para uma mistura de dois gases o procedimento utilizado nas Refs. [Sone et al., 1989a] e [Scherer e Barichello, 2008] para o caso de um gás, considera-se que o estado da mistura no infinito é dado pela distribuição Maxwelliana

$$f_{\alpha,\infty}(\mathbf{v}) = n_{\alpha,\infty}(\lambda_{\alpha,\infty}/\pi)^{3/2} e^{-\lambda_{\alpha,\infty}|\mathbf{v}-\mathbf{u}_\infty|^2}, \quad \lambda_{\alpha,\infty} = m_\alpha/(2kT_\infty), \quad (3.79)$$

onde  $n_{\alpha,\infty}$  é a densidade no infinito da espécie  $\alpha$ ,  $\mathbf{u}_\infty = (u_\infty, 0, 0)$  e  $T_\infty$  são, respectivamente, a velocidade e a temperatura da mistura de gases no infinito. Como o caso tratado aqui é de evaporação/condensação fraca ( $u_0 = 0$ ), lineariza-se a Eq. (3.79) sobre  $f_{\alpha,0}$  e encontra-se para o infinito a condição de contorno

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) = \Delta N_\alpha(\infty) + 2c_x u (m_\alpha/m_1)^{1/2} + (c^2 - 3/2)\Delta T(\infty), \quad (3.80)$$

onde

$$\Delta N_\alpha(\infty) = \frac{n_{\alpha,\infty} - n_\alpha}{n_\alpha} \quad (3.81)$$

é a perturbação de densidade no infinito da espécie  $\alpha$  e

$$\Delta T(\infty) = \frac{T_\infty - T_0}{T_0} \quad (3.82)$$

é a perturbação de temperatura no infinito de ambas espécies. Em relação à adimensionalização da velocidade  $u_\infty$ , na Eq. (3.80) foi usado  $u = \omega_1 u_\infty$  tanto para  $\alpha = 1$  como para  $\alpha = 2$ .

Para resolver o problema definido pelas Eqs. (3.55), (3.78) e (3.80), generaliza-se para uma mistura de dois gases o procedimento utilizado nas Refs. [Sone et al., 1989a] e [Scherer e

Barichello, 2008] para o caso de um gás e escreve-se, para  $\alpha = 1, 2$ ,

$$h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) = \Theta_\alpha^H(\mathbf{c}) + \Theta_\alpha^K(\tau, \mathbf{c}), \quad (3.83)$$

onde

$$\Theta_\alpha^H(\mathbf{c}) = \Delta N_\alpha(\infty) + 2c_x u(m_\alpha/m_1)^{1/2} + (c^2 - 3/2)\Delta T(\infty) \quad (3.84)$$

e  $\Theta_\alpha^K$  deve satisfazer a equação

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} \Theta_\alpha^K(\tau, \mathbf{c}) + \sigma_\alpha \Theta_\alpha^K(\tau, \mathbf{c}) = \sigma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{ \Theta_1^K, \Theta_2^K \}(\tau, \mathbf{c}) \quad (3.85)$$

com a condição de contorno para  $c_x > 0$

$$\Theta_\alpha^K(0, c_x, c_y, c_z) = -\Delta N_\alpha(\infty) - 2c_x u(m_\alpha/m_1)^{1/2} - (c^2 - 3/2)\Delta T(\infty) \quad (3.86)$$

e a condição no infinito

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Theta_\alpha^K(\tau, \mathbf{c}) = 0. \quad (3.87)$$

Em termos da definição dada pela Eq. (3.83), as quantidades de interesse são reescritas de forma que as perturbações de densidade são expressas agora como

$$\Delta N_\alpha(\tau) = \Delta N_\alpha(\infty) + \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} \Theta_\alpha^K(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z, \quad (3.88)$$

as perturbações de temperatura

$$\Delta T_\alpha(\tau) = \Delta T(\infty) + \frac{2}{3} \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 3/2) \Theta_\alpha^K(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z \quad (3.89)$$

e os fluxos de calor

$$Q_\alpha(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 5/2) \Theta_\alpha^K(\tau, \mathbf{c}) c_x dc_x dc_y dc_z. \quad (3.90)$$

De acordo com a Eq. (3.60) os fluxos mássicos independem da variável espacial. Assim, substituindo a Eq. (3.80) na Eq. (3.58) encontra-se para os fluxos de massa

$$U_\alpha = u(m_\alpha/m_1)^{1/2}. \quad (3.91)$$

Continuando, assim como foi feito no capítulo 2 e na Ref. [Scherer e Barichello, 2008] para o caso de um gás, deseja-se calcular para uma mistura binária os saltos de densidade e temperatura na interface, usualmente associados com as formulações de condições de contorno

para o regime contínuo [Sone, 2002; Yasuda et al., 2005]. Dessa forma segue-se Pao [Pao, 1971a] e define-se estas quantidades em termos das perturbações na interface (Eqs. (3.88) e (3.89))

$$(\delta\rho_\alpha)_{micro} = -\Delta N_\alpha(0) \quad (3.92)$$

e

$$(\delta T_\alpha)_{micro} = -\Delta T_\alpha(0). \quad (3.93)$$

Pao [Pao, 1971a] também define, para o caso de um gás, os chamados “macro” saltos, onde a idéia é usar apenas a parte assintótica das perturbações de densidade e temperatura para definir os saltos. Assim, usando apenas a parte assintótica das Eqs. (3.88) e (3.89), tem-se para uma mistura de dois gases

$$(\delta\rho_\alpha)_{macro} = -\Delta N_\alpha(0)_{asy} = -\Delta N_\alpha(\infty) \quad (3.94)$$

e

$$(\delta T_\alpha)_{macro} = -\Delta T_\alpha(0)_{asy} = -\Delta T(\infty). \quad (3.95)$$

Na próxima seção será introduzida uma notação matricial a fim de simplificar a formulação e resolução dos problemas.

### 3.2 Reformulação

Como as quantidades de interesse a serem calculadas, Eqs. (3.56) a (3.59), são definidas em termos de momentos das funções  $h_\alpha$ , serão construídos problemas mais simples, para estes momentos, que facilitam a resolução do problema original. Assim, seguindo as Refs. [Siewert, 2005] e [Garcia e Siewert, 2004], define-se

$$g_{2\alpha-1}(\tau, c_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) \hat{h}_\alpha(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z \quad (3.96)$$

e

$$g_{2\alpha}(\tau, c_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) \hat{h}_\alpha(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z, \quad (3.97)$$

para  $\alpha = 1, 2$ , onde

$$\phi_1(c_y, c_z) = \pi^{-1} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \quad (3.98)$$



e

$$\phi_2(c_y, c_z) = \pi^{-1}(c_y^2 + c_z^2 - 1)e^{-(c_y^2 + c_z^2)}. \quad (3.99)$$

Dessa forma, para o problema do reverso de temperatura (seção 3.1.1) multiplica-se sucessivamente a Eq. (3.55) por  $\phi_1(c_y, c_z)$  e  $\phi_2(c_y, c_z)$  e integra-se as equações resultantes para todo  $c_y$  e  $c_z$ . Considerando  $\hat{h}_\alpha = h_\alpha$  nas Eqs. (3.96) e (3.97) e introduzindo a nova notação  $c_x = \xi$ , obtém-se quatro equações de balanço acopladas que podem ser escritas na forma matricial como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathbf{\Gamma} \mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{\Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (3.100)$$

onde

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} g_1(\tau, \xi) \\ g_2(\tau, \xi) \\ g_3(\tau, \xi) \\ g_4(\tau, \xi) \end{bmatrix}, \quad (3.101)$$

$$\mathbf{\Gamma} = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_2\} \quad (3.102)$$

e

$$\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2}. \quad (3.103)$$

Em relação a Eq. (3.100), seguindo Siewert [Siewert, 2005] as componentes  $k_{i,j}(\xi', \xi)$  da matriz  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  de dimensão  $4 \times 4$  do núcleo de espalhamento são dadas por

$$k_{1,1}(\xi', \xi) = 1 + f_{1,1}(\xi', \xi) \xi' \xi + (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)} + 2\varpi_1](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \quad (3.104)$$

$$k_{1,2}(\xi', \xi) = [(4/5)\beta_1(\xi^2 - 3/2) - \eta_{1,2}^{(2)}] \xi' \xi + (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)} - \varpi_1](\xi^2 - 1/2), \quad (3.105)$$

$$k_{1,3}(\xi', \xi) = f_{1,3}(\xi', \xi) \xi' \xi + (4/3)[r^* \eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \quad (3.106)$$

$$k_{1,4}(\xi', \xi) = [r^3 \eta_{1,2}^{(2)} + (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}](\xi^2 - 3/2) \xi' \xi + (2/3)[2r^* \eta_{1,2}^{(1)} - \eta_{1,2}^{(4)}](\xi^2 - 1/2), \quad (3.107)$$

$$k_{2,1}(\xi', \xi) = [(4/5)\beta_1(\xi'^2 - 3/2) - \eta_{1,2}^{(2)}] \xi' \xi + (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)} - \varpi_1](\xi'^2 - 1/2), \quad (3.108)$$

$$k_{2,2}(\xi', \xi) = (2/3)[1 - 2r^*\eta_{1,2}^{(1)}] + (1/3)\varpi_1 + (4/5)\beta_1\xi'\xi, \quad (3.109)$$

$$k_{2,3}(\xi', \xi) = [r\eta_{1,2}^{(2)} + (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(\xi'^2 - 3/2)]\xi'\xi + (2/3)[2r^*\eta_{1,2}^{(1)} - \eta_{1,2}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2), \quad (3.110)$$

$$k_{2,4}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}\xi'\xi + (1/3)[4r^*\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(4)}], \quad (3.111)$$

$$k_{3,1}(\xi', \xi) = f_{3,1}(\xi', \xi)\xi'\xi + (4/3)[s^*\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \quad (3.112)$$

$$k_{3,2}(\xi', \xi) = [s^3\eta_{2,1}^{(2)} + (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(\xi^2 - 3/2)]\xi'\xi + (2/3)[2s^*\eta_{2,1}^{(1)} - \eta_{2,1}^{(4)}](\xi^2 - 1/2), \quad (3.113)$$

$$k_{3,3}(\xi', \xi) = 1 + f_{3,3}(\xi', \xi)\xi'\xi + (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)} + 2\varpi_2](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \quad (3.114)$$

$$k_{3,4}(\xi', \xi) = [(4/5)\beta_2(\xi^2 - 3/2) - \eta_{2,1}^{(2)}]\xi'\xi + (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)} - \varpi_2](\xi^2 - 1/2), \quad (3.115)$$

$$k_{4,1}(\xi', \xi) = [s\eta_{2,1}^{(2)} + (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(\xi'^2 - 3/2)]\xi'\xi + (2/3)[2s^*\eta_{2,1}^{(1)} - \eta_{2,1}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2), \quad (3.116)$$

$$k_{4,2}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}\xi'\xi + (1/3)[4s^*\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(4)}], \quad (3.117)$$

$$k_{4,3}(\xi', \xi) = [(4/5)\beta_2(\xi'^2 - 3/2) - \eta_{2,1}^{(2)}]\xi'\xi + (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)} - \varpi_2](\xi'^2 - 1/2) \quad (3.118)$$

e

$$k_{4,4}(\xi', \xi) = (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)}] + (1/3)\varpi_2 + (4/5)\beta_2\xi'\xi, \quad (3.119)$$

com

$$f_{1,1}(\xi', \xi) = 2[1 - \eta_{1,2}^{(1)}] - \eta_{1,2}^{(2)}(\xi'^2 + \xi^2 - 3) + (4/5)\beta_1(\xi'^2 - 3/2)(\xi^2 - 3/2), \quad (3.120)$$

$$f_{1,3}(\xi', \xi) = 2r\eta_{1,2}^{(1)} + r\eta_{1,2}^{(2)}[r^2(\xi'^2 - 3/2) + \xi^2 - 3/2] + (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(\xi'^2 - 3/2)(\xi^2 - 3/2), \quad (3.121)$$

$$f_{3,1}(\xi', \xi) = 2s\eta_{2,1}^{(1)} + s\eta_{2,1}^{(2)}[s^2(\xi'^2 - 3/2) + \xi^2 - 3/2] + (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(\xi'^2 - 3/2)(\xi^2 - 3/2) \quad (3.122)$$

e

$$f_{3,3}(\xi', \xi) = 2[1 - \eta_{2,1}^{(1)}] - \eta_{2,1}^{(2)}(\xi'^2 + \xi^2 - 3) + (4/5)\beta_2(\xi'^2 - 3/2)(\xi^2 - 3/2). \quad (3.123)$$

Para estabelecer a forma matricial das condições de contorno e das quantidades de interesse em termos do problema  $\mathbf{G}$ , usa-se novamente as projeções definidas nas Eqs. (3.96) e (3.97). A seguir este procedimento é mostrado detalhadamente para cada um dos problemas resolvidos neste capítulo.

### 3.2.1 Reverso de Temperatura

Seguindo o procedimento mostrado anteriormente e usando as Eqs. (3.96) a (3.99), as condições de contorno dadas pelas Eqs. (3.65) e (3.66) são reescritas, para  $\xi > 0$ , como

$$\mathbf{G}(-a, \xi) = - \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 + \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ \hat{\beta}_2 + \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \delta \quad (3.124)$$

e

$$\mathbf{G}(a, -\xi) = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 + \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ \hat{\beta}_2 + \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \delta. \quad (3.125)$$

Entretanto, de acordo com a decomposição dada pela Eq. (3.67), que introduz problemas para  $h_\alpha^1$  e  $h_\alpha^2$ , as Eqs. (3.124) e (3.125) não são usadas como condições de contorno vetoriais. É conveniente usar as projeções definidas pelas Eqs. (3.96) e (3.97) nas Eqs. (3.68) a (3.71) e com isso obter, para  $\xi > 0$ , as condições de contorno

$$\mathbf{G}^1(-a, \xi) = - \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.126)$$

$$\mathbf{G}^1(a, -\xi) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.127)$$

$$\mathbf{G}^2(-a, \xi) = - \begin{bmatrix} \xi^2 + 1 \\ 1 \\ \xi^2 + 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.128)$$

e

$$\mathbf{G}^2(a, -\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 + 1 \\ 1 \\ \xi^2 + 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.129)$$

Usando novamente as projeções dadas pelas Eqs. (3.96) e (3.97), as quantidades de interesse também são expressas na forma vetorial. Dessa forma a solução do problema  $\mathbf{G}$ , para cada um dos dois conjuntos de condições de contorno ( $l = 1, 2$ ), é usada para calcular na Eq. (3.72) as perturbações de densidade

$$\Delta \mathbf{N}^l(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{G}^l(\tau, \xi) d\xi, \quad (3.130)$$

na Eq. (3.73) as perturbações de temperatura

$$\Delta \mathbf{T}^l(\tau) = \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi^2 - 1/2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{G}^l(\tau, \xi) d\xi, \quad (3.131)$$

os fluxos de massa na Eq. (3.74)

$$\mathbf{U}^l = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{G}^l(\tau, \xi) \xi d\xi \quad (3.132)$$

e, na Eq. (3.75), os fluxos de calor

$$\mathbf{Q}^l(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi^2 - 3/2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{G}^l(\tau, \xi) \xi d\xi, \quad (3.133)$$

onde, nas Eqs. (3.130) a (3.133), os vetores  $\Delta \mathbf{N}^l(\tau)$ ,  $\Delta \mathbf{T}^l(\tau)$ ,  $\mathbf{U}^l$  e  $\mathbf{Q}^l(\tau)$  possuem, respectivamente, as componentes  $\Delta N_\alpha^l(\tau)$ ,  $\Delta T_\alpha^l(\tau)$ ,  $U_\alpha^l$  e  $Q_\alpha^l(\tau)$ , para  $\alpha = 1, 2$ .

### 3.2.2 Evaporação/Condensação em Semi-Espaço

A derivação do problema  $\mathbf{G}$  para resolver o problema de evaporação/condensação em semi-espaco é baseada na Eq. (3.85) com condições de contorno dadas pelas Eqs. (3.86) e (3.87). Porém, considera-se nas Eqs. (3.96) e (3.97) que  $\hat{h}_\alpha = \Theta_\alpha^K$ . Assim, multiplicando as Eqs. (3.85) a (3.87) sucessivamente pelas expressões dadas nas Eqs. (3.98) e (3.99) e integrando as equações resultantes para todo  $c_y$  e  $c_z$ , encontra-se o problema  $\mathbf{G}$  definido pela Eq. (3.100) agora com a condição de contorno para  $\xi > 0$

$$\mathbf{G}(0, \xi) = -\Delta N_1(\infty)\mathbf{\Omega}_1 - \Delta N_2(\infty)\mathbf{\Omega}_2 - 2u\mathbf{\Omega}_3(\xi) - \Delta T(\infty)\mathbf{\Omega}_4(\xi), \quad (3.134)$$

onde

$$\mathbf{\Omega}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{\Omega}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{\Omega}_3(\xi) = \begin{bmatrix} \xi \\ 0 \\ s\xi \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{\Omega}_4(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.135)$$

Para o infinito encontra-se

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{0}. \quad (3.136)$$

De acordo com as Eqs. (3.88) a (3.91), as perturbações de densidade e temperatura são dadas, respectivamente, por

$$\Delta \mathbf{N}(\tau) = \begin{bmatrix} \Delta N_1(\infty) \\ \Delta N_2(\infty) \end{bmatrix} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi \quad (3.137)$$

e

$$\Delta \mathbf{T}(\tau) = \Delta T(\infty) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi^2 - 1/2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi. \quad (3.138)$$

Os fluxos de massa e de calor são dados, respectivamente, por

$$\mathbf{U} = u \begin{bmatrix} 1 \\ s \end{bmatrix} \quad (3.139)$$

e

$$\mathbf{Q}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi^2 - 3/2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{G}(\tau, \xi) \xi d\xi, \quad (3.140)$$

onde nas Eqs. (3.137) a (3.140) os vetores  $\Delta\mathbf{N}(\tau)$ ,  $\Delta\mathbf{T}(\tau)$ ,  $\mathbf{U}$  e  $\mathbf{Q}(\tau)$  possuem, respectivamente, as componentes  $\Delta N_\alpha(\tau)$ ,  $\Delta T_\alpha(\tau)$ ,  $U_\alpha$  e  $Q_\alpha(\tau)$ , para  $\alpha = 1, 2$ . Na próxima seção é desenvolvida a solução em ordenadas discretas do problema  $\mathbf{G}$ .

### 3.3 Solução em Ordenadas Discretas

Neste capítulo novamente é usado o método ADO [Barichello e Siewert, 1999b] para construir a solução dos problemas. Assim, primeiramente notando na Eq. (3.103) que a função característica  $\psi(\xi)$  é uma função par, reescreve-se a Eq. (3.100) como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathbf{\Gamma} \mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{\Gamma} \int_0^\infty \psi(\xi') [\mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') + \mathbf{K}(-\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, -\xi')] d\xi'. \quad (3.141)$$

Introduzindo um esquema de quadratura “half-range” no intervalo  $[0, \infty)$  pode-se aproximar o termo integral da equação acima da forma

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathbf{\Gamma} \mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{\Gamma} \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \xi) \mathbf{G}(\tau, -\xi_k)]. \quad (3.142)$$

Aqui  $\xi_k$  e  $w_k$  são, respectivamente, os  $N$  pontos e pesos do esquema (arbitrário) de quadratura. Calculando a Eq. (3.142) em  $\xi = \pm \xi_i$ , para  $i = 1, \dots, N$ , obtém-se a versão em ordenadas discretas da Eq. (3.142)

$$\pm \xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) + \mathbf{\Gamma} \mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) = \mathbf{\Gamma} \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{G}(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{G}(\tau, -\xi_k)], \quad (3.143)$$

para a qual procura-se soluções da forma

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) e^{-\tau/\nu}, \quad (3.144)$$

onde

$$\mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \begin{bmatrix} \Phi_1(\nu, \xi) \\ \Phi_2(\nu, \xi) \\ \Phi_3(\nu, \xi) \\ \Phi_4(\nu, \xi) \end{bmatrix}. \quad (3.145)$$

Assim, substituindo a Eq. (3.144) na Eq. (3.143) obtém-se, para  $i = 1, \dots, N$ ,

$$\left[ \mathbf{I} \mp \frac{\xi_i}{\nu} \mathbf{\Gamma}^{-1} \right] \mathbf{\Phi}(\nu, \pm \xi_i) = \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{\Phi}(\nu, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{\Phi}(\nu, -\xi_k)] \quad (3.146)$$

e pode-se escrever a equação acima na forma matricial como

$$(\mathbf{I} - \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_+(\nu) = \mathbf{W}(+, +)\Phi_+(\nu) + \mathbf{W}(-, +)\Phi_-(\nu) \quad (3.147)$$

e

$$(\mathbf{I} + \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_-(\nu) = \mathbf{W}(+, -)\Phi_+(\nu) + \mathbf{W}(-, -)\Phi_-(\nu), \quad (3.148)$$

onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade  $4N \times 4N$ ,  $\mathbf{M}$  é a matriz  $4N \times 4N$  definida como

$$\mathbf{M} = \text{diag} \left\{ \frac{\xi_1}{\sigma_1}, \dots, \frac{\xi_N}{\sigma_1}, \frac{\xi_1}{\sigma_1}, \dots, \frac{\xi_N}{\sigma_1}, \frac{\xi_1}{\sigma_2}, \dots, \frac{\xi_N}{\sigma_2}, \frac{\xi_1}{\sigma_2}, \dots, \frac{\xi_N}{\sigma_2} \right\} \quad (3.149)$$

e  $\Phi_{\pm}(\nu)$  são os vetores  $4N \times 1$

$$\Phi_{\pm}(\nu) = [\Phi_{1\pm}(\nu) \quad \Phi_{2\pm}(\nu) \quad \Phi_{3\pm}(\nu) \quad \Phi_{4\pm}(\nu)]^T \quad (3.150)$$

cujas componentes são os subvetores  $N \times 1$

$$\Phi_{i\pm}(\nu) = [\Phi_i(\nu, \pm\xi_1) \cdots \Phi_i(\nu, \pm\xi_N)]^T, \quad (3.151)$$

para  $i = 1, 2, 3, 4$ .

Continuando,  $T$  denota a operação de transposição,  $\mathbf{W}(\pm, \pm)$  são as matrizes  $4N \times 4N$

$$\mathbf{W}(\pm, \pm) = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{11}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{12}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{13}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{14}(\pm, \pm) \\ \mathbf{W}_{21}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{22}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{23}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{24}(\pm, \pm) \\ \mathbf{W}_{31}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{32}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{33}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{34}(\pm, \pm) \\ \mathbf{W}_{41}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{42}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{43}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{44}(\pm, \pm) \end{bmatrix} \quad (3.152)$$

com componentes que são submatrizes  $N \times N$  definidas como

$$[\mathbf{W}_{mn}(\pm, \pm)]_{i,j} = w_j \psi(\xi_j) k_{m,n}(\pm\xi_j, \pm\xi_i) \quad (3.153)$$

para  $m, n = 1, 2, 3, 4$  e  $i, j = 1, \dots, N$ . As componentes  $k_{m,n}$  são dadas pelas Eqs. (3.104) a (3.123). Por estas equações nota-se que a matriz  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  da Eq. (3.100) é tal que

$$\mathbf{K}(\xi', \xi) = \mathbf{K}(-\xi', -\xi) \quad \text{e} \quad \mathbf{K}(-\xi', \xi) = \mathbf{K}(\xi', -\xi). \quad (3.154)$$

Portanto, é possível notar na Eq. (3.153) que

$$\mathbf{W}(+, +) = \mathbf{W}(-, -) \quad \text{e} \quad \mathbf{W}(+, -) = \mathbf{W}(-, +). \quad (3.155)$$

Assim, define-se as matrizes

$$\mathbf{W}_+ = \mathbf{W}(+, +) = \mathbf{W}(-, -) \quad \text{e} \quad \mathbf{W}_- = \mathbf{W}(+, -) = \mathbf{W}(-, +) \quad (3.156)$$

e reescreve-se as Eqs. (3.147) e (3.148) como

$$(\mathbf{I} - \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_+(\nu) = \mathbf{W}_+ \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}_- \Phi_-(\nu) \quad (3.157)$$

e

$$(\mathbf{I} + \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_-(\nu) = \mathbf{W}_- \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}_+ \Phi_-(\nu). \quad (3.158)$$

Definindo

$$\hat{\mathbf{U}} = \Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu), \quad (3.159)$$

onde  $\Phi_+(\nu)$  e  $\Phi_-(\nu)$  são os vetores  $4N \times 1$  dados pela Eq. (3.150), pode-se somar e subtrair as Eqs. (3.157) e (3.158) de modo a obter o problema de autovalor

$$\mathbf{A} \hat{\mathbf{X}} = \lambda \hat{\mathbf{X}}. \quad (3.160)$$

Aqui  $\mathbf{A}$  é a matriz de dimensão  $4N \times 4N$

$$\mathbf{A} = (\mathbf{W}_+ - \mathbf{W}_- - \mathbf{I}) \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{W}_+ + \mathbf{W}_- - \mathbf{I}) \mathbf{M}^{-1}, \quad (3.161)$$

$\hat{\mathbf{X}}$  é o vetor  $4N \times 1$

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{M} \hat{\mathbf{U}}, \quad (3.162)$$

onde  $\mathbf{M}$  é a matriz dada pela Eq. (3.149), e os autovalores se relacionam com as constantes de separação como

$$\lambda = \nu^{-2}. \quad (3.163)$$

Usando os  $4N$  autovalores (constantes de separação  $\nu_j$ ) e os  $4N$  autovetores  $\hat{\mathbf{X}}(\nu_j)$  dados pela Eq. (3.160) pode-se expressar as soluções elementares escritas nas Eqs. (3.144) e (3.150) da forma

$$\Phi_+(\nu_j) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} [\mathbf{I} - \nu_j (\mathbf{W}_+ + \mathbf{W}_- - \mathbf{I}) \mathbf{M}^{-1}] \hat{\mathbf{X}}(\nu_j) \quad (3.164)$$



e

$$\Phi_{-}(\nu_j) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} [\mathbf{I} + \nu_j(\mathbf{W}_{+} + \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}] \widehat{\mathbf{X}}(\nu_j), \quad (3.165)$$

onde os vetores  $\Phi_{+}(\nu_j)$  correspondem a  $\Phi(\nu_j, \xi_i)$  dados na Eq. (3.145), para  $i = 1, \dots, N$ . Analogamente  $\Phi_{-}(\nu_j)$  correspondem a  $\Phi(\nu_j, -\xi_i)$ . Desta forma pode-se escrever a solução geral em ordenadas discretas do problema dado pela Eq. (3.143) como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-(a-\tau)/\nu_j}]. \quad (3.166)$$

Um aspecto que merece ser destacado em relação ao problema de autovalor encontrado neste capítulo é que ele tem a mesma forma do problema de autovalor construído no capítulo anterior com os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS, e também nas Refs. [Scherer et al., 2009a] e [Scherer et al., 2009b]. Também é importante salientar que o problema de autovalor obtido aqui possui uma expressão matricial mais simples que o encontrado nas Refs. [Siewert, 2005] e [Knackfuss e Barichello, 2006], onde foi resolvido o problema do salto de temperatura, e na Ref. [Garcia e Siewert, 2004], onde foi resolvido o problema de transferência de calor, ambos com o modelo McCormack. Acredita-se que esta é uma das relevantes contribuições deste trabalho ao se construir uma solução unificada para os problemas do reverso de temperatura e de evaporação/condensação em semi-espaço.

Como estes problemas são conservativos, sabe-se que alguns autovalores se aproximam de zero (constantes de separação tendem ao infinito) quando  $N$  tende ao infinito. Assim como ocorre nas Refs. [Siewert, 2005], [Garcia e Siewert, 2004] e [Knackfuss e Barichello, 2006], para os dois problemas que estão sendo resolvidos neste capítulo encontra-se três autovalores com este comportamento. Por isso é necessário acrescentar seis soluções exatas à solução em ordenadas discretas dada pela Eq. (3.166) e então reescrevê-la como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \mathbf{G}^*(\tau, \pm\xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-(a-\tau)/\nu_j}], \quad (3.167)$$

para  $i = 1, \dots, N$ , onde

$$\mathbf{G}^*(\tau, \xi) = A_1 \mathbf{G}_1 + A_2 \mathbf{G}_2 + A_3 \mathbf{G}_3(\xi) + B_1 \mathbf{G}_4(\xi) + B_2 \mathbf{G}_5(\tau, \xi) + B_3 \mathbf{G}_6(\tau, \xi). \quad (3.168)$$

Como a equação íntegro-diferencial (Eq. (3.100)) para os problemas tratados aqui é a mesma obtida nos problemas do salto de temperatura [Siewert, 2005; Knackfuss e Barichello, 2006] e de transferência de calor [Garcia e Siewert, 2004], pode-se utilizar também as soluções exatas

mostradas nestas referências. Assim, na Eq. (3.168) tem-se

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_3(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{G}_4(\xi) = \begin{bmatrix} r\xi \\ 0 \\ \xi \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.169)$$

onde  $r = (m_1/m_2)^{1/2}$ ,

$$\mathbf{G}_5(\tau, \xi) = \tau \mathbf{H}_1(\xi) + \mathbf{F}_1(\xi) \quad (3.170)$$

e

$$\mathbf{G}_6(\tau, \xi) = \tau \mathbf{H}_2(\xi) + \mathbf{F}_2(\xi). \quad (3.171)$$

Aqui

$$\mathbf{H}_1(\xi) = \begin{bmatrix} -1 + c_1(\xi^2 - 1/2) \\ c_1 \\ c_1(\xi^2 - 1/2) \\ c_1 \end{bmatrix} \quad (3.172)$$

e

$$\mathbf{H}_2(\xi) = \begin{bmatrix} c_2(\xi^2 - 1/2) \\ c_2 \\ -1 + c_2(\xi^2 - 1/2) \\ c_2 \end{bmatrix}, \quad (3.173)$$

onde  $c_1 = n_1/(n_1 + n_2)$ ,  $c_2 = n_2/(n_1 + n_2)$  e  $\mathbf{F}_1(\xi)$ ,  $\mathbf{F}_2(\xi)$  são funções a serem determinadas.

Não se encontraram expressões explícitas para  $\mathbf{F}_1(\xi)$  e  $\mathbf{F}_2(\xi)$ , mas, seguindo Siewert [Siewert, 2005], cada uma destas funções pode ser definida em termos da solução de um sistema linear de equações algébricas. Assim, substituindo as Eqs. (3.170) e (3.171) na Eq. (3.100) encontra-se as equações integrais

$$\mathbf{F}_\beta(\xi) = -\xi \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{H}_\beta(\xi) + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{F}_\beta(\xi') d\xi', \quad (3.174)$$

para  $\beta = 1, 2$ . Seguindo Siewert [Siewert, 2005] novamente, as funções  $\mathbf{F}_\beta(\xi)$ , para  $\beta = 1, 2$ ,

podem ser expressas como

$$\mathbf{F}_\beta(\xi) = \sum_{\alpha=0}^3 P_\alpha(\xi) \mathbf{F}_{\beta,\alpha}, \quad (3.175)$$

onde os vetores  $\mathbf{F}_{\beta,\alpha}$  são constantes e os polinômios ortogonais  $P_\alpha(\xi)$  são dados por

$$P_0(\xi) = 1, \quad P_1(\xi) = \xi, \quad P_2(\xi) = \xi^2 - 1/2 \quad \text{e} \quad P_3(\xi) = \xi(\xi^2 - 3/2). \quad (3.176)$$

Agora substitui-se a Eq. (3.175) na Eq. (3.174), multiplica-se a equação resultante por  $\psi(\xi)P_k(\xi)$ , para  $k = 0, 1, 2, 3$ , e, integrando as equações resultantes sobre todo  $\xi$ , obtém-se dois sistemas lineares com 16 equações e 16 incógnitas (mas com “rank” 12) para as componentes dos vetores  $\mathbf{F}_{\beta,\alpha}$ . Como estes sistemas são “rank” deficientes, soluções existem apenas para certos termos não homogêneos. Continuando, seguindo Siewert [Siewert, 2005] pode-se escrever as funções  $\mathbf{F}_\beta(\xi)$  como

$$\mathbf{F}_\beta(\xi) = \mathbf{U}_\beta P_1(\xi) + \mathbf{V}_\beta P_3(\xi), \quad (3.177)$$

onde os vetores constantes  $\mathbf{U}_\beta$  e  $\mathbf{V}_\beta$ , para  $\beta = 1, 2$ , são as soluções dos sistemas lineares com 9 equações e 8 incógnitas (mas com “rank” 8) definidos por

$$(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{A}})\mathbf{U}_1 - \hat{\mathbf{C}}\mathbf{V}_1 = \begin{bmatrix} c_2/\sigma_1 & -c_1/\sigma_1 & -c_1/\sigma_2 & -c_1/\sigma_2 \end{bmatrix}^T, \quad (3.178)$$

$$(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{D}})\mathbf{V}_1 - \hat{\mathbf{B}}\mathbf{U}_1 = \begin{bmatrix} -c_1/\sigma_1 & 0 & -c_1/\sigma_2 & 0 \end{bmatrix}^T \quad (3.179)$$

e

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{U}_1 = 0, \quad (3.180)$$

para  $\beta = 1$ , e

$$(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{A}})\mathbf{U}_2 - \hat{\mathbf{C}}\mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} -c_2/\sigma_1 & -c_2/\sigma_1 & c_1/\sigma_2 & -c_2/\sigma_2 \end{bmatrix}^T, \quad (3.181)$$

$$(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{D}})\mathbf{V}_2 - \hat{\mathbf{B}}\mathbf{U}_2 = \begin{bmatrix} -c_2/\sigma_1 & 0 & -c_2/\sigma_2 & 0 \end{bmatrix}^T \quad (3.182)$$

e

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{U}_2 = 0, \quad (3.183)$$

para  $\beta = 2$ . Nas expressões acima  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade, o sobrescrito  $T$  denota a operação

de transposição e

$$\widehat{\mathbf{A}} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \psi(\xi) \mathbf{K}(\xi', \xi) P_1(\xi') P_1(\xi) d\xi' d\xi, \quad (3.184)$$

$$\widehat{\mathbf{B}} = (4/3) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \psi(\xi) \mathbf{K}(\xi', \xi) P_1(\xi') P_3(\xi) d\xi' d\xi, \quad (3.185)$$

$$\widehat{\mathbf{C}} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \psi(\xi) \mathbf{K}(\xi', \xi) P_3(\xi') P_1(\xi) d\xi' d\xi \quad (3.186)$$

e

$$\widehat{\mathbf{D}} = (4/3) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \psi(\xi) \mathbf{K}(\xi', \xi) P_3(\xi') P_3(\xi) d\xi' d\xi. \quad (3.187)$$

Ainda seguindo Siewert [Siewert, 2005], as Eqs. (3.184) a (3.187) podem ser reescritas na forma final

$$\widehat{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} 1 - \eta_{1,2}^{(1)} & -(1/2)\eta_{1,2}^{(2)} & r\eta_{1,2}^{(1)} & (r^3/2)\eta_{1,2}^{(2)} \\ -(1/2)\eta_{1,2}^{(2)} & (2/5)\beta_1 & (r/2)\eta_{1,2}^{(2)} & (2/5)\eta_{1,2}^{(6)} \\ s\eta_{2,1}^{(1)} & (s^3/2)\eta_{2,1}^{(2)} & 1 - \eta_{2,1}^{(1)} & -(1/2)\eta_{2,1}^{(2)} \\ (s/2)\eta_{2,1}^{(2)} & (2/5)\eta_{2,1}^{(6)} & -(1/2)\eta_{2,1}^{(2)} & (2/5)\beta_2 \end{bmatrix}, \quad (3.188)$$

$$\widehat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} -(1/2)\eta_{1,2}^{(2)} & (2/5)\beta_1 & (r/2)\eta_{1,2}^{(2)} & (2/5)\eta_{1,2}^{(6)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ (s/2)\eta_{2,1}^{(2)} & (2/5)\eta_{2,1}^{(6)} & -(1/2)\eta_{2,1}^{(2)} & (2/5)\beta_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.189)$$

$$\widehat{\mathbf{C}} = \begin{bmatrix} -(3/4)\eta_{1,2}^{(2)} & 0 & (3r^3/4)\eta_{1,2}^{(2)} & 0 \\ (3/5)\beta_1 & 0 & (3/5)\eta_{1,2}^{(6)} & 0 \\ (3s^3/4)\eta_{2,1}^{(2)} & 0 & -(3/4)\eta_{2,1}^{(2)} & 0 \\ (3/5)\eta_{2,1}^{(6)} & 0 & (3/5)\beta_2 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.190)$$

e

$$\widehat{\mathbf{D}} = \begin{bmatrix} (3/5)\beta_1 & 0 & (3/5)\eta_{1,2}^{(6)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ (3/5)\eta_{2,1}^{(6)} & 0 & (3/5)\beta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.191)$$

Estabelecidas as soluções exatas, o próximo passo é determinar, na Eq. (3.167), os  $8N$  coeficientes  $A_j$  e  $B_j$ ,  $j = 1, \dots, 4N$ , para os problemas do reverso de temperatura e de evaporação/condensação em semi-espaço. Isto será feito na próxima seção usando as condições de contorno.

### 3.4 Quantidades de Interesse

#### 3.4.1 Reverso de Temperatura

Devido à decomposição proposta na Eq. (3.67) é necessário resolver de fato dois problemas. Assim, considera-se a versão em ordenadas discretas das condições de contorno dadas pelas Eqs. (3.126) a (3.129)

$$\mathbf{G}^1(-a, \xi_i) = - \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.192)$$

$$\mathbf{G}^1(a, -\xi_i) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.193)$$

$$\mathbf{G}^2(-a, \xi_i) = - \begin{bmatrix} \xi_i^2 + 1 \\ 1 \\ \xi_i^2 + 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.194)$$

e

$$\mathbf{G}^2(a, -\xi_i) = \begin{bmatrix} \xi_i^2 + 1 \\ 1 \\ \xi_i^2 + 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (3.195)$$

onde aplica-se a solução geral em ordenadas discretas dada pela Eq. (3.167). Em cada um dos dois problemas ( $l = 1, 2$ ) encontra-se um sistema linear  $8N \times 8N$ , onde as  $4N$  primeiras equações

são (notando as Eqs. (3.169) a (3.171))

$$A_1^l \mathbf{G}_1 + A_2^l \mathbf{G}_2 + A_3^l \mathbf{G}_3(\xi_i) + B_1^l \mathbf{G}_4(\xi_i) + B_2^l \mathbf{G}_5(-a, \xi_i) + B_3^l \mathbf{G}_6(-a, \xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} [A_j^l \Phi(\nu_j, \xi_i) + B_j^l \Phi(\nu_j, -\xi_i) e^{-2a/\nu_j}] = \mathbf{G}^l(-a, \xi_i) \quad (3.196)$$

e as  $4N$  últimas equações são

$$A_1^l \mathbf{G}_1 + A_2^l \mathbf{G}_2 + A_3^l \mathbf{G}_3(\xi_i) + B_1^l \mathbf{G}_4(-\xi_i) + B_2^l \mathbf{G}_5(a, -\xi_i) + B_3^l \mathbf{G}_6(a, -\xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} [A_j^l \Phi(\nu_j, -\xi_i) e^{-2a/\nu_j} + B_j^l \Phi(\nu_j, \xi_i)] = \mathbf{G}^l(a, -\xi_i), \quad (3.197)$$

para  $i = 1, \dots, N$  e  $l = 1, 2$ , onde  $\mathbf{G}^l(-a, \xi_i)$  e  $\mathbf{G}^l(a, -\xi_i)$  são dadas pelas Eqs. (3.192) a (3.195). Ainda,  $\Phi(\nu_j, \pm \xi_i)$  são definidos nas Eqs. (3.164) e (3.165).

A solução em ordenadas discretas dos dois problemas definidos pela Eq. (3.100) com condições de contorno dadas, respectivamente, pelas Eqs. (3.126) a (3.129) está agora completamente estabelecida. Assim, aplica-se a Eq. (3.167) nas Eq. (3.130) e (3.131) e encontra-se para as perturbações de densidade

$$\Delta \mathbf{N}^l(\tau) = \begin{bmatrix} A_1^l - B_2^l \tau \\ A_2^l - B_3^l \tau \end{bmatrix} + \sum_{j=4}^{4N} [A_j^l e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j^l e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{X}(\nu_j) \quad (3.198)$$

e para as perturbações de temperatura

$$\Delta \mathbf{T}^l(\tau) = [A_3^l + (c_1 B_2^l + c_2 B_3^l) \tau] \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{3} \sum_{j=4}^{4N} [A_j^l e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j^l e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{Y}(\nu_j), \quad (3.199)$$

onde

$$\mathbf{X}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (3.200)$$

e

$$\mathbf{Y}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} \xi_k^2 - 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_k^2 - 1/2 & 1 \end{bmatrix} [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (3.201)$$

Continuando, usando a Eq. (3.132) encontra-se os fluxos mássicos

$$\mathbf{U}^l = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} r \\ 1 \end{bmatrix} B_1^l + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} (B_2^l \mathbf{U}_1 + B_3^l \mathbf{U}_2) \quad (3.202)$$

e com a Eq. (3.133) encontra-se os fluxos de calor

$$\mathbf{Q}^l(\tau) = \mathbf{Q}_*^l + \sum_{j=4}^{4N} [A_j^l e^{-(a+\tau)/\nu_j} - B_j^l e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{Z}(\nu_j), \quad (3.203)$$

onde

$$\mathbf{Q}_*^l = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} (B_2^l \mathbf{U}_1 + B_3^l \mathbf{U}_2) + \frac{3}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} (B_2^l \mathbf{V}_1 + B_3^l \mathbf{V}_2) \quad (3.204)$$

e

$$\mathbf{Z}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \xi_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} \xi_k^2 - 3/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_k^2 - 3/2 & 1 \end{bmatrix} [\Phi(\nu_j, \xi_k) - \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (3.205)$$

A Eq. (3.199) pode ser usada para calcular os valores críticos de  $\beta_\alpha^T$  dados pela Eq. (3.76), pois

$$\Delta \mathbf{T}^l(0) = (c_1 B_2^l + c_2 B_3^l) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{2}{3} \sum_{j=4}^{4N} (A_j^l - B_j^l) \frac{e^{-a/\nu_j}}{\nu_j} \mathbf{Y}(\nu_j). \quad (3.206)$$

Assim, substituindo a Eq. (3.206) na Eq. (3.76) encontra-se  $\beta_\alpha^T$ . Continuando, aplicando  $\tau = 0$  na Eq. (3.203) encontra-se

$$\mathbf{Q}^l(0) = \mathbf{Q}_*^l + \sum_{j=4}^{4N} (A_j^l - B_j^l) e^{-a/\nu_j} \mathbf{Z}(\nu_j) \quad (3.207)$$

e usa-se a Eq. (3.207) para calcular os valores críticos  $\beta_\alpha^Q$  dados pela Eq. (3.77).

### 3.4.2 Evaporação/Condensação em Semi-Espaço

Devido ao comportamento imposto no infinito dado pela Eq. (3.136), a solução geral em ordenadas discretas (Eq. (3.167)) é reescrita para este problema como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) = \sum_{j=4}^{4N} A_j \Phi(\nu_j, \pm \xi_i) e^{-\tau/\nu_j}. \quad (3.208)$$

Por outro lado, a versão em ordenadas discretas da condição de contorno para a interface (Eq. (3.134)) é dada por

$$\mathbf{G}(0, \xi_i) = -\Delta N_1(\infty) \boldsymbol{\Omega}_1 - \Delta N_2(\infty) \boldsymbol{\Omega}_2 - 2u \boldsymbol{\Omega}_3(\xi_i) - \Delta T(\infty) \boldsymbol{\Omega}_4(\xi_i). \quad (3.209)$$

Assim, substituindo a Eq. (3.208) na Eq. (3.209) encontra-se um sistema linear  $4N \times 4N$  para  $A_j$ ,  $j = 4, \dots, 4N$ ,  $\Delta N_1(\infty)$ ,  $\Delta N_2(\infty)$  e  $\Delta T(\infty)$ . Cada duas linhas deste sistema são escritas

como

$$\sum_{j=4}^{4N} A_j \Phi(\nu_j, \xi_i) + \Delta N_1(\infty) \Omega_1 + \Delta N_2(\infty) \Omega_2 + \Delta T(\infty) \Omega_4(\xi_i) = -2u \Omega_3(\xi_i), \quad (3.210)$$

para  $i = 1, \dots, N$ .

Após resolver este sistema linear aplica-se a Eq. (3.208) nas Eqs. (3.137), (3.138) e (3.140) e encontra-se as perturbações de densidade

$$\Delta \mathbf{N}(\tau) = \begin{bmatrix} \Delta N_1(\infty) \\ \Delta N_2(\infty) \end{bmatrix} + \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-\tau/\nu_j} \mathbf{X}(\nu_j), \quad (3.211)$$

as perturbações de temperatura

$$\Delta \mathbf{T}(\tau) = \Delta T(\infty) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{3} \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-\tau/\nu_j} \mathbf{Y}(\nu_j) \quad (3.212)$$

e os fluxos de calor

$$\mathbf{Q}(\tau) = \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-\tau/\nu_j} \mathbf{Z}(\nu_j), \quad (3.213)$$

onde os vetores  $\mathbf{X}(\nu_j)$ ,  $\mathbf{Y}(\nu_j)$  e  $\mathbf{Z}(\nu_j)$  são dados pelas Eqs. (3.200), (3.201) e (3.205). Pelas definições expressas nas Eqs. (3.94) e (3.95) pode-se notar que os “macro” saltos na interface são dados pelos primeiros termos das Eqs. (3.211) e (3.212).

### 3.5 Aspectos Computacionais e Resultados Numéricos

Para implementar a solução em ordenadas discretas e determinar as quantidades de interesse o primeiro passo é definir o esquema de quadratura. Dessa forma, de acordo com as Refs. [Siewert e Valougeorgis, 2004a], [Siewert e Valougeorgis, 2004b], [Garcia e Siewert, 2004], [Siewert, 2005], [Garcia e Siewert, 2005] e [Knackfuss e Barichello, 2006], onde outros problemas em dinâmica de gases rarefeitos foram resolvidos com o modelo McCormack e o método ADO, utiliza-se novamente a quadratura de Gauss-Legendre mapeada para o intervalo  $[0, \infty)$  conforme mostrado anteriormente (capítulo 2).

Assim, após ter definido os  $N$  pontos  $\xi_k$  e pesos  $w_k$ , a solução é rápida e fácil de implementar. As etapas desta implementação são as seguintes:

- resolver o problema de autovalor dado pela Eq. (3.160) para obter as constantes de separação  $\nu_j$  e as soluções elementares  $\Phi_{\pm}(\nu_j)$ ;



- resolver os sistemas lineares dados pelas Eqs. (3.178) a (3.183) para obter os vetores  $\mathbf{U}_\beta$  e  $\mathbf{V}_\beta$ , para  $\beta = 1, 2$ , e determinar as soluções exatas  $\mathbf{G}_5(\tau, \xi)$  e  $\mathbf{G}_6(\tau, \xi)$ ;
- resolver os sistemas lineares dados pelas Eqs. (3.196) e (3.197) para o problema em canal e também o sistema dado pela Eq. (3.210) para o problema em semi-espço;
- calcular as perturbações de densidade e temperatura dadas pelas Eqs. (3.198), (3.199), (3.211) e (3.212), bem como os micro saltos (Eqs. (3.92) e (3.93)), os fluxos mássicos (Eq. (3.202)) e os fluxos de calor (Eqs. (3.203) e (3.213)). Ainda, com a solução do sistema linear dado na Eq. (3.210) obtém-se os macro saltos de densidade e temperatura (Eqs. (3.94) e (3.95)).

A fim de gerar resultados numéricos, considera-se os seguintes casos de mistura de gases:

- Caso 1: Ne-Ar:  $m_1 = 20.183$ ,  $m_2 = 39.948$  e  $d_2/d_1 = 1.406$ ;
- Caso 2: He-Xe:  $m_1 = 4.0026$ ,  $m_2 = 131.30$  e  $d_2/d_1 = 2.226$ ;
- Caso 3: He-Ar:  $m_1 = 4.0026$ ,  $m_2 = 39.948$  e  $d_2/d_1 = 1.665$ .

Os dados usados acima para massa e diâmetro de partículas foram consultados nas Refs. [Siewert, 2005] e [Sharipov e Kalempa, 2003], para os Casos 1 e 2, e [Knackfuss e Barichello, 2006] para o Caso 3.

Seguindo Siewert [Siewert, 2005] e Knackfuss e Barichello [Knackfuss e Barichello, 2006], tabula-se os resultados para as três misturas em termos da concentração molar definida em termos do primeiro tipo de partícula como

$$C = \frac{n_1/n_2}{1 + n_1/n_2}. \quad (3.214)$$

Os resultados numéricos mostrados nas Tabelas 3.1 a 3.43 foram obtidos em FORTRAN usando  $N = 80$  pontos de quadratura. Todos os dígitos mostrados são preservados (com a tolerância de mais ou menos 1 no último dígito) variando-se  $N$  até 200. O tempo computacional para resolver o problema em canal ou o problema em semi-espço e obter os resultados das quantidades de interesse, usando um dos casos de mistura e um valor de  $C$ , é de 45 segundos. Estes tempos são iguais para os dois problemas. Foi usado um PC com um processador Pentium IV com 2.66 GHz, 1.5 Gbytes de memória RAM e não se fez nenhuma otimização no programa. A fim de comparar o tempo computacional do método ADO com outras técnicas, na Ref. [Yasuda et al., 2005], onde foi resolvido o problema de semi-espço com a ELB propriamente dita usando

um esquema de diferenças finitas, o tempo necessário para obter os resultados chegou a ser de três horas e meia usando dez CPU's em paralelo.

Continuando, os resultados mostrados neste capítulo não foram obtidos na literatura e por isso não foi possível fazer uma verificação completa. Assim, para testar a solução ADO e a confiabilidade do programa, pode-se verificar se os resultados encontrados com o modelo McCormack, para o caso de uma espécie, são iguais aos resultados do modelo S (com  $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) apresentados no capítulo anterior. Analisando as Eqs. (3.6) a (3.42), a particularização para o caso de uma espécie pode ser obtida de três formas:

- (i): se  $n_1 = 0$  os resultados das quantidades com subscrito 2 geram os resultados para uma espécie de gás (para o problema de semi-espço os resultados são multiplicados por  $(m_2/m_1)^{1/2}$ , de acordo com a Eq. (3.80));
- (ii): se  $n_2 = 0$  os resultados das quantidades com subscrito 1 geram os resultados para uma espécie de gás;
- (iii): se  $m_1 = m_2$  e  $d_1 = d_2$  os resultados das quantidades com subscritos 1 e 2 geram os resultados para uma espécie de gás.

Para os três casos limites acima os resultados do modelo McCormack foram iguais aos resultados do modelo S apresentados no capítulo anterior.

As Tabelas 3.1 a 3.30 mostram os resultados para o problema do reverso de temperatura usando  $C = 0.3$  ou  $C = 0.8$ . Nas Tabelas 3.31 a 3.36 estão os resultados para o problema de evaporação/condensação em semi-espço usando novamente  $C = 0.3$  ou  $C = 0.8$ . Analisando estas tabelas observa-se que, em geral, quanto maior é a razão entre as massas das partículas  $m_2/m_1$  maior é a variação observada nas quantidades de interesse.

Continuando, foram feitas algumas comparações com os resultados encontrados por Yasuda, Takata e Aoki [Yasuda et al., 2005] para os saltos de pressão, concentração e temperatura no problema de semi-espço usando a ELB e um esquema de diferenças finitas. Nesta referência os saltos de pressão, de concentração da espécie  $A$  e de temperatura são definidos, respectivamente, como  $\gamma^*$ ,  $\gamma^A - \gamma^B$  e  $\delta^*$ . Comparando a solução ADO construída neste capítulo com a formulação apresentada na Ref. [Yasuda et al., 2005], tem-se:

- $\gamma^* = \Delta T(\infty) + C\Delta N_1(\infty) + (1 - C)\Delta N_2(\infty)$ ;
- $\gamma^A - \gamma^B = \Delta N_1(\infty) - \Delta N_2(\infty)$ ;

- $\delta^* = \Delta T(\infty)$ .

Os resultados para estas quantidades são mostrados nas Tabelas 3.37 a 3.39. Analisando estas tabelas observa-se que, em geral, existem dois dígitos significativos de concordância entre os resultados do modelo McCormack e os da ELB [Yasuda et al., 2005]. Além disso, nos saltos de pressão  $\gamma^*$  e de temperatura  $\delta^*$  observa-se que quanto maior é a razão entre as massas  $m_2/m_1$  ou menor é a concentração molar  $C$ , mais significativas são as alterações provocadas nestas quantidades. No salto de concentração  $\gamma^A - \gamma^B$  observa-se variações mais significativas quando se aumenta a razão entre as massas  $m_2/m_1$  do que quando se altera a concentração molar  $C$ .

Não foi encontrada a correspondência correta entre a adimensionalização da variável espacial utilizada neste capítulo e a usada na Ref. [Yasuda et al., 2005]. Por isso não foi possível fazer comparações entre as perturbações de densidade e temperatura nem do fluxo de calor.

Para analisar melhor o comportamento dos valores críticos de  $\beta_\alpha^T$  e  $\beta_\alpha^Q$ , as Tabelas 3.40 a 3.43 mostram resultados para estes coeficientes com diferentes razões entre as massas  $m_2/m_1$  e concentrações molares  $C$ . Observa-se que quanto menor é a concentração molar da espécie  $\alpha$ , maior é a influência provocada por mudanças na razão  $m_2/m_1$ .

Nas Figuras 3.1 a 3.4 foram escolhidos alguns casos, baseados nos resultados mostrados na Tabela 3.10, para indicar o fenômeno do reverso de temperatura. Observa-se nas Figuras 3.1 e 3.2 que para  $\hat{\beta}_\alpha = 2.0$  e  $\hat{\beta}_\alpha = 3.0$  (que são menores que os valores críticos  $\beta_1^T = 4.700919$  e  $\beta_2^T = 4.049851$ ) as perturbações de temperatura  $\Delta T_\alpha(\tau)$  são crescentes e, por isso, os gradientes de temperatura  $\Delta T'_\alpha(\tau)$  são positivos indicando que a espécie  $\alpha$  próximo à interface fria (em  $\tau = -1$ ) possui temperatura menor que próximo à interface quente (em  $\tau = 1$ ). Da mesma forma, observa-se que para  $\hat{\beta}_\alpha = 6.0$  e  $\hat{\beta}_\alpha = 8.0$  (que são maiores que os valores críticos de  $\beta_1^T$  e  $\beta_2^T$ ) as perturbações de temperatura  $\Delta T_\alpha(\tau)$  são decrescentes e, conseqüentemente, os gradientes de temperatura  $\Delta T'_\alpha(\tau)$  são negativos indicando que a espécie  $\alpha$  próximo à interface fria (em  $\tau = -1$ ) possui temperatura maior que próximo à interface quente (em  $\tau = 1$ ), observando-se assim o fenômeno do reverso de temperatura, pois o gradiente de temperatura da espécie  $\alpha$  possui sentido contrário à diferença de temperatura imposta pelas interfaces. Nas Figuras 3.3 e 3.4 observa-se que para  $\hat{\beta}_\alpha = 2.0$  e  $\hat{\beta}_\alpha = 3.0$  (que são menores que os valores críticos  $\beta_1^Q = 3.785884$  e  $\beta_2^Q = 3.619043$ ) os fluxos de calor são negativos mostrando que a temperatura da espécie  $\alpha$  próximo à interface quente (em  $\tau = 1$ ) é maior que a temperatura próximo à interface fria (em  $\tau = -1$ ). Para  $\hat{\beta}_\alpha = 6.0$  e  $\hat{\beta}_\alpha = 8.0$  (que são maiores que os valores críticos de  $\beta_1^Q$  e  $\beta_2^Q$ ) os fluxos de calor são positivos indicando que a temperatura da espécie  $\alpha$  próximo à interface fria (em  $\tau = -1$ ) é maior que a temperatura próximo à interface quente (em  $\tau = 1$ )

observando-se assim o fenômeno do reverso de temperatura, pois neste caso o fluxo de calor da espécie  $\alpha$  possui o mesmo sentido da diferença de temperatura imposta pelas interfaces.

Neste capítulo a solução em ordenadas discretas para os problemas do reverso de temperatura e de evaporação/condensação em semi-espço foi construída de forma unificada com o modelo McCormack. No próximo capítulo será abordado o problema de evaporação forte, no qual os aspectos não lineares precisam ser levados em conta e o desenvolvimento da solução em ordenadas discretas apresenta grandes mudanças.

Tabela 3.1 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade para o Caso 1 com  $C = 0.3$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta N_1^1(\tau)$	$\Delta N_2^1(\tau)$	$\Delta N_1^2(\tau)$	$\Delta N_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	2.416654(-2)	1.338731(-2)	1.444038(-2)	-1.517675(-2)
0.2	4.856915(-2)	2.706939(-2)	2.922236(-2)	-2.987939(-2)
0.3	7.346690(-2)	4.137073(-2)	4.472149(-2)	-4.358498(-2)
0.4	9.917087(-2)	5.668320(-2)	6.138996(-2)	-5.565989(-2)
0.5	1.260884(-1)	7.352389(-2)	7.982193(-2)	-6.526481(-2)
0.6	1.548026(-1)	9.263929(-2)	1.008699(-1)	-7.118380(-2)
0.7	1.862370(-1)	1.152234(-1)	1.258868(-1)	-7.146674(-2)
0.8	2.220708(-1)	1.434716(-1)	1.573332(-1)	-6.252317(-2)
0.9	2.661821(-1)	1.825184(-1)	2.008798(-1)	-3.595887(-2)
1.0	3.400437(-1)	2.614322(-1)	2.876557(-1)	5.546507(-2)

Tabela 3.2 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 1 com  $C = 0.3$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta T_1^1(\tau)$	$\Delta T_2^1(\tau)$	$\Delta T_1^2(\tau)$	$\Delta T_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	-7.746170(-3)	-9.198212(-3)	2.837039(-2)	2.606473(-2)
0.2	-1.551385(-2)	-1.843788(-2)	5.690565(-2)	5.227021(-2)
0.3	-2.332774(-2)	-2.776507(-2)	8.578208(-2)	7.876765(-2)
0.4	-3.121978(-2)	-3.723630(-2)	1.152014(-1)	1.057316(-1)
0.5	-3.923584(-2)	-4.692802(-2)	1.454111(-1)	1.333784(-1)
0.6	-4.744819(-2)	-5.695401(-2)	1.767388(-1)	1.619981(-1)
0.7	-5.598287(-2)	-6.750346(-2)	2.096596(-1)	1.920150(-1)
0.8	-6.509242(-2)	-7.894134(-2)	2.449561(-1)	2.241311(-1)
0.9	-7.542285(-2)	-9.217728(-2)	2.842326(-1)	2.597763(-1)
1.0	-9.115594(-2)	-1.130434(-1)	3.346747(-1)	3.049554(-1)

Tabela 3.3 – Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 1  
com  $C = 0.3$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$Q_1^1(\tau)$	$Q_2^1(\tau)$	$Q_1^2(\tau)$	$Q_2^2(\tau)$
0.0	1.492025(-1)	1.419593(-1)	-3.474624(-1)	-3.141262(-1)
0.1	1.491603(-1)	1.419847(-1)	-3.475293(-1)	-3.140859(-1)
0.2	1.490334(-1)	1.420612(-1)	-3.477307(-1)	-3.139645(-1)
0.3	1.488199(-1)	1.421899(-1)	-3.480687(-1)	-3.137607(-1)
0.4	1.485167(-1)	1.423728(-1)	-3.485470(-1)	-3.134723(-1)
0.5	1.481191(-1)	1.426125(-1)	-3.491709(-1)	-3.130962(-1)
0.6	1.476205(-1)	1.429131(-1)	-3.499476(-1)	-3.126279(-1)
0.7	1.470111(-1)	1.432806(-1)	-3.508869(-1)	-3.120615(-1)
0.8	1.462762(-1)	1.437236(-1)	-3.520025(-1)	-3.113888(-1)
0.9	1.453915(-1)	1.442571(-1)	-3.533145(-1)	-3.105978(-1)
1.0	1.442971(-1)	1.449170(-1)	-3.548671(-1)	-3.096617(-1)

Tabela 3.4 – Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 1  
com  $C = 0.3$

$a$	$U_1^1$	$U_2^1$	$U_1^2$	$U_2^2$
0.1	-5.383404(-1)	-5.465123(-1)	-1.095837	-1.123393
0.5	-4.896696(-1)	-5.264716(-1)	-1.032807	-1.139049
1.0	-4.606987(-1)	-5.203394(-1)	-9.973901(-1)	-1.161996
1.5	-4.435355(-1)	-5.182548(-1)	-9.781651(-1)	-1.180058
2.0	-4.319073(-1)	-5.173411(-1)	-9.661182(-1)	-1.193964
2.5	-4.234184(-1)	-5.168606(-1)	-9.578748(-1)	-1.204830
5.0	-4.010898(-1)	-5.159660(-1)	-9.384555(-1)	-1.235326
9.0	-3.875754(-1)	-5.154062(-1)	-9.281963(-1)	-1.254331
13.0	-3.814971(-1)	-5.151052(-1)	-9.239207(-1)	-1.262875

Tabela 3.5 – Reverso de Temperatura:  $\beta_\alpha^T$  e  $\beta_\alpha^Q$  para o Caso 1 com  
 $C = 0.3$

$a$	$\beta_1^T$	$\beta_2^T$	$\beta_1^Q$	$\beta_2^Q$
0.1	4.259725	3.944381	3.643213	3.612915
0.5	5.165366	4.377869	3.811304	3.694012
1.0	5.160654	4.333244	3.828797	3.712791
1.5	4.945687	4.239912	3.796495	3.732388
2.0	4.729264	4.161417	3.752450	3.756121
2.5	4.550154	4.101967	3.708449	3.781135
5.0	4.103716	3.969033	3.559060	3.878185
9.0	3.950809	3.928510	3.483292	3.932660
13.0	3.925813	3.921568	3.467687	3.942642
15.0	3.922150	3.920212	3.465513	3.943449

Tabela 3.6 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade  
para o Caso 1 com  $C = 0.8$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta N_1^1(\tau)$	$\Delta N_2^1(\tau)$	$\Delta N_1^2(\tau)$	$\Delta N_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	1.950721(-2)	5.000034(-3)	1.668815(-3)	-3.798386(-2)
0.2	3.927584(-2)	1.034250(-2)	3.736610(-3)	-7.539203(-2)
0.3	5.959323(-2)	1.640494(-2)	6.642651(-3)	-1.115879(-1)
0.4	8.080536(-2)	2.364446(-2)	1.091734(-2)	-1.457969(-1)
0.5	1.033670(-1)	3.266635(-2)	1.726012(-2)	-1.769870(-1)
0.6	1.279321(-1)	4.434788(-2)	2.667903(-2)	-2.036539(-1)
0.7	1.555410(-1)	6.009834(-2)	4.078143(-2)	-2.233682(-1)
0.8	1.880965(-1)	8.252134(-2)	6.250769(-2)	-2.316245(-1)
0.9	2.300208(-1)	1.177421(-1)	9.868013(-2)	-2.178005(-1)
1.0	3.060732(-1)	2.008049(-1)	1.871982(-1)	-1.212723(-1)

Tabela 3.7 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura  
para o Caso 1 com  $C = 0.8$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta T_1^1(\tau)$	$\Delta T_2^1(\tau)$	$\Delta T_1^2(\tau)$	$\Delta T_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	-8.465840(-3)	-9.876277(-3)	2.710908(-2)	2.517548(-2)
0.2	-1.696082(-2)	-1.981522(-2)	5.437505(-2)	5.046395(-2)
0.3	-2.551777(-2)	-2.988584(-2)	8.196614(-2)	7.598676(-2)
0.4	-3.417789(-2)	-4.017150(-2)	1.100758(-1)	1.018838(-1)
0.5	-4.299847(-2)	-5.078256(-2)	1.389428(-1)	1.283284(-1)
0.6	-5.206718(-2)	-6.187941(-2)	1.688856(-1)	1.555520(-1)
0.7	-6.153346(-2)	-7.372197(-2)	2.003688(-1)	1.838921(-1)
0.8	-7.169189(-2)	-8.679881(-2)	2.341606(-1)	2.139014(-1)
0.9	-8.328929(-2)	-1.022969(-1)	2.718364(-1)	2.466776(-1)
1.0	-1.011667(-1)	-1.276295(-1)	3.203167(-1)	2.862714(-1)

Tabela 3.8 – Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 1  
com  $C = 0.8$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$Q_1^1(\tau)$	$Q_2^1(\tau)$	$Q_1^2(\tau)$	$Q_2^2(\tau)$
0.0	1.463011(-1)	1.350185(-1)	-3.344274(-1)	-2.861102(-1)
0.1	1.462846(-1)	1.351112(-1)	-3.344500(-1)	-2.859831(-1)
0.2	1.462348(-1)	1.353914(-1)	-3.345182(-1)	-2.855991(-1)
0.3	1.461505(-1)	1.358659(-1)	-3.346337(-1)	-2.849493(-1)
0.4	1.460296(-1)	1.365465(-1)	-3.347992(-1)	-2.840182(-1)
0.5	1.458688(-1)	1.374514(-1)	-3.350187(-1)	-2.827829(-1)
0.6	1.456635(-1)	1.386067(-1)	-3.352981(-1)	-2.812102(-1)
0.7	1.454069(-1)	1.400504(-1)	-3.356459(-1)	-2.792533(-1)
0.8	1.450890(-1)	1.418397(-1)	-3.360741(-1)	-2.768437(-1)
0.9	1.446926(-1)	1.440704(-1)	-3.366024(-1)	-2.738707(-1)
1.0	1.441780(-1)	1.469662(-1)	-3.372753(-1)	-2.700839(-1)

Tabela 3.9 – Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 1  
com  $C = 0.8$

$a$	$U_1^1$	$U_2^1$	$U_1^2$	$U_2^2$
0.1	-5.416607(-1)	-5.536428(-1)	-1.107149	-1.147073
0.5	-5.054054(-1)	-5.554887(-1)	-1.078261	-1.222461
1.0	-4.867442(-1)	-5.652444(-1)	-1.069284	-1.285267
1.5	-4.765435(-1)	-5.730243(-1)	-1.067364	-1.327186
2.0	-4.699314(-1)	-5.788279(-1)	-1.067540	-1.356999
2.5	-4.652267(-1)	-5.832125(-1)	-1.068387	-1.379219
5.0	-4.531618(-1)	-5.947052(-1)	-1.073052	-1.437978
9.0	-4.459426(-1)	-6.012116(-1)	-1.077137	-1.472649
13.0	-4.426945(-1)	-6.039674(-1)	-1.079199	-1.487854

Tabela 3.10 – Reverso de Temperatura:  $\beta_\alpha^T$  e  $\beta_\alpha^Q$  para o Caso 1 com  
 $C = 0.8$

$a$	$\beta_1^T$	$\beta_2^T$	$\beta_1^Q$	$\beta_2^Q$
0.1	4.099969	3.794111	3.634763	3.570298
0.5	4.749297	4.043279	3.769341	3.579623
1.0	4.700919	4.049851	3.785884	3.619043
1.5	4.539926	4.042960	3.775524	3.686801
2.0	4.393143	4.032268	3.761806	3.758062
2.5	4.276907	4.018551	3.749577	3.822546
5.0	3.999959	3.949438	3.717865	4.005286
9.0	3.907590	3.902687	3.707554	4.064441
13.0	3.891751	3.891145	3.706078	4.067662
15.0	3.889203	3.888976	3.705881	4.066555

Tabela 3.11 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade  
para o Caso 2 com  $C = 0.3$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta N_1^1(\tau)$	$\Delta N_2^1(\tau)$	$\Delta N_1^2(\tau)$	$\Delta N_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	3.714454(-2)	7.460208(-3)	4.498512(-2)	-2.935207(-2)
0.2	7.447396(-2)	1.522764(-2)	9.020773(-2)	-5.818808(-2)
0.3	1.121899(-1)	2.363919(-2)	1.359274(-1)	-8.594183(-2)
0.4	1.505322(-1)	3.309889(-2)	1.824535(-1)	-1.119339(-1)
0.5	1.898105(-1)	4.413519(-2)	2.301873(-1)	-1.352750(-1)
0.6	2.304611(-1)	5.750365(-2)	2.796960(-1)	-1.546932(-1)
0.7	2.731647(-1)	7.440094(-2)	3.318657(-1)	-1.681741(-1)
0.8	3.191389(-1)	9.700527(-2)	3.882825(-1)	-1.720540(-1)
0.9	3.711455(-1)	1.303578(-1)	4.525358(-1)	-1.578722(-1)
1.0	4.440487(-1)	2.025397(-1)	5.437565(-1)	-7.881026(-2)

Tabela 3.12 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura  
para o Caso 2 com  $C = 0.3$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta T_1^1(\tau)$	$\Delta T_2^1(\tau)$	$\Delta T_1^2(\tau)$	$\Delta T_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	-4.256267(-3)	-9.495343(-3)	3.847957(-2)	2.470192(-2)
0.2	-8.542719(-3)	-1.903763(-2)	7.708020(-2)	4.951483(-2)
0.3	-1.289279(-2)	-2.867868(-2)	1.159312(-1)	7.455797(-2)
0.4	-1.734732(-2)	-3.848138(-2)	1.551805(-1)	9.996886(-2)
0.5	-2.196097(-2)	-4.852957(-2)	1.950095(-1)	1.259177(-1)
0.6	-2.681402(-2)	-5.894625(-2)	2.356586(-1)	1.526314(-1)
0.7	-3.203716(-2)	-6.993287(-2)	2.774778(-1)	1.804394(-1)
0.8	-3.787564(-2)	-8.187230(-2)	3.210477(-1)	2.098785(-1)
0.9	-4.491690(-2)	-9.570328(-2)	3.675744(-1)	2.420149(-1)
1.0	-5.662750(-2)	-1.172740(-1)	4.226456(-1)	2.810119(-1)



Tabela 3.13 – Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 2  
com  $C = 0.3$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$Q_1^1(\tau)$	$Q_2^1(\tau)$	$Q_1^2(\tau)$	$Q_2^2(\tau)$
0.0	1.454063(-1)	1.588745(-1)	-3.389464(-1)	-2.949831(-1)
0.1	1.453943(-1)	1.589041(-1)	-3.389781(-1)	-2.949055(-1)
0.2	1.453582(-1)	1.589927(-1)	-3.390730(-1)	-2.946724(-1)
0.3	1.452978(-1)	1.591408(-1)	-3.392313(-1)	-2.942838(-1)
0.4	1.452131(-1)	1.593489(-1)	-3.394531(-1)	-2.937394(-1)
0.5	1.451036(-1)	1.596177(-1)	-3.397386(-1)	-2.930387(-1)
0.6	1.449688(-1)	1.599485(-1)	-3.400879(-1)	-2.921812(-1)
0.7	1.448081(-1)	1.603430(-1)	-3.405014(-1)	-2.911662(-1)
0.8	1.446202(-1)	1.608042(-1)	-3.409795(-1)	-2.899926(-1)
0.9	1.444029(-1)	1.613376(-1)	-3.415230(-1)	-2.886585(-1)
1.0	1.441501(-1)	1.619581(-1)	-3.421347(-1)	-2.871571(-1)

Tabela 3.14 – Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 2  
com  $C = 0.3$

$a$	$U_1^1$	$U_2^1$	$U_1^2$	$U_2^2$
0.1	-5.282372(-1)	-5.540369(-1)	-1.069744	-1.139162
0.5	-4.424731(-1)	-5.516923(-1)	-9.162147(-1)	-1.197490
1.0	-3.800821(-1)	-5.596792(-1)	-7.983931(-1)	-1.256047
1.5	-3.386946(-1)	-5.676928(-1)	-7.188175(-1)	-1.299807
2.0	-3.086971(-1)	-5.744843(-1)	-6.607498(-1)	-1.333381
2.5	-2.858041(-1)	-5.801131(-1)	-6.163060(-1)	-1.359865
5.0	-2.218408(-1)	-5.974794(-1)	-4.919328(-1)	-1.437099
9.0	-1.808258(-1)	-6.097581(-1)	-4.122761(-1)	-1.488941
13.0	-1.618839(-1)	-6.156931(-1)	-3.755560(-1)	-1.513414

Tabela 3.15 – Reverso de Temperatura:  $\beta_\alpha^T$  e  $\beta_\alpha^Q$  para o Caso 2 com  $C = 0.3$

$a$	$\beta_1^T$	$\beta_2^T$	$\beta_1^Q$	$\beta_2^Q$
0.1	5.235023	3.877880	3.618755	3.548064
0.5	8.388071	4.208584	3.781250	3.463308
1.0	1.054648(1)	4.101659	3.831028	3.356704
1.5	1.168505(1)	3.989696	3.833307	3.305630
2.0	1.219010(1)	3.926100	3.814249	3.298159
2.5	1.230686(1)	3.907926	3.782771	3.323160
5.0	1.100547(1)	4.230722	3.553528	3.737116
9.0	9.049035	5.263800	3.220122	4.823243
13.0	8.154757	6.226283	3.028621	5.877805
15.0	7.921821	6.585029	2.972587	6.287926

Tabela 3.16 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade para o Caso 2 com  $C = 0.8$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta N_1^1(\tau)$	$\Delta N_2^1(\tau)$	$\Delta N_1^2(\tau)$	$\Delta N_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	2.793911(-2)	-3.017995(-2)	2.482747(-2)	-1.263083(-1)
0.2	5.608872(-2)	-5.992154(-2)	4.994591(-2)	-2.517697(-1)
0.3	8.467830(-2)	-8.874767(-2)	7.567283(-2)	-3.754619(-1)
0.4	1.139801(-1)	-1.160939(-1)	1.023855(-1)	-4.962934(-1)
0.5	1.443456(-1)	-1.412349(-1)	1.305717(-1)	-6.128594(-1)
0.6	1.762690(-1)	-1.631529(-1)	1.609182(-1)	-7.231883(-1)
0.7	2.105199(-1)	-1.802670(-1)	1.944948(-1)	-8.242160(-1)
0.8	2.484730(-1)	-1.897543(-1)	2.332108(-1)	-9.104706(-1)
0.9	2.932430(-1)	-1.852054(-1)	2.813801(-1)	-9.695383(-1)
1.0	3.615669(-1)	-1.318516(-1)	3.619727(-1)	-9.342909(-1)

Tabela 3.17 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 2 com  $C = 0.8$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta T_1^1(\tau)$	$\Delta T_2^1(\tau)$	$\Delta T_1^2(\tau)$	$\Delta T_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	-5.776204(-3)	-1.248277(-2)	3.143497(-2)	1.819762(-2)
0.2	-1.158637(-2)	-2.507083(-2)	6.299041(-2)	3.636533(-2)
0.3	-1.746802(-2)	-3.787813(-2)	9.479519(-2)	5.447045(-2)
0.4	-2.346670(-2)	-5.103829(-2)	1.269969(-1)	7.247388(-2)
0.5	-2.964303(-2)	-6.472130(-2)	1.597773(-1)	9.032398(-2)
0.6	-3.608550(-2)	-7.916367(-2)	1.933772(-1)	1.079444(-1)
0.7	-4.293757(-2)	-9.473134(-2)	2.281482(-1)	1.252068(-1)
0.8	-5.046754(-2)	-1.120798(-1)	2.646728(-1)	1.418535(-1)
0.9	-5.931704(-2)	-1.327183(-1)	3.041565(-1)	1.571996(-1)
1.0	-7.327233(-2)	-1.652174(-1)	3.521064(-1)	1.662897(-1)

Tabela 3.18 – Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 2 com  $C = 0.8$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$Q_1^1(\tau)$	$Q_2^1(\tau)$	$Q_1^2(\tau)$	$Q_2^2(\tau)$
0.0	1.559378(-1)	2.022777(-1)	-3.578595(-1)	-1.531762(-1)
0.1	1.559299(-1)	2.024591(-1)	-3.578751(-1)	-1.528181(-1)
0.2	1.559060(-1)	2.030053(-1)	-3.579222(-1)	-1.517399(-1)
0.3	1.558660(-1)	2.039222(-1)	-3.580013(-1)	-1.499290(-1)
0.4	1.558094(-1)	2.052200(-1)	-3.581132(-1)	-1.473637(-1)
0.5	1.557354(-1)	2.069144(-1)	-3.582596(-1)	-1.440110(-1)
0.6	1.556432(-1)	2.090278(-1)	-3.584424(-1)	-1.398231(-1)
0.7	1.555312(-1)	2.115926(-1)	-3.586646(-1)	-1.347312(-1)
0.8	1.553975(-1)	2.146568(-1)	-3.589308(-1)	-1.286323(-1)
0.9	1.552384(-1)	2.182998(-1)	-3.592485(-1)	-1.213550(-1)
1.0	1.550463(-1)	2.227027(-1)	-3.596347(-1)	-1.125065(-1)

Tabela 3.19 – Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 2  
com  $C = 0.8$

$a$	$U_1^1$	$U_2^1$	$U_1^2$	$U_2^2$
0.1	-5.384237(-1)	-5.909112(-1)	-1.092963	-1.232581
0.5	-4.804205(-1)	-6.939522(-1)	-1.005207	-1.561315
1.0	-4.390023(-1)	-7.928050(-1)	-9.384901(-1)	-1.850246
1.5	-4.112918(-1)	-8.679482(-1)	-8.927571(-1)	-2.062439
2.0	-3.909363(-1)	-9.269686(-1)	-8.588065(-1)	-2.226265
2.5	-3.751956(-1)	-9.745256(-1)	-8.324119(-1)	-2.356933
5.0	-3.299826(-1)	-1.118451	-7.562162(-1)	-2.747402
9.0	-2.997552(-1)	-1.218567	-7.051281(-1)	-3.016154
13.0	-2.853861(-1)	-1.266593	-6.808163(-1)	-3.144530

Tabela 3.20 – Reverso de Temperatura:  $\beta_\alpha^T$  e  $\beta_\alpha^Q$  para o Caso 2 com  
 $C = 0.8$

$a$	$\beta_1^T$	$\beta_2^T$	$\beta_1^Q$	$\beta_2^Q$
0.1	4.508759	3.480367	3.608436	3.270773
0.5	6.153763	3.199916	3.752158	2.620620
1.0	6.943952	2.960231	3.794885	2.257257
1.5	7.253738	2.907259	3.799860	2.119095
2.0	7.355742	2.964778	3.791461	2.097463
2.5	7.362831	3.091386	3.777494	2.147184
5.0	7.114689	4.155234	3.698110	2.924265
9.0	6.888998	5.727667	3.622250	4.658935
13.0	6.827026	6.450158	3.592002	5.858579
15.0	6.816038	6.606319	3.584586	6.188577

Tabela 3.21 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade  
para o Caso 3 com  $C = 0.3$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta N_1^1(\tau)$	$\Delta N_2^1(\tau)$	$\Delta N_1^2(\tau)$	$\Delta N_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	3.503287(-2)	8.667894(-3)	3.870400(-2)	-2.778393(-2)
0.2	7.026370(-2)	1.764434(-2)	7.766792(-2)	-5.504279(-2)
0.3	1.059094(-1)	2.726791(-2)	1.171777(-1)	-8.120038(-2)
0.4	1.422299(-1)	3.794501(-2)	1.575781(-1)	-1.055650(-1)
0.5	1.795644(-1)	5.020796(-2)	1.993227(-1)	-1.272307(-1)
0.6	2.183966(-1)	6.481906(-2)	2.430630(-1)	-1.449008(-1)
0.7	2.594894(-1)	8.298768(-2)	2.898325(-1)	-1.565195(-1)
0.8	3.042238(-1)	1.069194(-1)	3.415091(-1)	-1.583438(-1)
0.9	3.557717(-1)	1.417308(-1)	4.024079(-1)	-1.417140(-1)
1.0	4.315143(-1)	2.160423(-1)	4.960048(-1)	-5.854056(-2)

Tabela 3.22 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 3 com  $C = 0.3$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta T_1^1(\tau)$	$\Delta T_2^1(\tau)$	$\Delta T_1^2(\tau)$	$\Delta T_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	-5.620232(-3)	-9.503987(-3)	3.682056(-2)	2.592103(-2)
0.2	-1.126303(-2)	-1.905689(-2)	7.379348(-2)	5.194349(-2)
0.3	-1.695396(-2)	-2.871258(-2)	1.110813(-1)	7.817665(-2)
0.4	-2.272550(-2)	-3.853625(-2)	1.488694(-1)	1.047472(-1)
0.5	-2.862309(-2)	-4.861445(-2)	1.873840(-1)	1.318134(-1)
0.6	-3.471660(-2)	-5.907363(-2)	2.269235(-1)	1.595873(-1)
0.7	-4.112487(-2)	-7.012016(-2)	2.679199(-1)	1.883797(-1)
0.8	-4.807999(-2)	-8.214519(-2)	3.110846(-1)	2.187005(-1)
0.9	-5.616052(-2)	-9.610616(-2)	3.578845(-1)	2.515673(-1)
1.0	-6.897648(-2)	-1.179747(-1)	4.150205(-1)	2.909317(-1)

Tabela 3.23 – Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 3 com  $C = 0.3$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$Q_1^1(\tau)$	$Q_2^1(\tau)$	$Q_1^2(\tau)$	$Q_2^2(\tau)$
0.0	1.389201(-1)	1.507579(-1)	-3.238475(-1)	-2.976656(-1)
0.1	1.388886(-1)	1.508005(-1)	-3.239358(-1)	-2.975461(-1)
0.2	1.387940(-1)	1.509286(-1)	-3.242012(-1)	-2.971867(-1)
0.3	1.386356(-1)	1.511431(-1)	-3.246450(-1)	-2.965859(-1)
0.4	1.384122(-1)	1.514455(-1)	-3.252692(-1)	-2.957408(-1)
0.5	1.381222(-1)	1.518382(-1)	-3.260770(-1)	-2.946470(-1)
0.6	1.377629(-1)	1.523246(-1)	-3.270730(-1)	-2.932986(-1)
0.7	1.373308(-1)	1.529096(-1)	-3.282630(-1)	-2.916873(-1)
0.8	1.368203(-1)	1.536008(-1)	-3.296558(-1)	-2.898016(-1)
0.9	1.362219(-1)	1.544110(-1)	-3.312647(-1)	-2.876233(-1)
1.0	1.355118(-1)	1.553724(-1)	-3.331195(-1)	-2.851119(-1)

Tabela 3.24 – Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 3  
com  $C = 0.3$

$a$	$U_1^1$	$U_2^1$	$U_1^2$	$U_2^2$
0.1	-5.277766(-1)	-5.526442(-1)	-1.070984	-1.137631
0.5	-4.474423(-1)	-5.468012(-1)	-9.321639(-1)	-1.189741
1.0	-3.929664(-1)	-5.513743(-1)	-8.339891(-1)	-1.240549
1.5	-3.584291(-1)	-5.566097(-1)	-7.713634(-1)	-1.277475
2.0	-3.341590(-1)	-5.611108(-1)	-7.274629(-1)	-1.305203
2.5	-3.160579(-1)	-5.648253(-1)	-6.948622(-1)	-1.326692
5.0	-2.673533(-1)	-5.759318(-1)	-6.080610(-1)	-1.387137
9.0	-2.374867(-1)	-5.832146(-1)	-5.556580(-1)	-1.425326
13.0	-2.240215(-1)	-5.865240(-1)	-5.322543(-1)	-1.442591

Tabela 3.25 – Reverso de Temperatura:  $\beta_\alpha^T$  e  $\beta_\alpha^Q$  para o Caso 3 com  
 $C = 0.3$

$a$	$\beta_1^T$	$\beta_2^T$	$\beta_1^Q$	$\beta_2^Q$
0.1	4.994736	3.882687	3.637408	3.560736
0.5	7.208000	4.256385	3.807811	3.522282
1.0	8.051244	4.227928	3.831177	3.474461
1.5	8.113757	4.187997	3.792055	3.478203
2.0	7.884278	4.181938	3.726916	3.519350
2.5	7.565422	4.205413	3.650706	3.585301
5.0	6.256501	4.506210	3.289948	4.051082
9.0	5.465020	4.917327	2.987244	4.656088
13.0	5.248085	5.083775	2.882846	4.923307
15.0	5.206651	5.117217	2.861042	4.981071

Tabela 3.26 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Densidade  
para o Caso 3 com  $C = 0.8$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta N_1^1(\tau)$	$\Delta N_2^1(\tau)$	$\Delta N_1^2(\tau)$	$\Delta N_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	2.525757(-2)	-1.812946(-2)	1.598086(-2)	-9.872775(-2)
0.2	5.074876(-2)	-3.583003(-2)	3.230186(-2)	-1.966447(-1)
0.3	7.672955(-2)	-5.263359(-2)	4.933623(-2)	-2.928650(-1)
0.4	1.035063(-1)	-6.798357(-2)	6.753199(-2)	-3.863333(-1)
0.5	1.314791(-1)	-8.115975(-2)	8.747555(-2)	-4.756810(-1)
0.6	1.612178(-1)	-9.114437(-2)	1.100049(-1)	-5.589695(-1)
0.7	1.936220(-1)	-9.634407(-2)	1.364448(-1)	-6.331583(-1)
0.8	2.303215(-1)	-9.389000(-2)	1.691964(-1)	-6.927664(-1)
0.9	2.750658(-1)	-7.720855(-2)	2.137736(-1)	-7.252317(-1)
1.0	3.484950(-1)	-1.005654(-2)	3.002828(-1)	-6.614770(-1)

Tabela 3.27 – Reverso de Temperatura: Perturbações de Temperatura para o Caso 3 com  $C = 0.8$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$\Delta T_1^1(\tau)$	$\Delta T_2^1(\tau)$	$\Delta T_1^2(\tau)$	$\Delta T_2^2(\tau)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	-7.115886(-3)	-1.157189(-2)	3.064538(-2)	2.237217(-2)
0.2	-1.426207(-2)	-2.324809(-2)	6.143169(-2)	4.473539(-2)
0.3	-2.147236(-2)	-3.514184(-2)	9.250991(-2)	6.707908(-2)
0.4	-2.878862(-2)	-4.738661(-2)	1.240535(-1)	8.938884(-2)
0.5	-3.626791(-2)	-6.015336(-2)	1.562766(-1)	1.116424(-1)
0.6	-4.399577(-2)	-7.368143(-2)	1.894643(-1)	1.338015(-1)
0.7	-5.211493(-2)	-8.834342(-2)	2.240334(-1)	1.557924(-1)
0.8	-6.090048(-2)	-1.048103(-1)	2.606753(-1)	1.774482(-1)
0.9	-7.103289(-2)	-1.246348(-1)	3.008180(-1)	1.982754(-1)
1.0	-8.675543(-2)	-1.567399(-1)	3.508802(-1)	2.142047(-1)

Tabela 3.28 – Reverso de Temperatura: Fluxos de Calor para o Caso 3 com  $C = 0.8$  e  $2a = 2.0$

$\tau$	$Q_1^1(\tau)$	$Q_2^1(\tau)$	$Q_1^2(\tau)$	$Q_2^2(\tau)$
0.0	1.469742(-1)	1.616275(-1)	-3.366491(-1)	-2.076501(-1)
0.1	1.469581(-1)	1.618300(-1)	-3.366789(-1)	-2.072742(-1)
0.2	1.469098(-1)	1.624407(-1)	-3.367686(-1)	-2.061398(-1)
0.3	1.468284(-1)	1.634701(-1)	-3.369201(-1)	-2.042261(-1)
0.4	1.467123(-1)	1.649360(-1)	-3.371361(-1)	-2.014964(-1)
0.5	1.465596(-1)	1.668657(-1)	-3.374211(-1)	-1.978950(-1)
0.6	1.463671(-1)	1.692985(-1)	-3.377815(-1)	-1.933411(-1)
0.7	1.461303(-1)	1.722908(-1)	-3.382265(-1)	-1.877178(-1)
0.8	1.458426(-1)	1.759262(-1)	-3.387700(-1)	-1.808492(-1)
0.9	1.454932(-1)	1.803417(-1)	-3.394352(-1)	-1.724428(-1)
1.0	1.450579(-1)	1.858434(-1)	-3.402751(-1)	-1.618300(-1)

Tabela 3.29 – Reverso de Temperatura: Fluxos Mássicos para o Caso 3  
com  $C = 0.8$

$a$	$U_1^1$	$U_2^1$	$U_1^2$	$U_2^2$
0.1	-5.379562(-1)	-5.789954(-1)	-1.095937	-1.209390
0.5	-4.862054(-1)	-6.471852(-1)	-1.027477	-1.456780
1.0	-4.533160(-1)	-7.123139(-1)	-9.829684(-1)	-1.661457
1.5	-4.328578(-1)	-7.600492(-1)	-9.554989(-1)	-1.804236
2.0	-4.185489(-1)	-7.962265(-1)	-9.365318(-1)	-1.910039
2.5	-4.078746(-1)	-8.244697(-1)	-9.225546(-1)	-1.991616
5.0	-3.789281(-1)	-9.048213(-1)	-8.854857(-1)	-2.220432
9.0	-3.608270(-1)	-9.563385(-1)	-8.628945(-1)	-2.365476
13.0	-3.525407(-1)	-9.799267(-1)	-8.526814(-1)	-2.431577

Tabela 3.30 – Reverso de Temperatura:  $\beta_\alpha^T$  e  $\beta_\alpha^Q$  para o Caso 3 com  
 $C = 0.8$

$a$	$\beta_1^T$	$\beta_2^T$	$\beta_1^Q$	$\beta_2^Q$
0.1	4.369945	3.553078	3.625584	3.365381
0.5	5.529705	3.478569	3.767034	2.953457
1.0	5.806349	3.436305	3.790532	2.784744
1.5	5.776864	3.525490	3.777722	2.795259
2.0	5.672763	3.674373	3.755505	2.894290
2.5	5.560319	3.843500	3.731773	3.040513
5.0	5.198174	4.529374	3.643137	3.910908
9.0	5.030892	4.900938	3.588721	4.731436
13.0	4.991310	4.964465	3.572482	4.972699
15.0	4.983066	4.970448	3.568791	5.011715



Tabela 3.31 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Caso 1 com  
 $C = 0.3$  e  $u = 1.0$

$\tau$	$\Delta N_1(\tau)$	$\Delta N_2(\tau)$	$\Delta T_1(\tau)$	$\Delta T_2(\tau)$	$Q_1(\tau)$	$Q_2(\tau)$
0.0	-1.299905	-1.873243	-4.557211(-1)	-5.490733(-1)	5.407901(-2)	-3.260668(-2)
0.1	-1.395889	-2.047086	-4.678523(-1)	-5.426678(-1)	4.930152(-2)	-2.972611(-2)
0.2	-1.440645	-2.126028	-4.775741(-1)	-5.426133(-1)	4.525659(-2)	-2.728724(-2)
0.3	-1.470946	-2.178872	-4.856773(-1)	-5.433825(-1)	4.170042(-2)	-2.514307(-2)
0.4	-1.493411	-2.217758	-4.925984(-1)	-5.443627(-1)	3.852677(-2)	-2.322953(-2)
0.5	-1.510877	-2.247825	-4.986014(-1)	-5.453710(-1)	3.566917(-2)	-2.150655(-2)
0.6	-1.524872	-2.271817	-5.038646(-1)	-5.463408(-1)	3.308039(-2)	-1.994566(-2)
0.7	-1.536323	-2.291388	-5.085168(-1)	-5.472476(-1)	3.072447(-2)	-1.852517(-2)
0.8	-1.545844	-2.307619	-5.126553(-1)	-5.480840(-1)	2.857278(-2)	-1.722782(-2)
0.9	-1.553856	-2.321253	-5.163561(-1)	-5.488501(-1)	2.660189(-2)	-1.603948(-2)
1.0	-1.560668	-2.332828	-5.196798(-1)	-5.495493(-1)	2.479221(-2)	-1.494834(-2)
2.0	-1.594842	-2.390768	-5.399693(-1)	-5.538974(-1)	1.277432(-2)	-7.702220(-3)
5.0	-1.611355	-2.418946	-5.547938(-1)	-5.568743(-1)	2.249743(-3)	-1.356472(-3)
7.0	-1.612563	-2.421027	-5.564517(-1)	-5.571385(-1)	8.000316(-4)	-4.823752(-4)

Tabela 3.32 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Caso 1 com  
 $C = 0.8$  e  $u = 1.0$

$\tau$	$\Delta N_1(\tau)$	$\Delta N_2(\tau)$	$\Delta T_1(\tau)$	$\Delta T_2(\tau)$	$Q_1(\tau)$	$Q_2(\tau)$
0.0	-1.316327	-1.892166	-4.214810(-1)	-5.110418(-1)	1.339871(-2)	-7.540112(-2)
0.1	-1.425465	-2.088840	-4.255614(-1)	-4.912629(-1)	1.164019(-2)	-6.550507(-2)
0.2	-1.475781	-2.176416	-4.303987(-1)	-4.842525(-1)	1.025094(-2)	-5.768707(-2)
0.3	-1.509704	-2.234394	-4.346397(-1)	-4.800713(-1)	9.094208(-3)	-5.117755(-2)
0.4	-1.534793	-2.276662	-4.383269(-1)	-4.772699(-1)	8.110158(-3)	-4.563982(-2)
0.5	-1.554271	-2.309071	-4.415458(-1)	-4.752850(-1)	7.261992(-3)	-4.086678(-2)
0.6	-1.569865	-2.334727	-4.443722(-1)	-4.738333(-1)	6.524211(-3)	-3.671492(-2)
0.7	-1.582621	-2.355498	-4.468678(-1)	-4.727517(-1)	5.877968(-3)	-3.307820(-2)
0.8	-1.593226	-2.372595	-4.490822(-1)	-4.719373(-1)	5.308758(-3)	-2.987498(-2)
0.9	-1.602152	-2.386854	-4.510560(-1)	-4.713213(-1)	4.805095(-3)	-2.704062(-2)
1.0	-1.609744	-2.398871	-4.528222(-1)	-4.708560(-1)	4.357694(-3)	-2.452287(-2)
2.0	-1.647948	-2.457164	-4.634090(-1)	-4.698052(-1)	1.772945(-3)	-9.977230(-3)
5.0	-1.666580	-2.482599	-4.708378(-1)	-4.713824(-1)	1.872092(-4)	-1.053517(-3)
7.0	-1.667916	-2.484071	-4.716514(-1)	-4.717872(-1)	5.100662(-5)	-2.870392(-4)

Tabela 3.33 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Caso 2 com  
 $C = 0.3$  e  $u = 1.0$

$\tau$	$\Delta N_1(\tau)$	$\Delta N_2(\tau)$	$\Delta T_1(\tau)$	$\Delta T_2(\tau)$	$Q_1(\tau)$	$Q_2(\tau)$
0.0	-1.248799	-7.747244	-5.689323(-1)	-1.965579	2.035766(-1)	-4.997035(-1)
0.1	-1.315746	-8.449100	-5.999190(-1)	-1.887104	1.974608(-1)	-4.846914(-1)
0.2	-1.345877	-8.789071	-6.236759(-1)	-1.849295	1.916964(-1)	-4.705420(-1)
0.3	-1.365293	-9.026892	-6.443732(-1)	-1.820136	1.861844(-1)	-4.570122(-1)
0.4	-1.378827	-9.209077	-6.630018(-1)	-1.795114	1.808859(-1)	-4.440066(-1)
0.5	-1.388583	-9.355520	-6.800552(-1)	-1.772557	1.757782(-1)	-4.314689(-1)
0.6	-1.395709	-9.476925	-6.958342(-1)	-1.751669	1.708453(-1)	-4.193606(-1)
0.7	-1.400912	-9.579808	-7.105430(-1)	-1.732014	1.660753(-1)	-4.076521(-1)
0.8	-1.404659	-9.668457	-7.243297(-1)	-1.713332	1.614588(-1)	-3.963202(-1)
0.9	-1.407279	-9.745856	-7.373074(-1)	-1.695457	1.569875(-1)	-3.853449(-1)
1.0	-1.409012	-9.814163	-7.495653(-1)	-1.678276	1.526546(-1)	-3.747094(-1)
2.0	-1.402888	-1.022633(1)	-8.440813(-1)	-1.533851	1.158175(-1)	-2.842881(-1)
5.0	-1.351624	-1.062730(1)	-9.813420(-1)	-1.279990	5.169208(-2)	-1.268844(-1)
7.0	-1.330442	-1.072556(1)	-1.021099	-1.195257	3.050438(-2)	-7.487671(-2)

Tabela 3.34 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Caso 2 com  
 $C = 0.8$  e  $u = 1.0$

$\tau$	$\Delta N_1(\tau)$	$\Delta N_2(\tau)$	$\Delta T_1(\tau)$	$\Delta T_2(\tau)$	$Q_1(\tau)$	$Q_2(\tau)$
0.0	-1.306773	-7.914502	-4.429307(-1)	-1.595467	3.926929(-2)	-8.996516(-1)
0.1	-1.391004	-8.629142	-4.493934(-1)	-1.425122	3.679054(-2)	-8.428638(-1)
0.2	-1.433030	-8.998915	-4.553906(-1)	-1.331043	3.460879(-2)	-7.928805(-1)
0.3	-1.462611	-9.266736	-4.606606(-1)	-1.259129	3.263354(-2)	-7.476278(-1)
0.4	-1.485260	-9.477290	-4.653359(-1)	-1.199883	3.082390(-2)	-7.061695(-1)
0.5	-1.503383	-9.650039	-4.695208(-1)	-1.149219	2.915405(-2)	-6.679135(-1)
0.6	-1.518293	-9.795634	-4.732935(-1)	-1.104905	2.760550(-2)	-6.324365(-1)
0.7	-1.530801	-9.920667	-4.767145(-1)	-1.065553	2.616410(-2)	-5.994142(-1)
0.8	-1.541449	-1.002955(1)	-4.798311(-1)	-1.030223	2.481851(-2)	-5.685872(-1)
0.9	-1.550616	-1.012540(1)	-4.826819(-1)	-9.982423(-1)	2.355941(-2)	-5.397415(-1)
1.0	-1.558582	-1.021051(1)	-4.852984(-1)	-9.691049(-1)	2.237891(-2)	-5.126965(-1)
2.0	-1.602324	-1.072460(1)	-5.028470(-1)	-7.754873(-1)	1.374194(-2)	-3.148251(-1)
5.0	-1.629635	-1.114855(1)	-5.195828(-1)	-5.842591(-1)	3.713937(-3)	-8.508555(-2)
7.0	-1.632568	-1.121556(1)	-5.223518(-1)	-5.498745(-1)	1.667996(-3)	-3.821345(-2)

Tabela 3.35 – Evaporação/Condensação em Semi-espço: Caso 3 com  
 $C = 0.3$  e  $u = 1.0$

$\tau$	$\Delta N_1(\tau)$	$\Delta N_2(\tau)$	$\Delta T_1(\tau)$	$\Delta T_2(\tau)$	$Q_1(\tau)$	$Q_2(\tau)$
0.0	-1.259751	-4.259199	-5.445872(-1)	-1.114906	1.660658(-1)	-2.248432(-1)
0.1	-1.336186	-4.651925	-5.756699(-1)	-1.074254	1.575061(-1)	-2.132540(-1)
0.2	-1.369993	-4.838672	-5.984666(-1)	-1.056549	1.497665(-1)	-2.027749(-1)
0.3	-1.391785	-4.967569	-6.176828(-1)	-1.043794	1.426062(-1)	-1.930804(-1)
0.4	-1.407113	-5.065056	-6.344822(-1)	-1.033442	1.359224(-1)	-1.840309(-1)
0.5	-1.418362	-5.142417	-6.494542(-1)	-1.024540	1.296509(-1)	-1.755396(-1)
0.6	-1.426814	-5.205717	-6.629616(-1)	-1.016625	1.237457(-1)	-1.675443(-1)
0.7	-1.433251	-5.258643	-6.752526(-1)	-1.009442	1.181715(-1)	-1.599972(-1)
0.8	-1.438185	-5.303620	-6.865088(-1)	-1.002832	1.128996(-1)	-1.528594(-1)
0.9	-1.441970	-5.342332	-6.968687(-1)	-9.966923(-1)	1.079061(-1)	-1.460985(-1)
1.0	-1.444860	-5.375998	-7.064422(-1)	-9.909493(-1)	1.031703(-1)	-1.396865(-1)
2.0	-1.450826	-5.564270	-7.730700(-1)	-9.479375(-1)	6.681020(-2)	-9.045706(-2)
5.0	-1.433640	-5.699003	-8.441244(-1)	-8.919342(-1)	1.974491(-2)	-2.673344(-2)
7.0	-1.427694	-5.718976	-8.576057(-1)	-8.789943(-1)	9.122340(-3)	-1.235110(-2)

Tabela 3.36 – Evaporação/Condensação em Semi-espço: Caso 3 com  
 $C = 0.8$  e  $u = 1.0$

$\tau$	$\Delta N_1(\tau)$	$\Delta N_2(\tau)$	$\Delta T_1(\tau)$	$\Delta T_2(\tau)$	$Q_1(\tau)$	$Q_2(\tau)$
0.0	-1.308801	-4.341471	-4.383728(-1)	-9.347078(-1)	3.303509(-2)	-4.174572(-1)
0.1	-1.405812	-4.773779	-4.456432(-1)	-8.378245(-1)	2.990552(-2)	-3.779095(-1)
0.2	-1.451835	-4.986993	-4.521625(-1)	-7.885019(-1)	2.729450(-2)	-3.449146(-1)
0.3	-1.483349	-5.136953	-4.577089(-1)	-7.527196(-1)	2.502754(-2)	-3.162675(-1)
0.4	-1.506953	-5.251914	-4.624943(-1)	-7.245381(-1)	2.302585(-2)	-2.909725(-1)
0.5	-1.525482	-5.344080	-4.666719(-1)	-7.014050(-1)	2.124003(-2)	-2.684056(-1)
0.6	-1.540466	-5.420084	-4.703526(-1)	-6.819274(-1)	1.963524(-2)	-2.481263(-1)
0.7	-1.552841	-5.484006	-4.736191(-1)	-6.652408(-1)	1.818522(-2)	-2.298026(-1)
0.8	-1.563221	-5.538558	-4.765355(-1)	-6.507633(-1)	1.686934(-2)	-2.131741(-1)
0.9	-1.572034	-5.585645	-4.791523(-1)	-6.380801(-1)	1.567093(-2)	-1.980302(-1)
1.0	-1.579592	-5.626660	-4.815102(-1)	-6.268831(-1)	1.457624(-2)	-1.841968(-1)
2.0	-1.618960	-5.854162	-4.961309(-1)	-5.618745(-1)	7.436879(-3)	-9.397821(-2)
5.0	-1.640255	-5.998927	-5.074690(-1)	-5.172055(-1)	1.332347(-3)	-1.683658(-2)
7.0	-1.642093	-6.014425	-5.089015(-1)	-5.121770(-1)	4.853133(-4)	-6.132798(-3)

Tabela 3.37 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Salto de Pressão  $-\gamma^*$  com  $d_2/d_1 = 1.0$

$C$	$m_2/m_1 = 2$		$m_2/m_1 = 4$		$m_2/m_1 = 5$		$m_2/m_1 = 10$	
	$MC$	$ELB^\dagger$	$MC$	$ELB^\dagger$	$MC$	$ELB^\dagger$	$MC$	$ELB^\dagger$
0.0	3.0151	3.0280	4.2640	4.2822	4.7673	4.7877	6.7420	6.7708
0.1	2.9255	2.9381	4.0442	4.0615	4.4942	4.5134	6.2570	6.2831
0.3	2.7473	2.7593	3.6106	3.6268	3.9570	3.9749	5.3119	5.3362
0.5	2.5703	2.5817	3.1832	3.1983	3.4289	3.4456	4.3893	4.4122
0.7	2.3944	2.4050	2.7604	2.7738	2.9071	2.9217	3.4805	3.5000
0.9	2.2193	2.2289	2.3409	2.3517	2.3896	2.4009	2.5801	2.5935
1.0	2.1320	2.1411	2.1320	2.1411	2.1320	2.1411	2.1320	2.1411

[Yasuda et al., 2005]<sup>†</sup>

Tabela 3.38 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Salto de Concentração  $\gamma^A - \gamma^B$  com  $d_2/d_1 = 1.0$

$C$	$m_2/m_1 = 2$		$m_2/m_1 = 4$		$m_2/m_1 = 5$		$m_2/m_1 = 10$	
	$MC$	$ELB^\dagger$	$MC$	$ELB^\dagger$	$MC$	$ELB^\dagger$	$MC$	$ELB^\dagger$
0.0	0.8182	0.8208	1.9609	1.9564	2.4206	2.4105	4.2266	4.1856
0.1	0.8202	0.8235	1.9695	1.9691	2.4324	2.4287	4.2537	4.2322
0.3	0.8240	0.8286	1.9862	1.9931	2.4551	2.4623	4.3022	4.3089
0.5	0.8276	0.8334	2.0013	2.0139	2.4754	2.4907	4.3415	4.3667
0.7	0.8309	0.8377	2.0141	2.0314	2.4923	2.5140	4.3723	4.4106
0.9	0.8339	0.8417	2.0248	2.0459	2.5060	2.5327	4.3960	4.4446
1.0	0.8353	0.8435	2.0294	2.0521	2.5118	2.5407	4.4058	4.4591

[Yasuda et al., 2005]<sup>†</sup>

Tabela 3.39 – Evaporação/Condensação em Semi-espaço: Salto de Temperatura  $-\delta^*$  com  $d_2/d_1 = 1.0$

$C$	$m_2/m_1 = 2$		$m_2/m_1 = 4$		$m_2/m_1 = 5$		$m_2/m_1 = 10$	
	$MC$	$ELB^\dagger$	$MC$	$ELB^\dagger$	$MC$	$ELB^\dagger$	$MC$	$ELB^\dagger$
0.0	0.6317	0.6443	0.8934	0.9112	0.9989	1.0187	1.4127	1.4407
0.1	0.6080	0.6197	0.8238	0.8377	0.9076	0.9219	1.2214	1.2345
0.3	0.5641	0.5746	0.7023	0.7122	0.7519	0.7608	0.9232	0.9261
0.5	0.5249	0.5347	0.6046	0.6134	0.6309	0.6388	0.7157	0.7196
0.7	0.4904	0.4997	0.5284	0.5372	0.5398	0.5483	0.5749	0.5818
0.9	0.4603	0.4693	0.4702	0.4792	0.4729	0.4819	0.4809	0.4896
1.0	0.4467	0.4556	0.4467	0.4556	0.4467	0.4556	0.4467	0.4556

[Yasuda et al., 2005]<sup>†</sup>

Tabela 3.40 – Reverso de Temperatura:  $\beta_1^T$  com  $d_2/d_1 = 1.0$ 

$C$	$m_2/m_1 = 2$	$m_2/m_1 = 4$	$m_2/m_1 = 6$	$m_2/m_1 = 8$
0.0	5.304321	6.591864	7.613616	8.474555
0.1	5.241164	6.440518	7.379384	8.161471
0.3	5.101118	6.094908	6.850937	7.465395
0.5	4.942979	5.692980	6.245176	6.681390
0.7	4.767126	5.238548	5.571915	5.825833
0.9	4.573998	4.737850	4.848605	4.928945
1.0	4.471052	4.471052	4.471052	4.471052

Tabela 3.41 – Reverso de Temperatura:  $\beta_2^T$  com  $d_2/d_1 = 1.0$ 

$C$	$m_2/m_1 = 2$	$m_2/m_1 = 4$	$m_2/m_1 = 6$	$m_2/m_1 = 8$
0.0	4.471052	4.471052	4.471052	4.471052
0.1	4.437541	4.441917	4.444845	4.443241
0.3	4.355687	4.334835	4.325476	4.311673
0.5	4.254620	4.165275	4.119198	4.079657
0.7	4.135036	3.937470	3.832134	3.753561
0.9	3.997631	3.657220	3.475798	3.349712
1.0	3.922429	3.498774	3.274142	3.121954

Tabela 3.42 – Reverso de Temperatura:  $\beta_1^Q$  com  $d_2/d_1 = 1.0$ 

$C$	$m_2/m_1 = 2$	$m_2/m_1 = 4$	$m_2/m_1 = 6$	$m_2/m_1 = 8$
0.0	3.831949	3.803795	3.787200	3.782819
0.1	3.828398	3.808105	3.795182	3.791701
0.3	3.819701	3.811610	3.804958	3.803343
0.5	3.808971	3.808513	3.806473	3.806513
0.7	3.796339	3.799073	3.799629	3.800650
0.9	3.781973	3.783728	3.784456	3.785155
1.0	3.774212	3.774212	3.774212	3.774212

Tabela 3.43 – Reverso de Temperatura:  $\beta_2^Q$  com  $d_2/d_1 = 1.0$ 

$C$	$m_2/m_1 = 2$	$m_2/m_1 = 4$	$m_2/m_1 = 6$	$m_2/m_1 = 8$
0.0	3.774212	3.774212	3.774212	3.774212
0.1	3.753978	3.722953	3.702308	3.687257
0.3	3.711517	3.611169	3.543455	3.494373
0.5	3.666568	3.488084	3.366275	3.278271
0.7	3.619358	3.355316	3.174044	3.043759
0.9	3.570146	3.214564	2.970631	2.797912
1.0	3.544881	3.141218	2.863172	2.666834

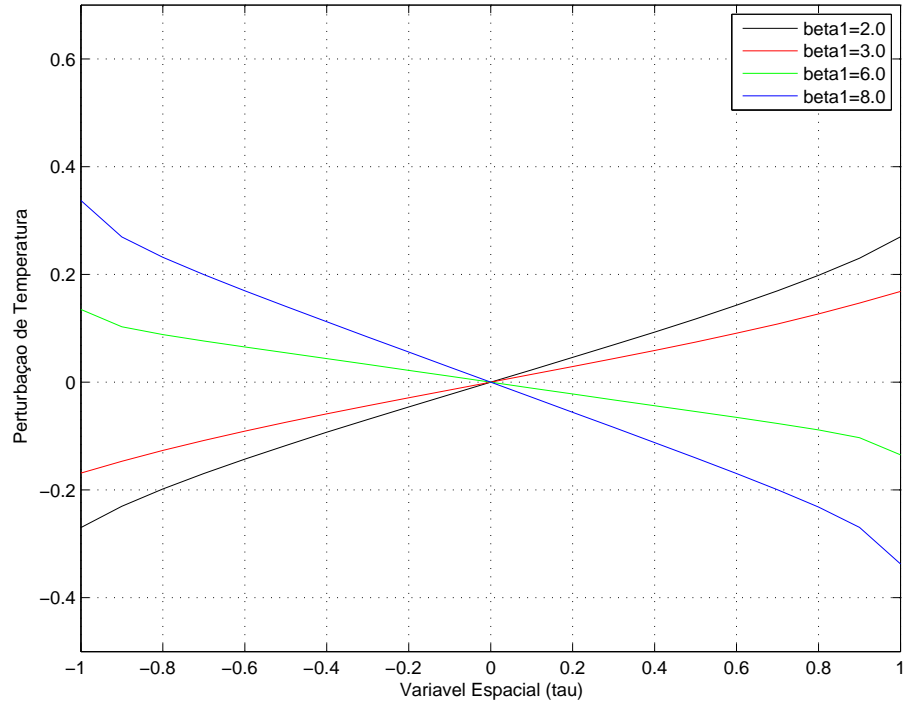


Figura 3.1 – Perturbação de Temperatura  $\Delta T_1(\tau)$  para o Caso 1 com  $2a = 2.0$ ,  $C = 0.8$  e  $\delta = 1.0$

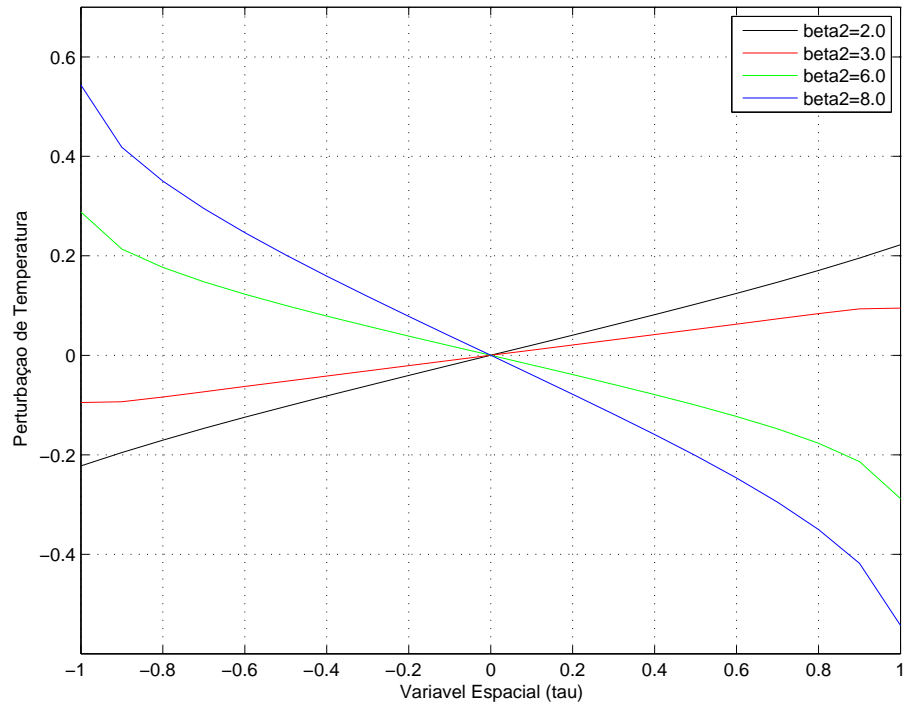


Figura 3.2 – Perturbação de Temperatura  $\Delta T_2(\tau)$  para o Caso 1 com  $2a = 2.0$ ,  $C = 0.8$  e  $\delta = 1.0$

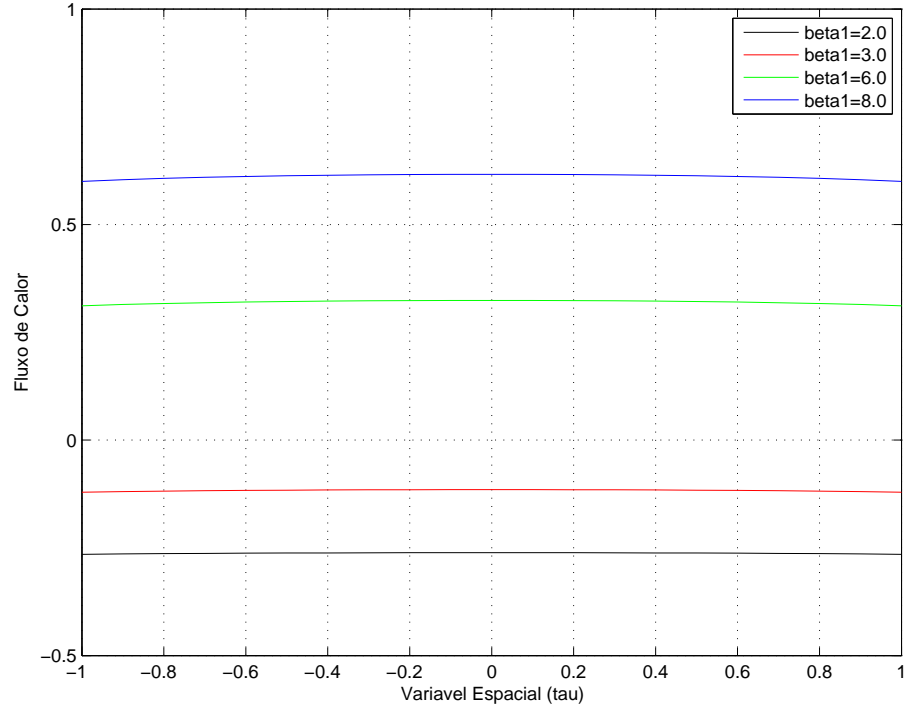


Figura 3.3 – Fluxo de Calor  $Q_1(\tau)$  para o Caso 1 com  $2a = 2.0$ ,  
 $C = 0.8$  e  $\delta = 1.0$

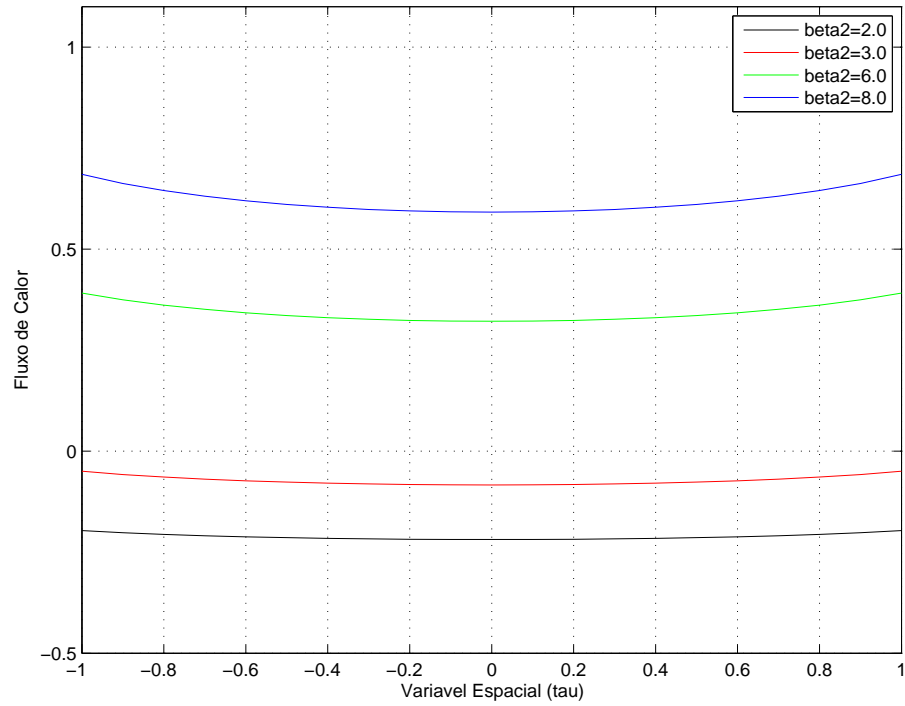


Figura 3.4 – Fluxo de Calor  $Q_2(\tau)$  para o Caso 1 com  $2a = 2.0$ ,  
 $C = 0.8$  e  $\delta = 1.0$



## 4 EVAPORAÇÃO FORTE: MODELO BGK NÃO LINEAR

Neste capítulo é abordado o problema de evaporação forte em semi-espaço, no qual, de acordo com a literatura [Sone, 1998], a velocidade de evaporação deve ser mais alta e os aspectos não lineares do modelo tornam-se mais relevantes. Neste sentido, a formulação básica neste capítulo será a versão não linear do modelo BGK [Bhatnagar et al., 1954]. Primeiramente o problema será linearizado em torno de uma distribuição Maxwelliana que contém um parâmetro  $\mathbf{u}_\infty$ , o qual representa a velocidade de equilíbrio do gás, e resolvido com o método ADO. Como a solução em ordenadas discretas tem caráter analítico podendo ser expressa em uma forma fechada, ela é usada em um procedimento, chamado aqui de pós-processamento, na equação original (que é não linear) e as quantidades macroscópicas do gás são recalculadas incluindo os efeitos não lineares.

### 4.1 Definição do Problema

Segundo Ytrehus [Ytrehus, 1976], o problema de evaporação forte de um gás rarefeito pode ser modelado com a forma estacionária do seguinte problema (dependente do tempo): um líquido (ou sólido) está inicialmente em equilíbrio com seu vapor, que ocupa o semi-espaço  $x \geq 0$  com temperatura e pressão uniformes  $T_0$  e  $p_0$ , respectivamente. No instante  $t = 0$  o nível da pressão do vapor muda descontinuamente para um valor  $p_\infty$ , que é mantido constante durante todo o procedimento. Assim, inicia-se um processo de evaporação ou de condensação através da fase condensada (localizada em  $x = 0$ ), dependendo se o nível da pressão  $p_\infty$  está abaixo ou acima da pressão de saturação  $p_0$ . Considera-se também que longe da fase condensada existe uma fonte ou um sumidouro de vapor de modo que instantaneamente um fluxo de massa é criado. Dessa forma, é razoável assumir que, após um tempo suficientemente longo para o escoamento estar completamente desenvolvido, os efeitos provocados pela mudança descontínua de pressão tendam a se estabilizar e o estado estacionário do processo é atingido. Longe da fase de transição o vapor está em seu estado de equilíbrio caracterizado por valores constantes de densidade, velocidade e temperatura representados por  $n_\infty$ ,  $\mathbf{u}_\infty$  e  $T_\infty$ . Uma camada limite cinética então é formada entre a fase condensada e a região de equilíbrio, onde os efeitos provocados pela mudança de pressão no sistema influenciam significativamente o movimento do vapor. As Figuras 4.1 e 4.2 mostram os casos de evaporação e condensação.

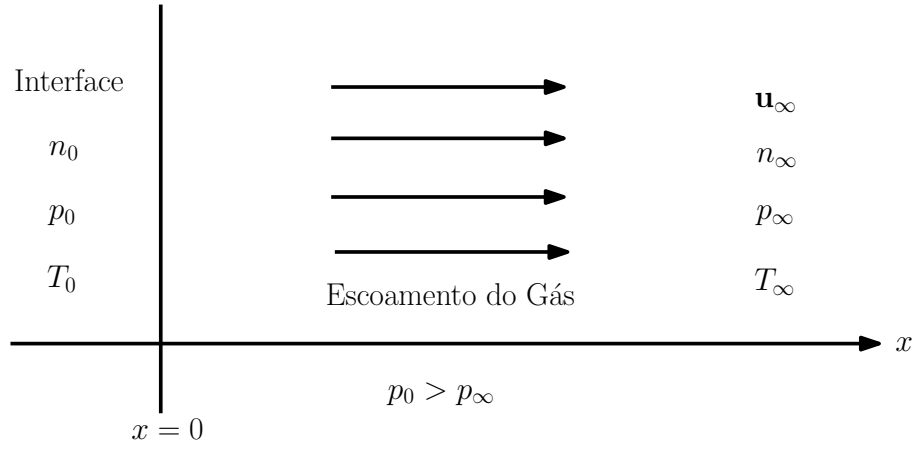


Figura 4.1 – Evaporação em Semi-Espaço

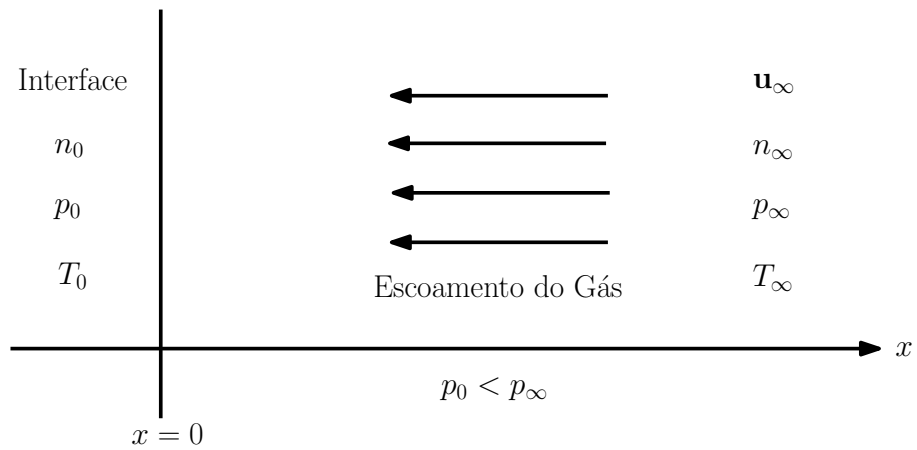


Figura 4.2 – Condensação em Semi-Espaço

## 4.2 Formulação Matemática

Para descrever o comportamento do vapor no problema de interesse aqui, adota-se a forma estacionária da versão não linear do modelo BGK [Bhatnagar et al., 1954] que, segundo Sharipov and Seleznev [Sharipov e Seleznev, 1998], é dada pela equação

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \eta[\phi(n, T, \mathbf{u}) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v})], \quad (4.1)$$

onde  $f$  é a função de distribuição de partículas,  $\eta$  é a frequência de colisão,  $\phi$  é a distribuição Maxwelliana local [Sharipov e Seleznev, 1998]

$$\phi(n, T, \mathbf{u}) = n(\mathbf{r}) \left[ \frac{m}{2\pi kT(\mathbf{r})} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m|\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r})|^2}{2kT(\mathbf{r})} \right\}, \quad (4.2)$$

$\mathbf{r} = (x, y, z)$  é o vetor espacial,  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$  é o vetor velocidade molecular,  $k$  é a constante de Boltzmann e  $m$  é a massa da partícula de gás.

Em relação as condições de contorno da Eq. (4.1), seguindo Ytrehus [Ytrehus, 1976] a emissão de partículas na interface é descrita pela distribuição Maxwelliana no semi-espaço de velocidades ( $v_x > 0$ )

$$f_0(\mathbf{v}) = n_0 \left[ \frac{m}{2\pi kT_0} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m|\mathbf{v} - \mathbf{u}_0|^2}{2kT_0} \right\}, \quad (4.3)$$

onde  $n_0$  é a densidade de saturação correspondente à temperatura  $T_0$  da fase condensada e  $\mathbf{u}_0 = (u_0, 0, 0)$  é a velocidade do vapor na interface (considerada igual a zero neste problema). Considera-se também que todas as partículas que incidem na interface estão condensando e a reemissão ocorre somente por evaporação [Ytrehus, 1976].

Seguindo Ytrehus [Ytrehus, 1976] novamente, na região de equilíbrio o vapor é Maxwelliano em todo espaço de velocidade e é descrito pela função de distribuição

$$f_{\infty}(\mathbf{v}) = n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi kT_{\infty}} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m|\mathbf{v} - \mathbf{u}_{\infty}|^2}{2kT_{\infty}} \right\}, \quad (4.4)$$

onde  $n_{\infty}$ ,  $\mathbf{u}_{\infty} = (u_{\infty}, 0, 0)$  e  $T_{\infty}$  são a densidade, a velocidade e a temperatura do vapor na região de equilíbrio (afastada da fase condensada). Assim, o objetivo é determinar as relações entre os valores de densidade e temperatura da interface e da região de equilíbrio, além das perturbações de densidade, velocidade, temperatura e também o fluxo de calor do gás na camada limite cinética.

Na Eq. (4.2) as expressões para a densidade  $n(\mathbf{r})$ , velocidade  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  e temperatura  $T(\mathbf{r})$

são dadas respectivamente por [Williams, 1971; Sharipov e Seleznev, 1998]

$$n(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z, \quad (4.5)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \frac{1}{n(\mathbf{r})} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z \quad (4.6)$$

e

$$T(\mathbf{r}) = \frac{m}{3kn(\mathbf{r})} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r})|^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z. \quad (4.7)$$

O fluxo de calor do gás é dado por

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}) = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r})|^2 [\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r})] f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z. \quad (4.8)$$

Considerando que o problema tratado aqui é unidimensional (há variação das quantidades macroscópicas apenas na direção  $x$ , normal em relação à interface), o número de variáveis independentes da função de distribuição diminui de forma que  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f(x, \mathbf{v})$ . Assim, seguindo o procedimento usado por Arthur e Cercignani [Arthur e Cercignani, 1980], é feita uma linearização do problema original em torno da distribuição Maxwelliana  $f_\infty$  dada pela Eq. (4.4), a qual contém a velocidade de equilíbrio  $\mathbf{u}_\infty$ . Dessa forma é possível incluir os efeitos causados pela evaporação forte do gás em uma abordagem linear [Cercignani, 1980]. Assim, propõe-se para a função de distribuição  $f$  a expressão

$$f(x, \mathbf{v}) = f_\infty(\mathbf{v})[1 + h(x, \mathbf{v})], \quad (4.9)$$

onde  $h$  é uma perturbação na Maxwelliana absoluta  $f_\infty$  atingida na região afastada da interface. Continuando, lineariza-se  $\phi(n, T, \mathbf{u})$ , dada pela Eq. (4.2), em torno de  $f_\infty$  e substituindo a Eq. (4.9) na Eq. (4.1) encontra-se para  $h$  a equação linearizada

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) + h(\tau, \mathbf{c}) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|\mathbf{c}' - \mathbf{u}|^2} F(\mathbf{c}', \mathbf{c} : \mathbf{u}) h(\tau, \mathbf{c}') dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (4.10)$$

onde o núcleo de espalhamento é dado por

$$F(\mathbf{c}', \mathbf{c} : \mathbf{u}) = 1 + 2(\mathbf{c}' - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{c} - \mathbf{u}) + (2/3)(|\mathbf{c}' - \mathbf{u}|^2 - 3/2)(|\mathbf{c} - \mathbf{u}|^2 - 3/2), \quad (4.11)$$

$\mathbf{u} = (u, 0, 0)$ , e as variáveis adimensionalizadas são

$$\mathbf{c} = \mathbf{v} [m/(2kT_\infty)]^{1/2}, \quad (4.12)$$

$$u = u_\infty [m/(2kT_\infty)]^{1/2} \quad (4.13)$$

e

$$\tau = x\eta [m/(2kT_\infty)]^{1/2}. \quad (4.14)$$

É importante destacar que neste trabalho o parâmetro  $\mathbf{u}$ , que representa a velocidade de equilíbrio do gás, está no lado direito da igualdade da Eq. (4.10). Nas Refs. [Arthur e Cercignani, 1980], [Siewert e Thomas, 1981] e [Siewert e Thomas, 1982], que também abordam este problema, foi feita uma mudança de variáveis que fez com que este parâmetro ficasse no lado esquerdo da equação íntegro-diferencial.

Para obter a condição de contorno para a interface em termos da perturbação  $h$ , segue-se Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1981] e aplica-se  $x = 0$  na Eq. (4.9) encontrando-se (para  $v_x > 0$ ) a condição

$$h(0, \mathbf{v}) = \frac{f_0(\mathbf{v}) - f_\infty(\mathbf{v})}{f_\infty(\mathbf{v})}. \quad (4.15)$$

Seguindo Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1981] novamente, lineariza-se  $f_0$ , dada pela Eq. (4.3), em torno de  $f_\infty$  e encontra-se para  $c_x > 0$  a condição de contorno para a interface

$$h(0, \mathbf{c}) = \Delta N_0 + 2(c_x - u)(u_w - u) + (|\mathbf{c} - \mathbf{u}|^2 - 3/2)\Delta T_0, \quad (4.16)$$

onde

$$\Delta N_0 = \frac{n_0 - n_\infty}{n_\infty}, \quad (4.17)$$

$$\Delta T_0 = \frac{T_0 - T_\infty}{T_\infty} \quad (4.18)$$

e

$$u_w = u_0 [m/(2kT_\infty)]^{1/2}. \quad (4.19)$$

Fazendo  $x \rightarrow \infty$  a função de distribuição  $f$  aproxima-se de  $f_\infty$  e a partir da Eq. (4.9) encontra-se para o infinito a condição de contorno

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} h(\tau, \mathbf{c}) = 0. \quad (4.20)$$

Substituindo a Eq. (4.9) nas Eqs. (4.5) a (4.8) encontra-se para a perturbação de densidade

$$\Delta N(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|\mathbf{c}-\mathbf{u}|^2} h(\tau, \mathbf{c}) d c_x d c_y d c_z, \quad (4.21)$$

para a perturbação de velocidade

$$\Delta U(\tau) = \frac{\pi^{-3/2}}{u} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|\mathbf{c}-\mathbf{u}|^2} (c_x - u) h(\tau, \mathbf{c}) d c_x d c_y d c_z, \quad (4.22)$$

para a perturbação de temperatura

$$\Delta T(\tau) = \frac{2}{3} \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|\mathbf{c}-\mathbf{u}|^2} (|\mathbf{c} - \mathbf{u}|^2 - 3/2) h(\tau, \mathbf{c}) d c_x d c_y d c_z \quad (4.23)$$

e para o fluxo de calor

$$Q_x(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|\mathbf{c}-\mathbf{u}|^2} (|\mathbf{c} - \mathbf{u}|^2 - 5/2) (c_x - u) h(\tau, \mathbf{c}) d c_x d c_y d c_z, \quad (4.24)$$

que são as quantidades de interesse adimensionalizadas. Ainda, nas Eqs. (4.21) a (4.23)

$$\Delta N(\tau) = \frac{n(\tau) - n_{\infty}}{n_{\infty}}, \quad (4.25)$$

$$\Delta U(\tau) = \frac{u_x(\tau) - u_{\infty}}{u_{\infty}} \quad (4.26)$$

e

$$\Delta T(\tau) = \frac{T(\tau) - T_{\infty}}{T_{\infty}}. \quad (4.27)$$

As Eqs. (4.10), (4.16), (4.20) a (4.24) constituem a formulação matemática do problema linearizado a ser resolvido. Assim, o objetivo inicial é determinar as quantidades macroscópicas do gás, dadas pelas Eqs. (4.21) a (4.24), e as relações entre densidade e temperatura da interface e da região de equilíbrio dadas pelos quocientes  $n_{\infty}/n_0$  e  $T_{\infty}/T_0$ .

### 4.3 Reformulação

Nesta seção apresenta-se uma reformulação que simplifica o problema original a fim de construir a solução em ordenadas discretas. Observa-se nas Eqs. (4.21) a (4.24) que as quantidades de interesse são definidas em termos de integrais que envolvem a perturbação  $h$ . Dessa forma, ao invés de tratar-se diretamente com a Eq. (4.10) define-se problemas auxiliares que simplificam a resolução do problema original. Assim, seguindo Siewert e Thomas [Siewert

e Thomas, 1982] definem-se as projeções

$$h_1(\tau, c_x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z \quad (4.28)$$

e

$$h_2(\tau, c_x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} (c_y^2 + c_z^2 - 1) h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z. \quad (4.29)$$

Primeiro multiplica-se a Eq. (4.10) por

$$\phi_1(c_y, c_z) = e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \quad (4.30)$$

e integra-se a equação resultante para todo  $c_y$  e todo  $c_z$ . Fazendo  $c_x = \xi$  encontra-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_1(\tau, \xi) + h_1(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi' - u)^2} [k_{11}(\xi', \xi : u) h_1(\tau, \xi') + k_{12}(\xi', \xi : u) h_2(\tau, \xi')] d\xi', \quad (4.31)$$

onde

$$k_{11}(\xi', \xi : u) = 1 + 2(\xi' - u)(\xi - u) + (2/3) [(\xi' - u)^2 - 1/2] [(\xi - u)^2 - 1/2] \quad (4.32)$$

e

$$k_{12}(\xi', \xi : u) = (2/3) [(\xi - u)^2 - 1/2]. \quad (4.33)$$

Da mesma forma multiplica-se a Eq. (4.10) por

$$\phi_2(c_y, c_z) = (c_y^2 + c_z^2 - 1) e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \quad (4.34)$$

e integra-se a equação resultante para todo  $c_y$  e todo  $c_z$ . Fazendo  $c_x = \xi$  novamente, obtém-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_2(\tau, \xi) + h_2(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi' - u)^2} [k_{21}(\xi', \xi : u) h_1(\tau, \xi') + k_{22}(\xi', \xi : u) h_2(\tau, \xi')] d\xi', \quad (4.35)$$

onde

$$k_{21}(\xi', \xi : u) = (2/3) [(\xi' - u)^2 - 1/2] \quad (4.36)$$

e

$$k_{22}(\xi', \xi : u) = 2/3. \quad (4.37)$$

Para as condições de contorno repete-se este procedimento nas Eqs. (4.16) e (4.20) obtendo-se para a interface ( $\xi > 0$ ) as condições

$$h_1(0, \xi) = \pi^{1/2} \{ \Delta N_0 + 2(\xi - u)(u_w - u) + [(\xi - u)^2 - 1/2] \Delta T_0 \} \quad (4.38)$$

e

$$h_2(0, \xi) = \pi^{1/2} \Delta T_0. \quad (4.39)$$

Para a região de equilíbrio encontra-se as condições

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} h_1(\tau, \xi) = 0 \quad (4.40)$$

e

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} h_2(\tau, \xi) = 0. \quad (4.41)$$

Repetindo novamente o procedimento nas Eqs. (4.21) a (4.24) obtém-se para a perturbação de densidade

$$\Delta N(\tau) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-u)^2} h_1(\tau, \xi) d\xi, \quad (4.42)$$

para a perturbação de velocidade

$$\Delta U(\tau) = \frac{\pi^{-1}}{u} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-u)^2} (\xi - u) h_1(\tau, \xi) d\xi, \quad (4.43)$$

para a perturbação de temperatura

$$\Delta T(\tau) = \frac{2}{3} \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-u)^2} \{ [(\xi - u)^2 - 1/2] h_1(\tau, \xi) + h_2(\tau, \xi) \} d\xi \quad (4.44)$$

e para o fluxo de calor

$$Q_x(\tau) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-u)^2} \{ [(\xi - u)^2 - 3/2] (\xi - u) h_1(\tau, \xi) + (\xi - u) h_2(\tau, \xi) \} d\xi. \quad (4.45)$$

As Eqs. (4.31) e (4.35) podem ser escritas vetorialmente como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \mathbf{H}(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi' : u) \mathbf{K}(\xi', \xi : u) \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi', \quad (4.46)$$

onde

$$\mathbf{H}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} h_1(\tau, \xi) \\ h_2(\tau, \xi) \end{bmatrix}, \quad (4.47)$$



$$\psi(\xi : u) = \pi^{-1/2} e^{-(\xi-u)^2} \quad (4.48)$$

e o núcleo de espalhamento é dado pela matriz de dimensão  $2 \times 2$

$$\mathbf{K}(\xi', \xi : u) = \begin{bmatrix} k_{11}(\xi', \xi : u) & k_{12}(\xi', \xi : u) \\ k_{21}(\xi', \xi : u) & k_{22}(\xi', \xi : u) \end{bmatrix}, \quad (4.49)$$

cujas componentes  $k_{ij}$  são dadas pelas Eqs. (4.32), (4.33), (4.36) e (4.37). As condições de contorno para a interface, dadas pelas Eqs. (4.38) e (4.39), podem ser escritas em termos do vetor  $\mathbf{H}$  (para  $\xi > 0$ ) como

$$\mathbf{H}(0, \xi) = \pi^{1/2} \left\{ \Delta N_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + 2(\xi - u)(u_w - u) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \Delta T_0 \begin{bmatrix} (\xi - u)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \right\} \quad (4.50)$$

e as condições de contorno para o infinito, dadas pelas Eqs. (4.40) e (4.41), assumem a forma

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \mathbf{H}(\tau, \xi) = \mathbf{0}. \quad (4.51)$$

As quantidades de interesse também podem ser escritas em termos do vetor  $\mathbf{H}$ . Assim, encontra-se para a perturbação de densidade

$$\Delta N(\tau) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-u)^2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{H}(\tau, \xi) d\xi, \quad (4.52)$$

para a perturbação de velocidade

$$\Delta U(\tau) = \frac{\pi^{-1}}{u} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-u)^2} \begin{bmatrix} \xi - u \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{H}(\tau, \xi) d\xi, \quad (4.53)$$

para a perturbação de temperatura

$$\Delta T(\tau) = \frac{2}{3} \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-u)^2} \begin{bmatrix} (\xi - u)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{H}(\tau, \xi) d\xi \quad (4.54)$$

e para o fluxo de calor

$$Q_x(\tau) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-u)^2} (\xi - u) \begin{bmatrix} (\xi - u)^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{H}(\tau, \xi) d\xi, \quad (4.55)$$

onde  $T$  denota a operação de transposição. Ao contrário do que ocorre em outros trabalhos onde foi usado o modelo BGK [Barichello et al., 2001; Scherer et al., 2009a; Scherer et al., 2009b], a função característica  $\psi(\xi : u)$ , dada pela Eq. (4.48), não é uma função par. Assim,

para construir a solução em ordenadas discretas deste problema, torna-se necessário reescrever a Eq. (4.46) de modo que o termo exponencial seja colocado fora da integral. Dessa forma, define-se o vetor

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = e^{-(\xi-u)^2} \mathbf{H}(\tau, \xi), \quad (4.56)$$

reescreve-se a Eq. (4.46) como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathbf{G}(\tau, \xi) = \psi(\xi : u) \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{K}(\xi', \xi : u) \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (4.57)$$

onde

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} g_1(\tau, \xi) \\ g_2(\tau, \xi) \end{bmatrix} \quad (4.58)$$

e as condições de contorno (Eqs. (4.50) e (4.51)) como

$$\mathbf{G}(0, \xi) = \pi^{1/2} e^{-(\xi-u)^2} \left\{ \Delta N_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + 2(\xi-u)(u_w - u) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \Delta T_0 \begin{bmatrix} (\xi-u)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \right\} \quad (4.59)$$

e

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{0}. \quad (4.60)$$

As quantidades de interesse também podem ser escritas em termos do vetor  $\mathbf{G}$ . Assim, encontra-se para a perturbação de densidade

$$\Delta N(\tau) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi, \quad (4.61)$$

para a perturbação de velocidade

$$\Delta U(\tau) = \frac{\pi^{-1}}{u} \int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \xi - u \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi, \quad (4.62)$$

para a perturbação de temperatura

$$\Delta T(\tau) = \frac{2}{3} \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} (\xi - u)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi \quad (4.63)$$

e para o fluxo de calor

$$Q_x(\tau) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi - u) \begin{bmatrix} (\xi - u)^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi, \quad (4.64)$$

onde  $T$  denota a operação de transposição. Na próxima seção será desenvolvida a solução em ordenadas discretas para o problema de evaporação forte.

#### 4.4 Solução em Ordenadas Discretas

Para sistemas como a Eq. (4.57) busca-se soluções exponenciais da forma

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) e^{-\tau/\nu}, \quad (4.65)$$

onde

$$\mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \begin{bmatrix} \Phi_1(\nu, \xi) \\ \Phi_2(\nu, \xi) \end{bmatrix}. \quad (4.66)$$

Substituindo a Eq. (4.65) na Eq. (4.57) encontra-se

$$(1 - \xi/\nu) \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \psi(\xi : u) \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{K}(\xi', \xi : u) \mathbf{\Phi}(\nu, \xi') d\xi'. \quad (4.67)$$

Seguindo o procedimento utilizado por Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1981], a Eq. (4.67) pode ser simplificada usando algumas condições de normalização. Assim, integrando a primeira componente da Eq. (4.67) para todo  $\xi$  encontra-se a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \xi \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) d\xi = 0. \quad (4.68)$$

Multiplicando agora a primeira componente da Eq. (4.67) por  $(\xi - u)$ , integrando a equação resultante para todo  $\xi$  e usando a Eq. (4.68) encontra-se a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \xi^2 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) d\xi = 0. \quad (4.69)$$

Assim, usando condições de normalização mostradas nas Eqs. (4.68) e (4.69), a Eq. (4.67) pode ser reescrita como

$$(1 - \xi/\nu) \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \psi(\xi : u) \mathbf{Q}(\xi : u) \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Phi}(\nu, \xi') d\xi', \quad (4.70)$$

onde a matriz de dimensão  $2 \times 2$

$$\mathbf{Q}(\xi : u) = \begin{bmatrix} q_{11}(\xi : u) & q_{12}(\xi : u) \\ q_{21}(\xi : u) & q_{22}(\xi : u) \end{bmatrix} \quad (4.71)$$

possui as componentes

$$q_{11}(\xi : u) = 1 - 2u(\xi - u) + (2/3)(u^2 - 1/2)[(\xi - u)^2 - 1/2], \quad (4.72)$$

$$q_{12}(\xi : u) = (2/3)[(\xi - u)^2 - 1/2], \quad (4.73)$$

$$q_{21}(\xi : u) = (2/3)(u^2 - 1/2) \quad (4.74)$$

e

$$q_{22}(\xi : u) = 2/3. \quad (4.75)$$

A função característica  $\psi(\xi : u)$ , dada pela Eq. (4.48), pode ser reescrita como uma soma de uma função par e uma função ímpar da forma

$$\psi(\xi : u) = \pi^{-1/2} \cosh(2\xi u) e^{-(\xi^2 + u^2)} + \pi^{-1/2} \sinh(2\xi u) e^{-(\xi^2 + u^2)}. \quad (4.76)$$

Assim, usando a Eq. (4.76), a Eq. (4.70) pode ser reescrita como

$$(1 - \xi/\nu) \Phi(\nu, \xi) = P(\xi : u) [\mathbf{A}(\xi : u) + \mathbf{B}(\xi : u)] \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\nu, \xi') d\xi', \quad (4.77)$$

onde

$$P(\xi : u) = \pi^{-1/2} e^{-(\xi^2 + u^2)} \quad (4.78)$$

e as matrizes de dimensão  $2 \times 2$

$$\mathbf{A}(\xi : u) = \begin{bmatrix} a_{11}(\xi : u) & a_{12}(\xi : u) \\ a_{21}(\xi : u) & a_{22}(\xi : u) \end{bmatrix} \quad (4.79)$$

e

$$\mathbf{B}(\xi : u) = \begin{bmatrix} b_{11}(\xi : u) & b_{12}(\xi : u) \\ b_{21}(\xi : u) & b_{22}(\xi : u) \end{bmatrix} \quad (4.80)$$

possuem as componentes

$$a_{11}(\xi : u) = [1 + 2u^2 + (2/3)(u^2 - 1/2)(\xi^2 + u^2 - 1/2)]\cosh(2\xi u) - [(4/3)u^3\xi + (4/3)u\xi]\sinh(2\xi u), \quad (4.81)$$

$$a_{12}(\xi : u) = (2/3)(\xi^2 + u^2 - 1/2)\cosh(2\xi u) - (4/3)u\xi\sinh(2\xi u), \quad (4.82)$$

$$a_{21}(\xi : u) = (2/3)(u^2 - 1/2)\cosh(2\xi u), \quad (4.83)$$

$$a_{22}(\xi : u) = (2/3)\cosh(2\xi u), \quad (4.84)$$

$$b_{11}(\xi : u) = [1 + 2u^2 + (2/3)(u^2 - 1/2)(\xi^2 + u^2 - 1/2)]\sinh(2\xi u) - [(4/3)u^3\xi + (4/3)u\xi]\cosh(2\xi u), \quad (4.85)$$

$$b_{12}(\xi : u) = (2/3)(\xi^2 + u^2 - 1/2)\sinh(2\xi u) - (4/3)u\xi\cosh(2\xi u), \quad (4.86)$$

$$b_{21}(\xi : u) = (2/3)(u^2 - 1/2)\sinh(2\xi u) \quad (4.87)$$

e

$$b_{22}(\xi : u) = (2/3)\sinh(2\xi u). \quad (4.88)$$

Neste momento reescreve-se o termo integral da Eq. (4.77) como

$$(1 - \xi/\nu)\Phi(\nu, \xi) = P(\xi : u)[\mathbf{A}(\xi : u) + \mathbf{B}(\xi : u)] \int_0^\infty [\Phi(\nu, \xi') + \Phi(\nu, -\xi')]d\xi'. \quad (4.89)$$

Introduzindo um esquema de quadratura para o intervalo  $[0, \infty)$  pode-se aproximar o termo integral da equação acima de modo que

$$(1 - \xi/\nu)\Phi(\nu, \xi) = P(\xi : u)[\mathbf{A}(\xi : u) + \mathbf{B}(\xi : u)] \sum_{k=1}^N w_k [\Phi(\nu, \xi_k) + \Phi(\nu, -\xi_k)], \quad (4.90)$$

onde  $\xi_k$  e  $w_k$  são, respectivamente, os  $N$  pontos e pesos de um esquema (arbitrário) de quadratura. Aplicando  $\xi = \pm\xi_i$ , para  $i = 1, \dots, N$ , na equação acima e notando que as funções  $P(\xi : u)$  e  $\mathbf{A}(\xi : u)$  são funções pares

$$P(\xi : u) = P(-\xi : u) \quad \text{e} \quad \mathbf{A}(\xi : u) = \mathbf{A}(-\xi : u), \quad (4.91)$$

e que a função  $\mathbf{B}(\xi : u)$  é uma função ímpar

$$\mathbf{B}(\xi : u) = -\mathbf{B}(-\xi : u), \quad (4.92)$$

obtém-se a versão em ordenadas discretas da Eq. (4.90) dada por

$$(1 \mp \xi_i/\nu)\Phi(\nu, \pm\xi_i) = P(\xi_i : u)[\mathbf{A}(\xi_i : u) \pm \mathbf{B}(\xi_i : u)] \sum_{k=1}^N w_k [\Phi(\nu, \xi_k) + \Phi(\nu, -\xi_k)], \quad (4.93)$$

a qual pode ser escrita na forma matricial como

$$(\mathbf{I} - \nu^{-1}\mathbf{M})\Phi_+(\nu) = \mathbf{P}[\mathbf{A} + \mathbf{B}]\mathbf{W}[\Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu)] \quad (4.94)$$

e

$$(\mathbf{I} + \nu^{-1}\mathbf{M})\Phi_-(\nu) = \mathbf{P}[\mathbf{A} - \mathbf{B}]\mathbf{W}[\Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu)], \quad (4.95)$$

onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade de dimensão  $2N \times 2N$ ,  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{W}$  são as matrizes de dimensão  $2N \times 2N$  definidas como

$$\mathbf{M} = \text{diag} \{ \xi_1, \dots, \xi_N, \xi_1, \dots, \xi_N \}, \quad (4.96)$$

$$\mathbf{P} = \text{diag} \{ P(\xi_1 : u), \dots, P(\xi_N : u), P(\xi_1 : u), \dots, P(\xi_N : u) \}, \quad (4.97)$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{11} & \mathbf{a}_{12} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{22} \end{bmatrix}, \quad (4.98)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_{11} & \mathbf{b}_{12} \\ \mathbf{b}_{21} & \mathbf{b}_{22} \end{bmatrix}, \quad (4.99)$$

onde nas Eqs. (4.98) e (4.99) as submatrizes componentes de dimensão  $N \times N$  são dadas por

$$\mathbf{a}_{ij} = \text{diag} \{ a_{ij}(\xi_1 : u), \dots, a_{ij}(\xi_N : u) \} \quad (4.100)$$

e

$$\mathbf{b}_{ij} = \text{diag} \{ b_{ij}(\xi_1 : u), \dots, b_{ij}(\xi_N : u) \}, \quad (4.101)$$

para  $i, j = 1, 2$ . Continuando,

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \mathbf{w} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{w} \end{bmatrix} \quad (4.102)$$

onde a submatriz  $\mathbf{w}$  de dimensão  $N \times N$  é dada por

$$[\mathbf{w}]_{i,j} = w_j, \quad (4.103)$$

para  $i, j = 1, \dots, N$ , e os vetores  $2N \times 1$   $\Phi_{\pm}(\nu)$  são dados por

$$\Phi_{\pm}(\nu) = \left[ \Phi_1(\nu, \pm\xi_1) \quad \cdots \quad \Phi_1(\nu, \pm\xi_N) \quad \Phi_2(\nu, \pm\xi_1) \quad \cdots \quad \Phi_2(\nu, \pm\xi_N) \right]^T. \quad (4.104)$$

Somando e subtraindo as Eqs. (4.94) e (4.95) encontra-se

$$\mathbf{U} - \nu^{-1}\mathbf{M}\mathbf{V} = 2\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{W}\mathbf{U} \quad (4.105)$$

e

$$\mathbf{V} - \nu^{-1}\mathbf{M}\mathbf{U} = 2\mathbf{P}\mathbf{B}\mathbf{W}\mathbf{U}, \quad (4.106)$$

onde

$$\mathbf{U} = \Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu) \quad (4.107)$$

e

$$\mathbf{V} = \Phi_+(\nu) - \Phi_-(\nu). \quad (4.108)$$

Substituindo a Eq. (4.106) na Eq. (4.105) encontra-se o problema de autovalor quadrático de dimensão  $2N \times 2N$

$$(\mathbf{I}\lambda^2 + \mathbf{\Xi}\lambda + \mathbf{\Pi})\mathbf{U} = \mathbf{0}, \quad (4.109)$$

onde

$$\mathbf{\Xi} = 2\mathbf{M}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{B}\mathbf{W}, \quad (4.110)$$

$$\mathbf{\Pi} = 2\mathbf{M}^{-2}\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{W} - \mathbf{M}^{-2} \quad (4.111)$$

e

$$\lambda = \nu^{-1}. \quad (4.112)$$

Seguindo o procedimento proposto por Datta [Datta, 1995], reescreve-se a Eq. (4.109) como

$$(-\mathbf{\Pi} - \mathbf{\Xi}\lambda)\mathbf{U} = \lambda^2\mathbf{U} \quad (4.113)$$

e dessa forma o problema de autovalor quadrático (Eq. (4.109)) pode ser transformado no problema de autovalor padrão de dimensão  $4N \times 4N$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{\Pi} & -\mathbf{\Xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \lambda\mathbf{U} \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \lambda\mathbf{U} \end{bmatrix}. \quad (4.114)$$

Resolvendo este problema de autovalor obtém-se um conjunto de  $4N$  constantes de separação  $\nu_j$  (positivas ou negativas) e  $4N$  autovetores  $\mathbf{U}(\nu_j)$ . Usando as Eqs. (4.105) e (4.106) encontra-se as soluções elementares de dimensão  $2N \times 1$

$$\mathbf{\Phi}_+(\nu_j) = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{\nu_j} \mathbf{M} + \mathbf{I} + 2\mathbf{PBW} \right] \mathbf{U}(\nu_j) \quad (4.115)$$

e

$$\mathbf{\Phi}_-(\nu_j) = -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{\nu_j} \mathbf{M} - \mathbf{I} + 2\mathbf{PBW} \right] \mathbf{U}(\nu_j). \quad (4.116)$$

É importante salientar que em nenhum outro trabalho onde foi utilizado o método ADO encontrou-se um problema de autovalor quadrático como o da Eq. (4.109). Portanto, o desenvolvimento da solução ADO mostrado neste capítulo é diferenciado e acredita-se que esta é uma das contribuições relevantes deste trabalho para a área da dinâmica de gases rarefeitos.

Determinadas as constantes de separação  $\nu_j$  e as soluções elementares  $\mathbf{\Phi}_+(\nu_j)$  e  $\mathbf{\Phi}_-(\nu_j)$ , pode-se então escrever a solução em ordenadas discretas do problema  $\mathbf{G}$  dado pela Eq. (4.57) como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{4N} A_j \mathbf{\Phi}(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\tau/\nu_j}. \quad (4.117)$$

Como problemas em gases rarefeitos são conservativos, de acordo com Case e Zweifel [Case e Zweifel, 1967] alguns autovalores se aproximam de zero (constantes de separação tendem ao infinito) quando  $N$  tende ao infinito. Neste problema o número de autovalores degenerados, bem como a quantidade de autovalores positivos ou negativos, depende da escolha do valor do parâmetro  $u$ , que está associado à velocidade do gás na região de equilíbrio. Assim,



- para  $u = 0$  encontra-se quatro autovalores degenerados,  $2N - 2$  autovalores positivos e também  $2N - 2$  autovalores negativos;
- para  $0 < u^2 < 5/6$  encontra-se três autovalores degenerados,  $2N - 2$  autovalores positivos e  $2N - 1$  autovalores negativos;
- para  $u^2 = 5/6$  encontra-se quatro autovalores degenerados,  $2N - 3$  autovalores positivos e  $2N - 1$  autovalores negativos;
- para  $u^2 > 5/6$  encontra-se três autovalores degenerados,  $2N - 3$  autovalores positivos e  $2N$  autovalores negativos.

Conseqüentemente a solução em ordenadas discretas pode ser escrita para  $u = 0$  e para  $u^2 = 5/6$  como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = A_1^* \mathbf{G}_1(\pm\xi_i) + A_2^* \mathbf{G}_2(\pm\xi_i) + A_3^* \mathbf{G}_3(\pm\xi_i) + A_4^* \mathbf{G}_4(\tau, \pm\xi_i) + \sum_{j=1}^{4N-4} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\tau/\nu_j} \quad (4.118)$$

e para  $0 < u^2 < 5/6$  e  $u^2 > 5/6$  como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = A_1^* \mathbf{G}_1(\pm\xi_i) + A_2^* \mathbf{G}_2(\pm\xi_i) + A_3^* \mathbf{G}_3(\pm\xi_i) + \sum_{j=1}^{4N-3} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\tau/\nu_j}, \quad (4.119)$$

onde as soluções exatas  $\mathbf{G}_1$ ,  $\mathbf{G}_2$  e  $\mathbf{G}_3$  da Eq. (4.57) foram encontradas seguindo a Ref. [Siewert e Thomas, 1982] e são dadas por

$$\mathbf{G}_1(\xi) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-(\xi-u)^2}, \quad (4.120)$$

$$\mathbf{G}_2(\xi) = \begin{bmatrix} \xi - u \\ 0 \end{bmatrix} e^{-(\xi-u)^2} \quad (4.121)$$

e

$$\mathbf{G}_3(\xi) = \begin{bmatrix} (\xi - u)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} e^{-(\xi-u)^2}. \quad (4.122)$$

Para encontrar a quarta solução exata, presente apenas na Eq. (4.118), propõe-se para  $\mathbf{G}_4(\tau, \xi)$  uma expressão da forma

$$\mathbf{G}_4(\tau, \xi) = (\mathbf{A}\tau\xi^2 + \mathbf{B}\tau\xi + \mathbf{C}\tau + \mathbf{D}\xi^3 + \mathbf{E}\xi^2 + \mathbf{F}\xi + \mathbf{G})e^{-(\xi-u)^2}, \quad (4.123)$$

onde  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{F}$  e  $\mathbf{G}$  são vetores constantes de dimensão  $2 \times 1$ . Substituindo a Eq. (4.123) na Eq. (4.57) encontra-se para  $u^2 = 5/6$

$$\mathbf{G}_4(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} \tau(\xi - u)^2 - 3u\tau(\xi - u) + \tau - (\xi - u)^3 + 3u(\xi - u)^2 \\ \tau - (\xi - u) \end{bmatrix} e^{-(\xi - u)^2} \quad (4.124)$$

e para  $u = 0$

$$\mathbf{G}_4(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} \tau\xi^2 - 3\tau/2 - \xi^3 \\ \tau - \xi \end{bmatrix} e^{-\xi^2}. \quad (4.125)$$

O próximo passo é determinar os coeficientes  $A_1^*$ ,  $A_2^*$ ,  $A_3^*$ ,  $A_4^*$  e  $A_j$ , para  $j = 1, \dots, 4N-3$ , nas Eqs. (4.118) e (4.119). Assim, usando a Eq. (4.60) encontra-se que os coeficientes  $A_1^*$ ,  $A_2^*$ ,  $A_3^*$ ,  $A_4^*$  e também os coeficientes  $A_j$  associados às constantes de separação negativas devem ser iguais a zero. Dessa forma, a solução em ordenadas discretas é reescrita para  $u^2 < 5/6$  como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\tau/\nu_j} \quad (4.126)$$

e para  $u^2 \geq 5/6$  como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{2N-3} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\tau/\nu_j}, \quad (4.127)$$

onde agora  $\nu_j$  são apenas as constantes de separação positivas.

Continuando, substitui-se a Eq. (4.126) na versão em ordenadas discretas da condição de contorno dada pela Eq. (4.59)

$$\mathbf{G}(0, \xi_i) = \pi^{1/2} [\Delta N_0 \mathbf{G}_1(\xi_i) + 2(u_w - u) \mathbf{G}_2(\xi_i) + \Delta T_0 \mathbf{G}_3(\xi_i)], \quad (4.128)$$

para  $i = 1, \dots, N$ , onde  $\mathbf{G}_1$ ,  $\mathbf{G}_2$  e  $\mathbf{G}_3$  são dadas pelas Eqs. (4.120) a (4.122), e encontra-se para  $u^2 < 5/6$  o sistema linear quadrado com  $2N$  equações e  $2N$  incógnitas

$$\sum_{j=1}^{2N-2} A_j \Phi(\nu_j, \xi_i) - \pi^{1/2} [\Delta N_0 \mathbf{G}_1(\xi_i) + \Delta T_0 \mathbf{G}_3(\xi_i)] = 2\pi^{1/2} (u_w - u) \mathbf{G}_2(\xi_i), \quad (4.129)$$

para  $i = 1, \dots, N$ . Da mesma forma, substitui-se a Eq. (4.127) na Eq. (4.128) e encontra-se para  $u^2 \geq 5/6$  o sistema linear retangular com  $2N$  equações e  $2N - 1$  incógnitas

$$\sum_{j=1}^{2N-3} A_j \Phi(\nu_j, \xi_i) - \pi^{1/2} [\Delta N_0 \mathbf{G}_1(\xi_i) + \Delta T_0 \mathbf{G}_3(\xi_i)] = 2\pi^{1/2} (u_w - u) \mathbf{G}_2(\xi_i), \quad (4.130)$$

para  $i = 1, \dots, N$ . Resolvendo os sistemas lineares mostrados nas equações acima obtém-se os coeficientes  $A_j$  e as quantidades  $\Delta N_0$  e  $\Delta T_0$  definidas nas Eqs. (4.17) e (4.18).

Um aspecto importante que pode ser observado neste ponto é a questão da existência da solução para este problema, que depende do valor de  $u$ . Nota-se pela Eq. (4.129) que para  $u^2 < 5/6$  o sistema linear a ser resolvido possui o mesmo número de equações e de incógnitas, enquanto que para  $u^2 \geq 5/6$  o sistema linear (Eq. (4.130)) possui uma equação a mais que o número de incógnitas. Por isso este último sistema necessita ser resolvido com o método de mínimos quadrados. Entretanto, para este caso observa-se que os resultados das quantidades de interesse não convergem a medida que se aumenta o número de pontos de quadratura no método ADO, o que toma-se como evidência que este problema de evaporação forte não tem solução quando  $u^2 \geq 5/6$ . De fato, já havia sido demonstrado por Arthur e Cercignani [Arthur e Cercignani, 1980] e também verificado por Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1982] que este problema possui solução apenas quando  $u < \sqrt{5/6}$ , o que corresponde a  $Ma < 1$ .

#### 4.5 Quantidades de Interesse

O passo seguinte é determinar as quantidades de interesse dadas pelas Eqs. (4.61) a (4.64). Assim, substituindo a Eq. (4.126) na Eq. (4.61) obtém-se para a perturbação de densidade

$$\Delta N(\tau) = \pi^{-1} \sum_{j=1}^{2N-2} A_j e^{-\tau/\nu_j} \mathbf{X}(\nu_j). \quad (4.131)$$

Da mesma forma substituindo a Eq. (4.126) na Eq. (4.62) e usando a condição de normalização dada pela Eq. (4.68) obtém-se para a perturbação de velocidade

$$\Delta U(\tau) = -\Delta N(\tau). \quad (4.132)$$

Substituindo a Eq. (4.126) na Eq. (4.63) e usando as condições de normalização dadas pelas Eqs. (4.68) e (4.69) obtém-se para a perturbação de temperatura

$$\Delta T(\tau) = \frac{2}{3} \pi^{-1} \sum_{j=1}^{2N-2} A_j e^{-\tau/\nu_j} \mathbf{Y}(\nu_j). \quad (4.133)$$

Para se obter a expressão para o fluxo de calor multiplica-se a primeira componente da Eq. (4.67) por  $(\xi - u)^2$  e integra-se a equação resultante para todo  $\xi$ . Da mesma forma integra-se a segunda componente da Eq. (4.67) para todo  $\xi$  e, usando as Eqs. (4.68) e (4.69), encontra-se

a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \xi^3 \\ \xi \end{bmatrix}^T \Phi(\nu, \xi) d\xi = 0. \quad (4.134)$$

Assim, substituindo a Eq. (4.126) na Eq. (4.64) e usando as Eqs. (4.68), (4.69) e (4.134) encontra-se para o fluxo de calor

$$Q_x(\tau) = -u\pi^{-1} \sum_{j=1}^{2N-2} A_j e^{-\tau/\nu_j} \mathbf{Z}(\nu_j). \quad (4.135)$$

Nas Eqs. (4.131), (4.133) e (4.135)

$$\mathbf{X}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (4.136)$$

$$\mathbf{Y}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \begin{bmatrix} u^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (4.137)$$

e

$$\mathbf{Z}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \begin{bmatrix} u^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (4.138)$$

## 4.6 Tratamento da Não Linearidade

Nesta seção busca-se um tratamento para os termos não lineares incluídos no modelo. Para isso são feitos dois pós-processamentos utilizando a solução em ordenadas discretas, dada pela Eq. (4.126), e as expressões para as quantidades de interesse dadas pelas Eqs. (4.131) a (4.133). Isso é possível se fazer pois a solução em ordenadas discretas é analítica para a variável espacial e possui uma expressão em forma fechada.

### 4.6.1 Pós-processamento para recalculer os quocientes $n_\infty/n_0$ e $T_\infty/T_0$

Inicialmente é feito um pós-processamento (chamado de Caso 1), utilizando a solução em ordenadas discretas do problema linearizado, para recalculer os quocientes  $n_\infty/n_0$  e  $T_\infty/T_0$  sem linearizar as condições de contorno. A idéia de fazer este pós-processamento foi obtida através do trabalho de Ytrehus [Ytrehus, 1976] onde foi construído um sistema não linear, o qual foi resolvido numericamente, para determinar estes quocientes.

Assim, como no problema tratado aqui existe variação das quantidades de interesse apenas na direção  $x$  (normal em relação à interface), tem-se que  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f(x, \mathbf{v})$  e a Eq. (4.1) pode ser reescrita como

$$v_x \frac{\partial}{\partial x} f(x, \mathbf{v}) = \eta[\phi(n, T, u_x) - f(x, \mathbf{v})], \quad (4.139)$$

com

$$\phi(n, T, u_x) = n(x) \left[ \frac{m}{2\pi kT(x)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m[(v_x - u_x(x))^2 + v_y^2 + v_z^2]}{2kT(x)} \right\}. \quad (4.140)$$

Integrando a Eq. (4.139) para todo  $v_x$ ,  $v_y$  e  $v_z$  encontra-se

$$\frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} v_x f(x, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z = 0. \quad (4.141)$$

Multiplicando a Eq. (4.139) por  $(v_x - u_x(x))$  e integrando a equação resultante para todo  $v_x$ ,  $v_y$  e  $v_z$  encontra-se

$$\frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} v_x (v_x - u_x(x)) f(x, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z = 0, \quad (4.142)$$

o que implica que as expressões

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} v_x f(x, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z \quad (4.143)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 f(x, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z \quad (4.144)$$

independem de  $x$ . Fazendo  $x = 0$  e  $x \rightarrow \infty$  nas Eqs. (4.143) e (4.144) e usando as adimensionalizações dadas pelas Eqs. (4.12) a (4.14) encontra-se as equações

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x f_0(\mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x f_{\infty}(\mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z \quad (4.145)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x^2 f_0(\mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x^2 f_{\infty}(\mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z, \quad (4.146)$$

as quais podem ser reescritas como

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x f_0(c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x f_0(-c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x f_{\infty}(c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z \quad (4.147)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x^2 f_0(c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x^2 f_0(-c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x^2 f_{\infty}(c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z. \quad (4.148)$$

As expressões para  $f_{\infty}(c_x, c_y, c_z)$  e  $f_0(c_x, c_y, c_z)$  (para  $c_x > 0$ ) são dadas pelas versões adimensionalizadas das condições de contorno (Eqs. (4.3) e (4.4)) que são

$$f_0(c_x, c_y, c_z) = n_0 \left[ \frac{m}{2\pi k T_0} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{T_{\infty}}{T_0} [(c_x - u_w)^2 + c_y^2 + c_z^2] \right\} \quad (4.149)$$

e

$$f_{\infty}(c_x, c_y, c_z) = n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{\infty}} \right]^{3/2} \exp \left\{ -[(c_x - u)^2 + c_y^2 + c_z^2] \right\}. \quad (4.150)$$

Para  $f_0(-c_x, c_y, c_z)$ , que representa as partículas que incidem na interface, usa-se novamente a expressão em termos da perturbação  $h$  dada por

$$f(\tau, \mathbf{c}) = f_{\infty}(\mathbf{c})[1 + h(\tau, \mathbf{c})]. \quad (4.151)$$

No processo de derivação do aqui chamado esquema de pós-processamento novamente faz-se necessário o uso e definição de momentos da perturbação  $h$ . Neste sentido, a solução do problema  $\mathbf{G}$  (que é conhecida) pode ser utilizada para representar as partículas que incidem na interface. Assim, aplicando  $\tau = 0$  e  $c_x = -c_x$  na Eq. (4.151) encontra-se para  $c_x > 0$

$$f_0(-c_x, c_y, c_z) = f_{\infty}(-c_x, c_y, c_z)[1 + h(0, -c_x, c_y, c_z)], \quad (4.152)$$

onde, a partir da Eq. (4.150),

$$f_{\infty}(-c_x, c_y, c_z) = n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{\infty}} \right]^{3/2} \exp \left\{ -[(c_x + u)^2 + c_y^2 + c_z^2] \right\}. \quad (4.153)$$

Inserindo a Eq. (4.152) nas Eqs. (4.147) e (4.148) encontra-se

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x f_0(c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z \\ & \quad - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x f_{\infty}(-c_x, c_y, c_z) h(0, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z \\ & \quad = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x f_{\infty}(c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z \end{aligned} \quad (4.154)$$

e

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x^2 f_0(c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z \\
& \quad + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x^2 f_{\infty}(-c_x, c_y, c_z) h(0, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z \\
& \quad = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x^2 f_{\infty}(c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z. \quad (4.155)
\end{aligned}$$

Aplicando as Eqs. (4.149), (4.150) e (4.153) nas Eqs. (4.154) e (4.155) encontra-se

$$\begin{aligned}
n_0 \left[ \frac{m}{2\pi k T_0} \right]^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x e^{-\frac{T_{\infty}}{T_0} [(c_x - u_w)^2 + c_y^2 + c_z^2]} dc_x dc_y dc_z - \\
n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{\infty}} \right]^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x e^{-[(c_x + u)^2 + c_y^2 + c_z^2]} h(0, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z = \\
n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{\infty}} \right]^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x e^{-[(c_x - u)^2 + c_y^2 + c_z^2]} dc_x dc_y dc_z \quad (4.156)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
n_0 \left[ \frac{m}{2\pi k T_0} \right]^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x^2 e^{-\frac{T_{\infty}}{T_0} [(c_x - u_w)^2 + c_y^2 + c_z^2]} dc_x dc_y dc_z + \\
n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{\infty}} \right]^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x^2 e^{-[(c_x + u)^2 + c_y^2 + c_z^2]} h(0, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z = \\
n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{\infty}} \right]^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} c_x^2 e^{-[(c_x - u)^2 + c_y^2 + c_z^2]} dc_x dc_y dc_z. \quad (4.157)
\end{aligned}$$

Calculando as integrais em  $c_y$  e  $c_z$  e usando a primeira projeção do problema **H** dada pela Eq. (4.28)

$$h_1(\tau, c_x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z, \quad (4.158)$$

as Eqs. (4.156) e (4.157) podem ser reescritas como

$$\begin{aligned}
\frac{n_0}{\sqrt{T_0}} \int_0^{\infty} c_x e^{-\frac{T_{\infty}}{T_0} (c_x - u_w)^2} dc_x - \\
\frac{n_{\infty}}{\sqrt{T_{\infty}}} \pi^{-1/2} \int_0^{\infty} c_x e^{-(c_x + u)^2} h_1(0, -c_x) dc_x = \\
\frac{n_{\infty}}{\sqrt{T_{\infty}}} \int_0^{\infty} c_x e^{-(c_x - u)^2} dc_x \quad (4.159)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{n_0}{\sqrt{T_0}} \int_0^\infty c_x^2 e^{-\frac{T_\infty}{T_0}(c_x-u_w)^2} dc_x + \\ \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \pi^{-1/2} \int_0^\infty c_x^2 e^{-(c_x+u)^2} h_1(0, -c_x) dc_x = \\ \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \int_0^\infty c_x^2 e^{-(c_x-u)^2} dc_x. \end{aligned} \quad (4.160)$$

Usando agora a função  $g_1$ , que é a definição da primeira componente do vetor  $\mathbf{G}$  (Eqs. (4.56) e (4.58)) dada por

$$g_1(\tau, c_x) = e^{-(c_x+u)^2} h_1(\tau, c_x) \quad (4.161)$$

e aplicando  $\tau = 0$  e  $c_x = -c_x$  na equação acima encontra-se que

$$g_1(0, -c_x) = e^{-(c_x+u)^2} h_1(0, -c_x). \quad (4.162)$$

Assim, usando a Eq. (4.162) e seguindo Ytrehus [Ytrehus, 1976], que considera neste problema  $u_w = 0$ , as Eqs. (4.159) e (4.160) podem ser reescritas como

$$\frac{n_0}{\sqrt{T_0}} \int_0^\infty c_x e^{-\frac{T_\infty}{T_0} c_x^2} dc_x - \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \pi^{-1/2} \int_0^\infty c_x g_1(0, -c_x) dc_x = \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \int_0^\infty c_x e^{-(c_x-u)^2} dc_x \quad (4.163)$$

e

$$\frac{n_0}{\sqrt{T_0}} \int_0^\infty c_x^2 e^{-\frac{T_\infty}{T_0} c_x^2} dc_x + \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \pi^{-1/2} \int_0^\infty c_x^2 g_1(0, -c_x) dc_x = \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \int_0^\infty c_x^2 e^{-(c_x-u)^2} dc_x. \quad (4.164)$$

O fato de considerar  $u_w = 0$  torna possível resolver analiticamente as integrais da esquerda das Eqs. (4.163) e (4.164) encontrando-se

$$\frac{1}{2} \frac{n_0 \sqrt{T_0}}{T_\infty} - \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \pi^{-1/2} \int_0^\infty c_x g_1(0, -c_x) dc_x = \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \int_0^\infty c_x e^{-(c_x-u)^2} dc_x \quad (4.165)$$

e

$$\frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{n_0 T_0}{T_\infty^{3/2}} + \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \pi^{-1/2} \int_0^\infty c_x^2 g_1(0, -c_x) dc_x = \frac{n_\infty}{\sqrt{T_\infty}} \int_0^\infty c_x^2 e^{-(c_x-u)^2} dc_x. \quad (4.166)$$

Escrevendo as integrais acima em termos da mesma quadratura para o intervalo  $[0, \infty)$  utilizada no método ADO e usando o vetor  $\mathbf{G}$ , dado pela Eq. (4.58), encontra-se

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_\infty}} - \frac{n_\infty}{n_0} \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(0, -\xi_k) = \frac{n_\infty}{n_0} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k e^{-(\xi_k-u)^2} \quad (4.167)$$



e

$$\frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{T_0}{T_\infty} + \frac{n_\infty}{n_0} \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k^2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(0, -\xi_k) = \frac{n_\infty}{n_0} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k^2 e^{-(\xi_k-u)^2}. \quad (4.168)$$

A função  $\mathbf{G}$  é conhecida nos pontos de quadratura  $\xi_k$ , pois foi determinada pelo método ADO, e é dada pela Eq. (4.126)

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_k) = \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_k) e^{-\tau/\nu_j}. \quad (4.169)$$

Assim, aplicando  $\tau = 0$  na Eq. (4.169) e substituindo a equação resultante nas Eqs. (4.167) e (4.168) encontra-se

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_\infty}} - \frac{n_\infty}{n_0} \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \Phi(\nu_j, -\xi_k) = \frac{n_\infty}{n_0} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k e^{-(\xi_k-u)^2} \quad (4.170)$$

e

$$\frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{T_0}{T_\infty} + \frac{n_\infty}{n_0} \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k^2 \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \Phi(\nu_j, -\xi_k) = \frac{n_\infty}{n_0} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k^2 e^{-(\xi_k-u)^2}. \quad (4.171)$$

As Eqs. (4.170) e (4.171) podem ser escritas na forma do sistema não linear para  $n_\infty/n_0$  e  $T_\infty/T_0$

$$\frac{n_\infty}{n_0} \sqrt{\frac{T_\infty}{T_0}} (\mathcal{A} + \mathcal{B}) = \frac{1}{2} \quad (4.172)$$

$$\frac{n_\infty}{n_0} \frac{T_\infty}{T_0} (\mathcal{C} - \mathcal{D}) = \frac{\sqrt{\pi}}{4}, \quad (4.173)$$

onde

$$\mathcal{A} = \sum_{k=1}^N w_k \xi_k e^{-(\xi_k-u)^2}, \quad (4.174)$$

$$\mathcal{B} = \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \Phi(\nu_j, -\xi_k), \quad (4.175)$$

$$\mathcal{C} = \sum_{k=1}^N w_k \xi_k^2 e^{-(\xi_k-u)^2} \quad (4.176)$$

e

$$\mathcal{D} = \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N w_k \xi_k^2 \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \Phi(\nu_j, -\xi_k). \quad (4.177)$$

Resolvendo analiticamente este sistema não linear encontra-se as quantidades desejadas

$$\frac{n_\infty}{n_0} = \frac{\mathcal{C} - \mathcal{D}}{\sqrt{\pi}(\mathcal{A} + \mathcal{B})^2} \quad (4.178)$$

e

$$\frac{T_\infty}{T_0} = \frac{\pi(\mathcal{A} + \mathcal{B})^2}{4(\mathcal{C} - \mathcal{D})^2}. \quad (4.179)$$

Os resultados para os quocientes obtidos com as Eqs. (4.178) e (4.179) são mais próximos dos resultados encontrados por Ytrehus [Ytrehus, 1976] do que os resultados obtidos na solução do problema linearizado pelo método ADO. É importante salientar que Ytrehus [Ytrehus, 1976] encontrou resultados para os quocientes  $n_\infty/n_0$  e  $T_\infty/T_0$  através de um tratamento numérico de um sistema não linear obtido a partir de um conjunto de equações de momento. Nas referidas equações de momento a equação de Boltzmann é satisfeita em um sentido médio. Estes resultados independem do modelo de colisão e, segundo o próprio Ytrehus [Ytrehus, 1976], apresentam substancial concordância com trabalhos experimentais. Com o procedimento apresentado aqui foi possível construir uma solução analítica para determinar estes quocientes, o que acredita-se ser uma das importantes contribuições deste trabalho.

#### 4.6.2 Pós-processamento para recalculer os perfis

Nesta seção é feito um novo pós-processamento (chamado de Caso 2) a fim de encontrar uma expressão para a função de distribuição  $f$  na Eq. (4.1) e recalculer as quantidades de interesse dadas pelas Eqs. (4.5) a (4.8) sem escrever  $f$  em termos da perturbação  $h$ . Como as quantidades de interesse  $\Delta N(\tau)$ ,  $\Delta U(\tau)$  e  $\Delta T(\tau)$  foram determinadas pelo método ADO, as expressões encontradas para estas quantidades serão aplicadas na distribuição Maxwelliana dada pela Eq. (4.2). Assim, na Eq. (4.1) a função  $\phi$  será conhecida e poderá ser tratada como um termo de fonte. Dessa forma é possível determinar  $f$  e recalculer as quantidades de interesse dadas pelas Eqs. (4.5) a (4.8) sem linearizá-las. Como desta vez não é feita nenhuma linearização na equação cinética, parte da solução é numérica.

Assim, considerando que o problema é unidimensional e usando as adimensionalizações

dadas pelas Eqs. (4.12) a (4.14), as Eqs. (4.1) e (4.2) podem ser reescritas como

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} f(\tau, \mathbf{c}) + f(\tau, \mathbf{c}) = \phi(\tau, \mathbf{c}) \quad (4.180)$$

e

$$\phi(\tau, \mathbf{c}) = n_\infty [\Delta N(\tau) + 1] \left[ \frac{m}{2\pi k T_\infty [\Delta T(\tau) + 1]} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{[c_x - u(\Delta U(\tau) + 1)]^2 + c_y^2 + c_z^2}{\Delta T(\tau) + 1} \right\}, \quad (4.181)$$

onde  $\Delta N(\tau)$ ,  $\Delta U(\tau)$  e  $\Delta T(\tau)$  são as perturbações de densidade, velocidade e temperatura do gás. As condições de contorno adimensionalizadas são dadas, a partir das Eqs. (4.3) e (4.4), por

$$f_\infty(c_x, c_y, c_z) = n_\infty \left[ \frac{m}{2\pi k T_\infty} \right]^{3/2} \exp \left\{ -[(c_x - u)^2 + c_y^2 + c_z^2] \right\} \quad (4.182)$$

e, para  $c_x > 0$ ,

$$f_0(c_x, c_y, c_z) = n_0 \left[ \frac{m}{2\pi k T_0} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{T_\infty}{T_0} [(c_x - u_w)^2 + c_y^2 + c_z^2] \right\}. \quad (4.183)$$

Na Eq. (4.181) as perturbações de densidade, velocidade e temperatura foram determinadas pelo método ADO e são dadas pelas Eqs. (4.131) a (4.133). Dessa forma a Eq. (4.180) pode ser tratada como uma equação diferencial ordinária para a função  $f$  na qual  $\phi$  é um termo de fonte. Assim, fazendo  $c_x = -c_x$  na Eq. (4.180) encontra-se para  $c_x > 0$  o par de equações

$$\frac{\partial}{\partial \tau} f(\tau, c_x, c_y, c_z) + \frac{1}{c_x} f(\tau, c_x, c_y, c_z) = \frac{1}{c_x} \phi(\tau, c_x, c_y, c_z) \quad (4.184)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial \tau} f(\tau, -c_x, c_y, c_z) - \frac{1}{c_x} f(\tau, -c_x, c_y, c_z) = -\frac{1}{c_x} \phi(\tau, -c_x, c_y, c_z). \quad (4.185)$$

Multiplicando a Eq. (4.184) por  $e^{\tau/c_x}$  e a Eq. (4.185) por  $e^{-\tau/c_x}$  encontra-se

$$\frac{\partial}{\partial \tau} [e^{\tau/c_x} f(\tau, c_x, c_y, c_z)] = \frac{e^{\tau/c_x}}{c_x} \phi(\tau, c_x, c_y, c_z) \quad (4.186)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial \tau} [e^{-\tau/c_x} f(\tau, -c_x, c_y, c_z)] = \frac{-e^{-\tau/c_x}}{c_x} \phi(\tau, -c_x, c_y, c_z). \quad (4.187)$$

Integrando a Eq. (4.186) de 0 até  $\tau$  e a Eq. (4.187) de  $\tau$  até infinito encontra-se para  $c_x > 0$

$$f(\tau, c_x, c_y, c_z) = e^{-\tau/c_x} f_0(c_x, c_y, c_z) + \int_0^\tau \frac{1}{c_x} e^{-(\tau-z)/c_x} \phi(z, c_x, c_y, c_z) dz \quad (4.188)$$

e

$$f(\tau, -c_x, c_y, c_z) = \int_{\tau}^{\infty} \frac{1}{c_x} e^{-(z-\tau)/c_x} \phi(z, -c_x, c_y, c_z) dz. \quad (4.189)$$

Nota-se que quando  $c_x$  se aproxima de zero os termos dentro das integrais das Eqs. (4.188) e (4.189) tornam-se ilimitados. Para contornar este problema, que implica em falta de convergência nos resultados numéricos, faz-se uma integração por partes obtendo-se

$$f(\tau, c_x, c_y, c_z) = e^{-\tau/c_x} f_0(c_x, c_y, c_z) + \phi(\tau, c_x, c_y, c_z) - e^{-\tau/c_x} \phi(0, c_x, c_y, c_z) - \int_0^{\tau} e^{-(\tau-z)/c_x} \frac{\partial}{\partial z} \phi(z, c_x, c_y, c_z) dz \quad (4.190)$$

e

$$f(\tau, -c_x, c_y, c_z) = \phi(\tau, -c_x, c_y, c_z) + \int_{\tau}^{\infty} e^{-(z-\tau)/c_x} \frac{\partial}{\partial z} \phi(z, -c_x, c_y, c_z) dz, \quad (4.191)$$

onde  $\phi(\tau, c_x, c_y, c_z)$  é dada pela Eq. (4.181),  $f_0(c_x, c_y, c_z)$  é dada pela Eq. (4.183),

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \phi(z, c_x, c_y, c_z) = n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{\infty}} \right]^{3/2} & \left\{ \frac{\Delta N'(z)}{[\Delta T(z) + 1]^{3/2}} - \frac{3[\Delta N(z) + 1] \Delta T'(z)}{2[\Delta T(z) + 1]^{5/2}} + \right. \\ & \frac{2[c_x - u(\Delta U(z) + 1)] u \Delta U'(z) [\Delta N(z) + 1]}{[\Delta T(z) + 1]^{5/2}} + \\ & \left. \frac{\{[c_x - u(\Delta U(z) + 1)]^2 + c_y^2 + c_z^2\} \Delta T'(z) [\Delta N(z) + 1]}{[\Delta T(z) + 1]^{7/2}} \right\} \times \\ & \exp \left\{ -\frac{[c_x - u(\Delta U(z) + 1)]^2 + c_y^2 + c_z^2}{\Delta T(z) + 1} \right\} \quad (4.192) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \phi(z, -c_x, c_y, c_z) = n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{\infty}} \right]^{3/2} & \left\{ \frac{\Delta N'(z)}{[\Delta T(z) + 1]^{3/2}} - \frac{3[\Delta N(z) + 1] \Delta T'(z)}{2[\Delta T(z) + 1]^{5/2}} - \right. \\ & \frac{2[c_x + u(\Delta U(z) + 1)] u \Delta U'(z) [\Delta N(z) + 1]}{[\Delta T(z) + 1]^{5/2}} + \\ & \left. \frac{\{[c_x + u(\Delta U(z) + 1)]^2 + c_y^2 + c_z^2\} \Delta T'(z) [\Delta N(z) + 1]}{[\Delta T(z) + 1]^{7/2}} \right\} \times \\ & \exp \left\{ -\frac{[c_x + u(\Delta U(z) + 1)]^2 + c_y^2 + c_z^2}{\Delta T(z) + 1} \right\}. \quad (4.193) \end{aligned}$$

Como as integrais das Eqs. (4.190) e (4.191) não podem ser resolvidas analiticamente, reescreve-se estas equações usando quadraturas numéricas para os intervalos  $[0, \tau]$  e  $[\tau, \infty)$ , isto

é,

$$f(\tau, c_x, c_y, c_z) = e^{-\tau/c_x} f_0(c_x, c_y, c_z) + \phi(\tau, c_x, c_y, c_z) - e^{-\tau/c_x} \phi(0, c_x, c_y, c_z) - \sum_{j=1}^M v_j e^{-(\tau-x_j)/c_x} \frac{\partial}{\partial z} \phi(z, c_x, c_y, c_z) \Big]_{z=x_j} \quad (4.194)$$

e

$$f(\tau, -c_x, c_y, c_z) = \phi(\tau, -c_x, c_y, c_z) + \sum_{j=1}^M w_j e^{-(y_j-\tau)/c_x} \frac{\partial}{\partial z} \phi(z, -c_x, c_y, c_z) \Big]_{z=y_j}, \quad (4.195)$$

onde  $x_j$  e  $v_j$  são  $M$  pontos e pesos de uma quadratura para o intervalo  $[0, \tau]$  e  $y_j$  e  $w_j$  são  $M$  pontos e pesos de uma quadratura para o intervalo  $[\tau, \infty)$ . As quantidades de interesse a serem determinadas são dadas a partir das Eqs. (4.5) a (4.8) que adimensionalizadas são reescritas como

$$n(\tau) = \left[ \frac{2kT_\infty}{m} \right]^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z, \quad (4.196)$$

$$u_x(\tau) = \frac{1}{n(\tau)} \left[ \frac{2kT_\infty}{m} \right]^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z, \quad (4.197)$$

$$T(\tau) = \frac{m}{3kn(\tau)} \left[ \frac{2kT_\infty}{m} \right]^{5/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [(c_x - \hat{u}_x(\tau))^2 + c_y^2 + c_z^2] f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z \quad (4.198)$$

e

$$q_x(\tau) = \frac{m}{2} \left[ \frac{2kT_\infty}{m} \right]^3 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [(c_x - \hat{u}_x(\tau))^2 + c_y^2 + c_z^2] [c_x - \hat{u}_x(\tau)] f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z, \quad (4.199)$$

onde

$$\hat{u}_x(\tau) = [m/(2kT_\infty)]^{1/2} u_x(\tau). \quad (4.200)$$

Novamente usa-se algumas condições de normalização para a função  $f$ . Assim, integra-se a Eq. (4.180) para todo  $c_x$ ,  $c_y$  e  $c_z$  obtendo-se

$$\frac{d}{d\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z = 0. \quad (4.201)$$

A seguir multiplica-se a Eq. (4.180) por  $(c_x - \hat{u}_x(\tau))$  e integra-se a equação resultante para todo  $c_x$ ,  $c_y$  e  $c_z$  encontrando-se

$$\frac{d}{d\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x (c_x - \hat{u}_x(\tau)) f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z = 0. \quad (4.202)$$

Agora multiplica-se a Eq. (4.180) por  $[(c_x - \hat{u}_x(\tau))^2 + c_y^2 + c_z^2]$  e integra-se a equação resultante para todo  $c_x$ ,  $c_y$  e  $c_z$  obtendo-se

$$\frac{d}{d\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x [(c_x - \hat{u}_x(\tau))^2 + c_y^2 + c_z^2] f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z = 0, \quad (4.203)$$

o que implica que as expressões

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z, \quad (4.204)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x (c_x - \hat{u}_x(\tau)) f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z \quad (4.205)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x [(c_x - \hat{u}_x(\tau))^2 + c_y^2 + c_z^2] f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z \quad (4.206)$$

independem de  $\tau$ . Fazendo  $\tau \rightarrow \infty$  nas Eqs. (4.204) a (4.206) e usando a Eq. (4.182) encontra-se que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z = n_{\infty} \left[ \frac{m}{2kT_{\infty}} \right]^{3/2} u, \quad (4.207)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x^2 f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z = n_{\infty} \left[ \frac{m}{2kT_{\infty}} \right]^{3/2} \left[ u^2 + \frac{1}{2} \right] \quad (4.208)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c_x c^2 f(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z = n_{\infty} \left[ \frac{m}{2kT_{\infty}} \right]^{3/2} \left[ u^3 + \frac{5}{2} u \right]. \quad (4.209)$$

Como deseja-se determinar as perturbações de densidade, velocidade, temperatura e também o fluxo de calor, usando as Eqs. (4.196) a (4.199) e as condições de normalização dadas pelas Eqs. (4.207) a (4.209) encontra-se a perturbação não linear de densidade

$$\Delta \hat{N}(\tau) = \frac{1}{n_{\infty}} \left[ \frac{2kT_{\infty}}{m} \right]^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} [f(\tau, c_x, c_y, c_z) + f(\tau, -c_x, c_y, c_z)] dc_x dc_y dc_z - 1, \quad (4.210)$$

a perturbação não linear de velocidade

$$\Delta \hat{U}(\tau) = \frac{1}{\Delta \hat{N}(\tau) + 1} - 1, \quad (4.211)$$

a perturbação não linear de temperatura

$$\Delta\widehat{T}(\tau) = -1 + \frac{2}{3[\Delta\widehat{N}(\tau) + 1]} \left[ u^2 + \frac{1}{2} - \frac{u^2}{\Delta\widehat{N}(\tau) + 1} \right] + \frac{m}{3kT_\infty n_\infty [\Delta\widehat{N}(\tau) + 1]} \left[ \frac{2kT_\infty}{m} \right]^{5/2} \times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} (c_y^2 + c_z^2) [f(\tau, c_x, c_y, c_z) + f(\tau, -c_x, c_y, c_z)] dc_x dc_y dc_z \quad (4.212)$$

e o fluxo não linear de calor

$$\widehat{Q}_x(\tau) = u^3 + u - \frac{2u^3 + u}{\Delta\widehat{N}(\tau) + 1} + \frac{u^3}{[\Delta\widehat{N}(\tau) + 1]^2} - \frac{3u}{2} \Delta\widehat{T}(\tau). \quad (4.213)$$

Substituindo as Eqs. (4.194) e (4.195) na Eq. (4.210) encontra-se para a perturbação não linear de densidade

$$\begin{aligned} \Delta\widehat{N}(\tau) = & -1 + \pi^{-1/2} \sqrt{\frac{T_\infty}{T_0}} \frac{n_0}{n_\infty} \sum_{k=1}^M w_k e^{-\tau/\xi_k} e^{-\frac{T_\infty}{T_0} (\xi_k - u_w)^2} \\ & + \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^M w_k [\Phi(\tau, \xi_k) + \Phi(\tau, -\xi_k) - e^{-\tau/\xi_k} \Phi(0, \xi_k)] \\ & - \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^M w_k \sum_{j=1}^M v_j e^{-(\tau-x_j)/\xi_k} \left. \frac{\partial}{\partial z} \Phi(z, \xi_k) \right]_{z=x_j} \\ & + \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^M w_k \sum_{j=1}^M w_j e^{-(y_j-\tau)/\xi_k} \left. \frac{\partial}{\partial z} \Phi(z, -\xi_k) \right]_{z=y_j}, \quad (4.214) \end{aligned}$$

onde

$$\Phi(\tau, \xi_k) = \frac{\Delta N(\tau) + 1}{[\Delta T(\tau) + 1]^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{[\xi_k - u(\Delta U(\tau) + 1)]^2}{\Delta T(\tau) + 1} \right\}, \quad (4.215)$$

$$\Phi(\tau, -\xi_k) = \frac{\Delta N(\tau) + 1}{[\Delta T(\tau) + 1]^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{[\xi_k + u(\Delta U(\tau) + 1)]^2}{\Delta T(\tau) + 1} \right\}, \quad (4.216)$$

$$\Phi(0, \xi_k) = \frac{\Delta N(0) + 1}{[\Delta T(0) + 1]^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{[\xi_k - u(\Delta U(0) + 1)]^2}{\Delta T(0) + 1} \right\}, \quad (4.217)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial z} \Phi(z, \xi_k) \right]_{z=x_j} = & \left\{ \frac{\Delta N'(x_j)}{[\Delta T(x_j) + 1]^{1/2}} - \frac{3[\Delta N(x_j) + 1] \Delta T'(x_j)}{2[\Delta T(x_j) + 1]^{3/2}} \right. \\ & + \frac{2[\xi_k - u(\Delta U(x_j) + 1)] u \Delta U'(x_j) [\Delta N(x_j) + 1]}{[\Delta T(x_j) + 1]^{3/2}} \\ & + \left. \frac{\{[\xi_k - u(\Delta U(x_j) + 1)]^2 + \Delta T(x_j) + 1\} \Delta T'(x_j) [\Delta N(x_j) + 1]}{[\Delta T(x_j) + 1]^{5/2}} \right\} \\ & \times \exp \left\{ \frac{-[\xi_k - u(\Delta U(x_j) + 1)]^2}{\Delta T(x_j) + 1} \right\} \quad (4.218) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \Phi(z, -\xi_k) \Big|_{z=y_j} = & \left\{ \frac{\Delta N'(y_j)}{[\Delta T(y_j) + 1]^{1/2}} - \frac{3[\Delta N(y_j) + 1]\Delta T'(y_j)}{2[\Delta T(y_j) + 1]^{3/2}} \right. \\ & \left. - \frac{2[\xi_k + u(\Delta U(y_j) + 1)]u\Delta U'(y_j)[\Delta N(y_j) + 1]}{[\Delta T(y_j) + 1]^{3/2}} \right. \\ & \left. + \frac{\{[\xi_k + u(\Delta U(y_j) + 1)]^2 + \Delta T(y_j) + 1\}\Delta T'(y_j)[\Delta N(y_j) + 1]}{[\Delta T(y_j) + 1]^{5/2}} \right\} \\ & \times \exp \left\{ \frac{-[\xi_k + u(\Delta U(y_j) + 1)]^2}{\Delta T(y_j) + 1} \right\}, \quad (4.219) \end{aligned}$$

$\xi_k$  e  $w_k$  são pontos e pesos da quadratura para o intervalo  $[0, \infty)$ . Substituindo as Eqs. (4.194) e (4.195) na Eq. (4.212) encontra-se para a perturbação não linear de temperatura

$$\Delta \hat{T}(\tau) = \frac{2}{3[\Delta \hat{N}(\tau) + 1]} \left[ u^2 + \frac{1}{2} - \frac{u^2}{\Delta \hat{N}(\tau) + 1} + \Xi(\tau) \right] - 1, \quad (4.220)$$

onde

$$\begin{aligned} \Xi(\tau) = & \pi^{-1/2} \sqrt{\frac{T_0}{T_\infty}} \frac{n_0}{n_\infty} \sum_{k=1}^M w_k e^{-\tau/\xi_k} e^{-\frac{T_\infty}{T_0}(\xi_k - u)^2} + \\ & \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^M w_k [\hat{\Phi}(\tau, \xi_k) + \hat{\Phi}(\tau, -\xi_k) - e^{-\tau/\xi_k} \hat{\Phi}(0, \xi_k)] - \\ & \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^M w_k \sum_{j=1}^M v_j e^{-(\tau - x_j)/\xi_k} \frac{\partial}{\partial z} \hat{\Phi}(z, \xi_k) \Big|_{z=x_j} + \\ & \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^M w_k \sum_{j=1}^M w_j e^{-(y_j - \tau)/\xi_k} \frac{\partial}{\partial z} \hat{\Phi}(z, -\xi_k) \Big|_{z=y_j} \quad (4.221) \end{aligned}$$

com

$$\hat{\Phi}(\tau, \xi_k) = [\Delta N(\tau) + 1][\Delta T(\tau) + 1]^{1/2} \exp \left\{ -\frac{[\xi_k - u(\Delta U(\tau) + 1)]^2}{\Delta T(\tau) + 1} \right\}, \quad (4.222)$$

$$\hat{\Phi}(\tau, -\xi_k) = [\Delta N(\tau) + 1][\Delta T(\tau) + 1]^{1/2} \exp \left\{ -\frac{[\xi_k + u(\Delta U(\tau) + 1)]^2}{\Delta T(\tau) + 1} \right\}, \quad (4.223)$$

$$\hat{\Phi}(0, \xi_k) = [\Delta N(0) + 1][\Delta T(0) + 1]^{1/2} \exp \left\{ -\frac{[\xi_k - u(\Delta U(0) + 1)]^2}{\Delta T(0) + 1} \right\}, \quad (4.224)$$



$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial}{\partial z} \widehat{\Phi}(z, \xi_k) \right]_{z=x_j} &= \left\{ \Delta N'(x_j) [\Delta T(x_j) + 1]^{1/2} - \frac{3[\Delta N(x_j) + 1] \Delta T'(x_j)}{2[\Delta T(x_j) + 1]^{1/2}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{2[\xi_k - u(\Delta U(x_j) + 1)] u \Delta U'(x_j) [\Delta N(x_j) + 1]}{[\Delta T(x_j) + 1]^{1/2}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\{[\xi_k - u(\Delta U(x_j) + 1)]^2 + 2(\Delta T(x_j) + 1)\} \Delta T'(x_j) [\Delta N(x_j) + 1]}{[\Delta T(x_j) + 1]^{3/2}} \right\} \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{-[\xi_k - u(\Delta U(x_j) + 1)]^2}{\Delta T(x_j) + 1} \right\} \quad (4.225)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial}{\partial z} \widehat{\Phi}(z, -\xi_k) \right]_{z=y_j} &= \left\{ \Delta N'(y_j) [\Delta T(y_j) + 1]^{1/2} - \frac{3[\Delta N(y_j) + 1] \Delta T'(y_j)}{2[\Delta T(y_j) + 1]^{1/2}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2[\xi_k + u(\Delta U(y_j) + 1)] u \Delta U'(y_j) [\Delta N(y_j) + 1]}{[\Delta T(y_j) + 1]^{1/2}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\{[\xi_k + u(\Delta U(y_j) + 1)]^2 + 2(\Delta T(y_j) + 1)\} \Delta T'(y_j) [\Delta N(y_j) + 1]}{[\Delta T(y_j) + 1]^{3/2}} \right\} \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{-[\xi_k + u(\Delta U(y_j) + 1)]^2}{\Delta T(y_j) + 1} \right\}. \quad (4.226)
\end{aligned}$$

Nas Eqs. (4.214) e (4.221) usa-se para os quocientes  $n_\infty/n_0$  e  $T_\infty/T_0$  os resultados encontrados nas Eqs. (4.178) e (4.179). Poderiam ser usados os quocientes obtidos pelo método ADO na solução do problema linearizado. Neste sentido o pós-processamento “Caso 2” pode ser independente do “Caso 1”. A perturbação não linear de velocidade  $\Delta \widehat{U}(\tau)$  é dada pela Eq. (4.211) e o fluxo não linear de calor  $\widehat{Q}_x(\tau)$  é dado pela Eq. (4.213) e podem ser calculados a partir das perturbações não lineares de densidade e temperatura  $\Delta \widehat{N}(\tau)$  e  $\Delta \widehat{T}(\tau)$  dadas pelas Eqs. (4.214) e (4.220).

#### 4.7 Aspectos Computacionais e Resultados Numéricos

Para iniciar a implementação computacional da solução ADO o primeiro passo é definir o esquema de quadratura a ser utilizado na versão linearizada do problema. Dessa forma utiliza-se novamente a quadratura de Gauss-Legendre com os mapeamentos mencionados nos capítulos anteriores. Após ter os  $N$  pontos  $\xi_k$  e pesos  $w_k$  definidos, a solução é rápida e fácil de implementar. As etapas desta implementação são as seguintes:

- resolver o problema de autovalor dado pela Eq. (4.114) para obter as constantes de separação  $\nu_j$  e as soluções elementares  $\Phi_\pm(\nu_j)$ ;
- resolver o sistema linear dado pela Eq. (4.129) para obter os coeficientes  $A_j$  e as quantidades  $\Delta N_0$  e  $\Delta T_0$ ;

- calcular as perturbações de densidade, velocidade, temperatura e o fluxo de calor dados pelas Eqs. (4.131) a (4.133) e (4.135);
- calcular os quocientes  $n_\infty/n_0$  e  $T_\infty/T_0$  no pós-processamento “Caso 1” dados pelas Eqs. (4.178) e (4.179).

Para calcular as perturbações de densidade, velocidade, temperatura e o fluxo de calor no pós-processamento “Caso 2” é necessário definir os novos esquemas de quadratura para os intervalos  $[\tau, \infty)$  e  $[0, \tau]$ , para um  $\tau$  fixo. Assim, utiliza-se a transformação não linear

$$u(\xi) = e^{-(\xi-\tau)} \quad (4.227)$$

para mapear o intervalo  $[\tau, \infty)$  no intervalo  $[0, 1]$ , onde usa-se a quadratura de Gauss-Legendre com a mudança de variáveis dada pela Eq. (2.144). Continuando, utiliza-se novamente a quadratura de Gauss-Legendre agora com a transformação linear

$$u(\xi) = \frac{2\xi}{\tau} - 1 \quad (4.228)$$

para mapear o intervalo  $[0, \tau]$  no intervalo  $[-1, 1]$ . Nas Eqs. (4.227) e (4.228)  $\tau$  é a variável espacial adimensionalizada.

Definidos os pontos  $x_j, y_j$  e os pesos  $v_j, w_j$  dos novos esquemas de quadratura, a etapa seguinte é calcular, pelo método ADO, as perturbações de densidade, velocidade e temperatura, e também suas derivadas, em cada um dos pontos  $x_j$  e  $y_j$ . Dessa forma, para cada valor de  $\tau$  que se deseja aplicar nas quantidades de interesse do pós-processamento “Caso 2”, é necessário calcular a solução ADO em  $2M$  pontos dos novos esquemas de quadratura, sendo  $M$  pontos para o intervalo  $[\tau, \infty)$  e  $M$  pontos para  $[0, \tau]$ . Feito isso o passo seguinte é calcular as quantidades de interesse dadas pelas Eqs. (4.211), (4.213), (4.214) e (4.220).

Os resultados numéricos mostrados aqui foram obtidos em FORTRAN usando  $N = 80$  pontos de quadratura no método ADO (e também no pós-processamento “Caso 1”) e  $M = 200$  no pós-processamento “Caso 2”. Todos os dígitos mostrados aqui são preservados (com a tolerância de mais ou menos 1 no último dígito) variando-se  $N$  até 200 e  $M$  até 400. Os tempos computacionais para resolver o problema linearizado, fazer os pós-processamentos e obter os resultados das quantidades de interesse (para um único valor de  $u$ ) usando diferentes quantidades de pontos de quadratura são mostrados na Tabela 4.1. Esta tabela também mostra a quantidade de dígitos significativos encontrada nos resultados. Foi usado um PC com processador Pentium IV de 2.66 GHz, memória RAM de 1.5 Gbytes e não se fez nenhuma otimização no programa.

Tabela 4.1 – Tempo Computacional

$N$	$M$	Tempo de Execução	Dígitos (ADO)	Dígitos (PP)
40	50	1 segundo	5 <sup>†</sup>	4 <sup>†</sup>
60	100	6 segundos	6 <sup>†</sup>	4 <sup>†</sup>
80	200	25 segundos	7	5
100	300	1.5 minutos	7 ou mais	5 ou mais

<sup>†</sup>Quantidade aproximada

Para ter confiabilidade no programa elaborado e comparar resultados numéricos, inicialmente foram determinados os quocientes  $n_\infty/n_0$  e  $T_\infty/T_0$  apresentados nas Tabelas 4.2 e 4.3. Nas colunas “Linear” estão os resultados para o problema linearizado obtidos com o método ADO e nas colunas “PP” estão os resultados do pós-processamento “Caso 1”. De fato, os resultados previamente conhecidos na Ref. [Siewert e Thomas, 1982], onde foi usado o método das soluções elementares, foram encontrados (com concordância em todos os dígitos listados naquela referência) na formulação apresentada neste capítulo. Analisando as Tabelas 4.2 e 4.3 observa-se que para  $u \leq 0.3$  (para  $n_\infty/n_0$ ) ou  $u \leq 0.4$  (para  $T_\infty/T_0$ ) há pelo menos um dígito significativo de concordância entre os resultados do problema linearizado e os do pós-processamento “Caso 1”. Isso mostra que a linearização proposta para o problema é adequada apenas quando  $u$  é pequeno, ou seja, quando a velocidade de escoamento do gás é baixa. Para altas velocidades de escoamento, ou seja, quando a evaporação é realmente forte, os efeitos não lineares tornam-se significativos e a abordagem linear deixa de ser apropriada. Além disso, observa-se maior diferença quando se compara os resultados do modelo linear com os do pós-processamento “Caso 1” para o quociente  $n_\infty/n_0$  do que para  $T_\infty/T_0$ , conforme é mostrado nas Figuras 4.3 e 4.4. Continuando, em geral encontram-se dois dígitos significativos de concordância entre os resultados do pós-processamento “Caso 1” e os encontrados por Ytrehus [Ytrehus, 1976], o que mostra que o “PP” desenvolvido foi eficiente para consideração dos efeitos de não linearidade, pois, segundo o próprio Ytrehus, os resultados da Ref. [Ytrehus, 1976] apresentam substancial concordância com trabalhos experimentais.

Para as perturbações de densidade, velocidade, temperatura e para o fluxo de calor não há resultados na literatura e por isso não foi possível checar os resultados encontrados. Assim, as Tabelas 4.4 a 4.12 mostram os resultados encontrados com o método ADO e com o pós-processamento “Caso 2”. Analisando estas tabelas observa-se que até  $u = 0.4$  os resultados de todas as quantidades de interesse apresentam, em geral, concordância de um dígito significativo entre os resultados do método ADO e os do pós-processamento. Isso confirma que a abordagem

linear é eficiente para fenômenos de evaporação com baixas velocidades de escoamento, ou seja, para evaporações fracas. À medida que  $u$  aumenta, ou seja para  $u \geq 0.5$ , essa concordância de um dígito deixa de ocorrer principalmente para as perturbações de velocidade, temperatura e para o fluxo de calor, o que mostra que os efeitos não lineares passam a ser significativos. Isto pode ser observado nas Figuras 4.5 a 4.8, onde foi utilizado  $u = 0.8$ , e pode-se notar pelo afastamento entre os gráficos do caso “Linear” e do “PP” que existe diferença entre as abordagens principalmente próximo à fase condensada. Para  $u = 0.9$  os resultados das quantidades de interesse já não apresentam nenhum dígito significativo de concordância entre o caso linearizado e o “PP”. Isso mostra que próximo ao valor crítico de  $u = \sqrt{5/6}$ , para o qual o problema possui solução, os efeitos não lineares são muito significativos em todas as quantidades de interesse e a abordagem linear não é adequada.

Concluindo, a linearização feita neste problema é adequada apenas para baixas velocidades de escoamento, ou seja, quando a evaporação é fraca. Ainda, ela é mais eficiente para avaliar a perturbação de densidade do que as demais quantidades de interesse.

No próximo capítulo é construída uma solução unificada para o problema linearizado de evaporação forte com os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS.

Tabela 4.2 – Evaporação Forte:  $n_\infty/n_0$  com  $u_w = 0.0$

$u$	Linear	PP (Caso 1)	[Ytrehus, 1976]
0.0	1.000000	1.000000	1.000
0.1	8.614158(-1)	8.489481(-1)	8.494(-1)
0.2	7.651737(-1)	7.276018(-1)	7.283(-1)
0.3	6.949421(-1)	6.293869(-1)	6.303(-1)
0.4	6.417889(-1)	5.492782(-1)	5.501(-1)
0.5	6.004481(-1)	4.834686(-1)	4.841(-1)
0.6	5.676282(-1)	4.290680(-1)	4.292(-1)
0.7	5.411764(-1)	3.838703(-1)	3.834(-1)
0.8	5.196389(-1)	3.461836(-1)	3.447(-1)
0.9	5.020202(-1)	3.147130(-1)	3.120(-1)

Tabela 4.3 – Evaporação Forte:  $T_\infty/T_0$  com  $u_w = 0.0$ 

$u$	Linear	PP (Caso 1)	[Ytrehus, 1976]
0.0	1.000000	1.000000	1.000
0.1	9.552223(-1)	9.567538(-1)	9.567(-1)
0.2	9.101039(-1)	9.158655(-1)	9.152(-1)
0.3	8.647773(-1)	8.769138(-1)	8.756(-1)
0.4	8.195562(-1)	8.396598(-1)	8.378(-1)
0.5	7.747813(-1)	8.039152(-1)	8.016(-1)
0.6	7.307567(-1)	7.695019(-1)	7.671(-1)
0.7	6.877220(-1)	7.362450(-1)	7.342(-1)
0.8	6.458357(-1)	7.039749(-1)	7.028(-1)
0.9	6.051521(-1)	6.725247(-1)	6.729(-1)

Tabela 4.4 – Evaporação Forte com  $u = 0.1$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	$\Delta N(\tau)$	$\Delta \hat{N}(\tau)$	$\Delta U(\tau)$	$\Delta \hat{U}(\tau)$	$\Delta T(\tau)$	$\Delta \hat{T}(\tau)$	$Q_x(\tau)$	$\hat{Q}_x(\tau)$
0.0	4.294820(-2)	4.3376(-2)	-4.294820(-2)	-4.1572(-2)	4.297315(-3)	4.3483(-3)	3.650223(-3)	3.5067(-3)
0.1	3.025413(-2)	3.0330(-2)	-3.025413(-2)	-2.9437(-2)	4.116695(-3)	4.0573(-3)	2.407909(-3)	2.3360(-3)
0.2	2.424368(-2)	2.4239(-2)	-2.424368(-2)	-2.3665(-2)	3.741951(-3)	3.6487(-3)	1.863075(-3)	1.8198(-3)
0.3	2.013347(-2)	2.0099(-2)	-2.013347(-2)	-1.9703(-2)	3.393686(-3)	3.2848(-3)	1.504294(-3)	1.4779(-3)
0.4	1.706040(-2)	1.7015(-2)	-1.706040(-2)	-1.6730(-2)	3.082239(-3)	2.9665(-3)	1.243705(-3)	1.2283(-3)
0.5	1.465332(-2)	1.4606(-2)	-1.465332(-2)	-1.4396(-2)	2.805377(-3)	2.6877(-3)	1.044525(-3)	1.0366(-3)
0.6	1.271159(-2)	1.2666(-2)	-1.271159(-2)	-1.2508(-2)	2.559033(-3)	2.4423(-3)	8.873045(-4)	8.8462(-4)
0.7	1.111266(-2)	1.1071(-2)	-1.111266(-2)	-1.0950(-2)	2.339229(-3)	2.2254(-3)	7.603824(-4)	7.6134(-4)
0.8	9.775638(-3)	9.7390(-3)	-9.775638(-3)	-9.6451(-3)	2.142472(-3)	2.0326(-3)	6.561930(-4)	6.5971(-4)
0.9	8.644130(-3)	8.6120(-3)	-8.644130(-3)	-8.5385(-3)	1.965779(-3)	1.8605(-3)	5.695460(-4)	5.7484(-4)
1.0	7.677260(-3)	7.6495(-3)	-7.677260(-3)	-7.5915(-3)	1.806626(-3)	1.7063(-3)	4.967320(-4)	5.0325(-4)
2.0	2.731567(-3)	2.7278(-3)	-2.731567(-3)	-2.7204(-3)	8.308094(-4)	7.7658(-4)	1.485352(-4)	1.5556(-4)
5.0	2.448325(-4)	2.4571(-4)	-2.448325(-4)	-2.4565(-4)	1.177530(-4)	1.1033(-4)	6.820289(-6)	8.0154(-6)
7.0	6.256705(-5)	6.2825(-5)	-6.256705(-5)	-6.2821(-5)	3.731966(-5)	3.5182(-5)	6.587556(-7)	1.0047(-6)

Tabela 4.5 – Evaporação Forte com  $u = 0.2$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	$\Delta N(\tau)$	$\Delta \hat{N}(\tau)$	$\Delta U(\tau)$	$\Delta \hat{U}(\tau)$	$\Delta T(\tau)$	$\Delta \hat{T}(\tau)$	$Q_x(\tau)$	$\hat{Q}_x(\tau)$
0.0	1.002768(-1)	1.0250(-1)	-1.002768(-1)	-9.2971(-2)	1.168744(-2)	1.1565(-2)	1.654913(-2)	1.5193(-2)
0.1	7.329741(-2)	7.3744(-2)	-7.329741(-2)	-6.8679(-2)	1.071386(-2)	1.0281(-2)	1.144532(-2)	1.0689(-2)
0.2	5.994683(-2)	5.9938(-2)	-5.994683(-2)	-5.6548(-2)	9.622358(-3)	9.1052(-3)	9.102660(-3)	8.6037(-3)
0.3	5.059088(-2)	5.0396(-2)	-5.059088(-2)	-4.7978(-2)	8.668595(-3)	8.1165(-3)	7.517598(-3)	7.1792(-3)
0.4	4.345986(-2)	4.3190(-2)	-4.345986(-2)	-4.1402(-2)	7.838417(-3)	7.2755(-3)	6.340447(-3)	6.1115(-3)
0.5	3.778248(-2)	3.7490(-2)	-3.778248(-2)	-3.6136(-2)	7.111734(-3)	6.5518(-3)	5.422976(-3)	5.2720(-3)
0.6	3.313661(-2)	3.2848(-2)	-3.313661(-2)	-3.1803(-2)	6.471585(-3)	5.9231(-3)	4.685846(-3)	4.5918(-3)
0.7	2.926131(-2)	2.8989(-2)	-2.926131(-2)	-2.8172(-2)	5.904387(-3)	5.3727(-3)	4.080946(-3)	4.0289(-3)
0.8	2.598236(-2)	2.5732(-2)	-2.598236(-2)	-2.5086(-2)	5.399269(-3)	4.8876(-3)	3.576692(-3)	3.5560(-3)
0.9	2.317705(-2)	2.2951(-2)	-2.317705(-2)	-2.2436(-2)	4.947447(-3)	4.4578(-3)	3.151177(-3)	3.1539(-3)
1.0	2.075545(-2)	2.0553(-2)	-2.075545(-2)	-2.0139(-2)	4.541737(-3)	4.0750(-3)	2.788569(-3)	2.8086(-3)
2.0	7.888161(-3)	7.8398(-3)	-7.888161(-3)	-7.7788(-3)	2.074144(-3)	1.8146(-3)	9.553889(-4)	1.0118(-3)
5.0	8.047394(-4)	8.0719(-4)	-8.047394(-4)	-8.0654(-4)	2.898265(-4)	2.5149(-4)	7.399992(-5)	8.5866(-5)
7.0	2.198659(-4)	2.2080(-4)	-2.198659(-4)	-2.2075(-4)	9.086833(-5)	7.9434(-5)	1.671269(-5)	2.0321(-5)

Tabela 4.6 – Evaporação Forte com  $u = 0.3$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	$\Delta N(\tau)$	$\Delta \hat{N}(\tau)$	$\Delta U(\tau)$	$\Delta \hat{U}(\tau)$	$\Delta T(\tau)$	$\Delta \hat{T}(\tau)$	$Q_x(\tau)$	$\hat{Q}_x(\tau)$
0.0	1.736772(-1)	1.8026(-1)	-1.736772(-1)	-1.5272(-1)	2.588067(-2)	2.3901(-2)	4.045688(-2)	3.5692(-2)
0.1	1.320405(-1)	1.3358(-1)	-1.320405(-1)	-1.1784(-1)	2.291713(-2)	2.0881(-2)	2.929945(-2)	2.6331(-2)
0.2	1.104216(-1)	1.1051(-1)	-1.104216(-1)	-9.9513(-2)	2.042533(-2)	1.8486(-2)	2.393509(-2)	2.1802(-2)
0.3	9.485141(-2)	9.4288(-2)	-9.485141(-2)	-8.6164(-2)	1.834038(-2)	1.6500(-2)	2.020224(-2)	1.8624(-2)
0.4	8.272371(-2)	8.1860(-2)	-8.272371(-2)	-7.5666(-2)	1.655935(-2)	1.4814(-2)	1.736540(-2)	1.6188(-2)
0.5	7.288809(-2)	7.1901(-2)	-7.288809(-2)	-6.7078(-2)	1.501575(-2)	1.3361(-2)	1.510933(-2)	1.4232(-2)
0.6	6.470701(-2)	6.3692(-2)	-6.470701(-2)	-5.9878(-2)	1.366370(-2)	1.2096(-2)	1.326343(-2)	1.2617(-2)
0.7	5.778156(-2)	5.6791(-2)	-5.778156(-2)	-5.3739(-2)	1.246975(-2)	1.0986(-2)	1.172307(-2)	1.1256(-2)
0.8	5.184221(-2)	5.0904(-2)	-5.184221(-2)	-4.8438(-2)	1.140854(-2)	1.0005(-2)	1.041881(-2)	1.0092(-2)
0.9	4.669686(-2)	4.5824(-2)	-4.669686(-2)	-4.3817(-2)	1.046028(-2)	9.1338(-3)	9.301932(-3)	9.0867(-3)
1.0	4.220314(-2)	4.1402(-2)	-4.220314(-2)	-3.9756(-2)	9.609164(-3)	8.3562(-3)	8.336820(-3)	8.2093(-3)
2.0	1.724428(-2)	1.6981(-2)	-1.724428(-2)	-1.6698(-2)	4.420908(-3)	3.7328(-3)	3.183875(-3)	3.3371(-3)
5.0	2.007422(-3)	2.0038(-3)	-2.007422(-3)	-1.9998(-3)	6.233324(-4)	5.1460(-4)	3.217272(-4)	3.6849(-4)
7.0	5.819798(-4)	5.8239(-4)	-5.819798(-4)	-5.8205(-4)	1.949385(-4)	1.6129(-4)	8.687158(-5)	1.0204(-4)

Tabela 4.7 – Evaporação Forte com  $u = 0.4$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	$\Delta N(\tau)$	$\Delta \hat{N}(\tau)$	$\Delta U(\tau)$	$\Delta \hat{U}(\tau)$	$\Delta T(\tau)$	$\Delta \hat{T}(\tau)$	$Q_x(\tau)$	$\hat{Q}_x(\tau)$
0.0	2.646477(-1)	2.8035(-1)	-2.646477(-1)	-2.1896(-1)	5.192263(-2)	4.3089(-2)	7.470552(-2)	6.4801(-2)
0.1	2.098088(-1)	2.1424(-1)	-2.098088(-1)	-1.7644(-1)	4.539144(-2)	3.8151(-2)	5.668866(-2)	4.9677(-2)
0.2	1.798141(-1)	1.8054(-1)	-1.798141(-1)	-1.5293(-1)	4.052959(-2)	3.4313(-2)	4.760790(-2)	4.2083(-2)
0.3	1.575439(-1)	1.5645(-1)	-1.575439(-1)	-1.3528(-1)	3.653000(-2)	3.1063(-2)	4.109959(-2)	3.6648(-2)
0.4	1.397678(-1)	1.3773(-1)	-1.397678(-1)	-1.2105(-1)	3.312779(-2)	2.8245(-2)	3.603047(-2)	3.2413(-2)
0.5	1.250444(-1)	1.2253(-1)	-1.250444(-1)	-1.0915(-1)	3.017808(-2)	2.5769(-2)	3.191090(-2)	2.8964(-2)
0.6	1.125657(-1)	1.0985(-1)	-1.125657(-1)	-9.8981(-2)	2.758804(-2)	2.3575(-2)	2.847349(-2)	2.6074(-2)
0.7	1.018207(-1)	9.9069(-2)	-1.018207(-1)	-9.0139(-2)	2.529275(-2)	2.1617(-2)	2.555265(-2)	2.3605(-2)
0.8	9.245976(-2)	8.9765(-2)	-9.245976(-2)	-8.2371(-2)	2.324425(-2)	1.9861(-2)	2.303735(-2)	2.1465(-2)
0.9	8.423068(-2)	8.1650(-2)	-8.423068(-2)	-7.5487(-2)	2.140569(-2)	1.8281(-2)	2.084885(-2)	1.9590(-2)
1.0	7.694444(-2)	7.4510(-2)	-7.694444(-2)	-6.9343(-2)	1.974791(-2)	1.6852(-2)	1.892902(-2)	1.7933(-2)
2.0	3.425086(-2)	3.3239(-2)	-3.425086(-2)	-3.2169(-2)	9.422742(-3)	7.9549(-3)	8.046698(-3)	8.1612(-3)
5.0	4.665052(-3)	4.6140(-3)	-4.665052(-3)	-4.5928(-3)	1.419800(-3)	1.1805(-3)	1.014140(-3)	1.1301(-3)
7.0	1.447617(-3)	1.4387(-3)	-1.447617(-3)	-1.4366(-3)	4.553391(-4)	3.7852(-4)	3.058434(-4)	3.4768(-4)

Tabela 4.8 – Evaporação Forte com  $u = 0.5$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	$\Delta N(\tau)$	$\Delta \hat{N}(\tau)$	$\Delta U(\tau)$	$\Delta \hat{U}(\tau)$	$\Delta T(\tau)$	$\Delta \hat{T}(\tau)$	$Q_x(\tau)$	$\hat{Q}_x(\tau)$
0.0	3.741703(-1)	4.0789(-1)	-3.741703(-1)	-2.8971(-1)	9.638849(-2)	7.0138(-2)	1.147937(-1)	1.0274(-1)
0.1	3.100465(-1)	3.2162(-1)	-3.100465(-1)	-2.4335(-1)	8.485787(-2)	6.4183(-2)	9.137984(-2)	8.0942(-2)
0.2	2.729709(-1)	2.7631(-1)	-2.729709(-1)	-2.1649(-1)	7.662609(-2)	5.9278(-2)	7.901590(-2)	6.9645(-2)
0.3	2.445058(-1)	2.4339(-1)	-2.445058(-1)	-1.9575(-1)	6.983303(-2)	5.4918(-2)	6.987814(-2)	6.1475(-2)
0.4	2.211547(-1)	2.1747(-1)	-2.211547(-1)	-1.7862(-1)	6.400618(-2)	5.0983(-2)	6.257274(-2)	5.5065(-2)
0.5	2.013471(-1)	1.9618(-1)	-2.013471(-1)	-1.6400(-1)	5.890409(-2)	4.7403(-2)	5.649550(-2)	4.9812(-2)
0.6	1.841957(-1)	1.7820(-1)	-1.841957(-1)	-1.5125(-1)	5.437739(-2)	4.4133(-2)	5.131485(-2)	4.5386(-2)
0.7	1.691339(-1)	1.6275(-1)	-1.691339(-1)	-1.3997(-1)	5.032373(-2)	4.1135(-2)	4.682416(-2)	4.1582(-2)
0.8	1.557702(-1)	1.4926(-1)	-1.557702(-1)	-1.2988(-1)	4.666833(-2)	3.8379(-2)	4.288387(-2)	3.8264(-2)
0.9	1.438195(-1)	1.3737(-1)	-1.438195(-1)	-1.2078(-1)	4.335408(-2)	3.5840(-2)	3.939419(-2)	3.5336(-2)
1.0	1.330654(-1)	1.2680(-1)	-1.330654(-1)	-1.1253(-1)	4.033591(-2)	3.3496(-2)	3.628077(-2)	3.2727(-2)
2.0	6.578473(-2)	6.2540(-2)	-6.578473(-2)	-5.8859(-2)	2.069820(-2)	1.7630(-2)	1.736871(-2)	1.6639(-2)
5.0	1.100036(-2)	1.0735(-2)	-1.100036(-2)	-1.0621(-2)	3.623618(-3)	3.1545(-3)	2.782468(-3)	2.9588(-3)
7.0	3.748917(-3)	3.6916(-3)	-3.748917(-3)	-3.6780(-3)	1.247778(-3)	1.0935(-3)	9.386250(-4)	1.0205(-3)

Tabela 4.9 – Evaporação Forte com  $u = 0.6$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	$\Delta N(\tau)$	$\Delta \hat{N}(\tau)$	$\Delta U(\tau)$	$\Delta \hat{U}(\tau)$	$\Delta T(\tau)$	$\Delta \hat{T}(\tau)$	$Q_x(\tau)$	$\hat{Q}_x(\tau)$
0.0	5.023561(-1)	5.7071(-1)	-5.023561(-1)	-3.6334(-1)	1.673916(-1)	1.0553(-1)	1.507611(-1)	1.5153(-1)
0.1	4.358283(-1)	4.6429(-1)	-4.358283(-1)	-3.1707(-1)	1.505246(-1)	1.0079(-1)	1.260248(-1)	1.2124(-1)
0.2	3.950578(-1)	4.0685(-1)	-3.950578(-1)	-2.8919(-1)	1.384898(-1)	9.6080(-2)	1.123938(-1)	1.0510(-1)
0.3	3.626019(-1)	3.6457(-1)	-3.626019(-1)	-2.6717(-1)	1.283927(-1)	9.1481(-2)	1.020077(-1)	9.3388(-2)
0.4	3.351646(-1)	3.3093(-1)	-3.351646(-1)	-2.4864(-1)	1.195785(-1)	8.7048(-2)	9.347811(-2)	8.4200(-2)
0.5	3.112651(-1)	3.0302(-1)	-3.112651(-1)	-2.3255(-1)	1.117259(-1)	8.2800(-2)	8.620574(-2)	7.6695(-2)
0.6	2.900651(-1)	2.7924(-1)	-2.900651(-1)	-2.1829(-1)	1.046408(-1)	7.8747(-2)	7.986230(-2)	7.0394(-2)
0.7	2.710270(-1)	2.5860(-1)	-2.710270(-1)	-2.0546(-1)	9.819218(-2)	7.4887(-2)	7.424328(-2)	6.5000(-2)
0.8	2.537779(-1)	2.4041(-1)	-2.537779(-1)	-1.9382(-1)	9.228491(-2)	7.1218(-2)	6.921032(-2)	6.0310(-2)
0.9	2.380438(-1)	2.2422(-1)	-2.380438(-1)	-1.8315(-1)	8.684675(-2)	6.7733(-2)	6.466424(-2)	5.6181(-2)
1.0	2.236157(-1)	2.0967(-1)	-2.236157(-1)	-1.7333(-1)	8.182070(-2)	6.4424(-2)	6.053083(-2)	5.2508(-2)
2.0	1.258370(-1)	1.1661(-1)	-1.258370(-1)	-1.0443(-1)	4.689380(-2)	3.9339(-2)	3.329780(-2)	2.9612(-2)
5.0	2.781334(-2)	2.6666(-2)	-2.781334(-2)	-2.5973(-2)	1.055221(-2)	9.5493(-3)	7.191017(-3)	7.1353(-3)
7.0	1.092196(-2)	1.0637(-2)	-1.092196(-2)	-1.0525(-2)	4.151793(-3)	3.8355(-3)	2.816567(-3)	2.8870(-3)

Tabela 4.10 – Evaporação Forte com  $u = 0.7$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	$\Delta N(\tau)$	$\Delta \hat{N}(\tau)$	$\Delta U(\tau)$	$\Delta \hat{U}(\tau)$	$\Delta T(\tau)$	$\Delta \hat{T}(\tau)$	$Q_x(\tau)$	$\hat{Q}_x(\tau)$
0.0	6.480378(-1)	7.8239(-1)	-6.480378(-1)	-4.3895(-1)	2.743201(-1)	1.5008(-1)	1.655903(-1)	2.1577(-1)
0.1	5.890796(-1)	6.5627(-1)	-5.890796(-1)	-3.9623(-1)	2.542379(-1)	1.5002(-1)	1.454059(-1)	1.7369(-1)
0.2	5.507261(-1)	5.8687(-1)	-5.507261(-1)	-3.6982(-1)	2.395896(-1)	1.4771(-1)	1.339392(-1)	1.5069(-1)
0.3	5.190047(-1)	5.3541(-1)	-5.190047(-1)	-3.4871(-1)	2.269865(-1)	1.4464(-1)	1.249674(-1)	1.3393(-1)
0.4	4.913093(-1)	4.9424(-1)	-4.913093(-1)	-3.3076(-1)	2.157186(-1)	1.4117(-1)	1.174119(-1)	1.2082(-1)
0.5	4.664791(-1)	4.5990(-1)	-4.664791(-1)	-3.1502(-1)	2.054496(-1)	1.3749(-1)	1.108133(-1)	1.1019(-1)
0.6	4.438615(-1)	4.3049(-1)	-4.438615(-1)	-3.0094(-1)	1.959814(-1)	1.3370(-1)	1.049226(-1)	1.0133(-1)
0.7	4.230402(-1)	4.0481(-1)	-4.230402(-1)	-2.8816(-1)	1.871825(-1)	1.2987(-1)	9.958648(-2)	9.3829(-2)
0.8	4.037272(-1)	3.8205(-1)	-4.037272(-1)	-2.7644(-1)	1.789591(-1)	1.2604(-1)	9.470202(-2)	8.7372(-2)
0.9	3.857119(-1)	3.6165(-1)	-3.857119(-1)	-2.6559(-1)	1.712403(-1)	1.2225(-1)	9.019601(-2)	8.1749(-2)
1.0	3.688332(-1)	3.4318(-1)	-3.688332(-1)	-2.5550(-1)	1.639707(-1)	1.1851(-1)	8.601401(-2)	7.6802(-2)
2.0	2.429475(-1)	2.1968(-1)	-2.429475(-1)	-1.8011(-1)	1.088688(-1)	8.5770(-2)	5.575097(-2)	4.7151(-2)
5.0	7.822184(-2)	7.3251(-2)	-7.822184(-2)	-6.8252(-2)	3.525918(-2)	3.1536(-2)	1.773314(-2)	1.6260(-2)
7.0	3.803647(-2)	3.6472(-2)	-3.803647(-2)	-3.5188(-2)	1.714595(-2)	1.5997(-2)	8.622280(-3)	8.2593(-3)



Tabela 4.11 – Evaporação Forte com  $u = 0.8$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	$\Delta N(\tau)$	$\Delta \hat{N}(\tau)$	$\Delta U(\tau)$	$\Delta \hat{U}(\tau)$	$\Delta T(\tau)$	$\Delta \hat{T}(\tau)$	$Q_x(\tau)$	$\hat{Q}_x(\tau)$
0.0	8.082981(-1)	1.0707	-8.082981(-1)	-5.1708(-1)	4.271842(-1)	2.0667(-1)	1.340173(-1)	3.0255(-1)
0.1	7.694290(-1)	9.2585(-1)	-7.694290(-1)	-4.8075(-1)	4.100187(-1)	2.1568(-1)	1.235206(-1)	2.4411(-1)
0.2	7.425914(-1)	8.4595(-1)	-7.425914(-1)	-4.5827(-1)	3.970596(-1)	2.1889(-1)	1.176015(-1)	2.1147(-1)
0.3	7.195077(-1)	7.8694(-1)	-7.195077(-1)	-4.4038(-1)	3.855669(-1)	2.2007(-1)	1.129258(-1)	1.8751(-1)
0.4	6.986660(-1)	7.3991(-1)	-6.986660(-1)	-4.2526(-1)	3.750011(-1)	2.2003(-1)	1.089315(-1)	1.6875(-1)
0.5	6.794042(-1)	7.0086(-1)	-6.794042(-1)	-4.1206(-1)	3.651160(-1)	2.1918(-1)	1.053841(-1)	1.5356(-1)
0.6	6.613564(-1)	6.6752(-1)	-6.613564(-1)	-4.0030(-1)	3.557712(-1)	2.1776(-1)	1.021596(-1)	1.4097(-1)
0.7	6.442929(-1)	6.3849(-1)	-6.442929(-1)	-3.8968(-1)	3.468760(-1)	2.1592(-1)	9.918306(-2)	1.3038(-1)
0.8	6.280577(-1)	6.1281(-1)	-6.280577(-1)	-3.7996(-1)	3.383674(-1)	2.1376(-1)	9.640523(-2)	1.2137(-1)
0.9	6.125385(-1)	5.8981(-1)	-6.125385(-1)	-3.7099(-1)	3.301990(-1)	2.1137(-1)	9.379192(-2)	1.1361(-1)
1.0	5.976507(-1)	5.6900(-1)	-5.976507(-1)	-3.6265(-1)	3.223353(-1)	2.0880(-1)	9.131819(-2)	1.0689(-1)
2.0	4.735505(-1)	4.2743(-1)	-4.735505(-1)	-2.9944(-1)	2.560898(-1)	1.7976(-1)	7.153265(-2)	6.9747(-2)
5.0	2.470787(-1)	2.2560(-1)	-2.470787(-1)	-1.8407(-1)	1.338104(-1)	1.0690(-1)	3.709043(-2)	3.6322(-2)
7.0	1.619279(-1)	1.5133(-1)	-1.619279(-1)	-1.3144(-1)	8.768902(-2)	7.4447(-2)	2.431555(-2)	2.4666(-2)

Tabela 4.12 – Evaporação Forte com  $u = 0.9$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	$\Delta N(\tau)$	$\Delta \hat{N}(\tau)$	$\Delta U(\tau)$	$\Delta \hat{U}(\tau)$	$\Delta T(\tau)$	$\Delta \hat{T}(\tau)$	$Q_x(\tau)$	$\hat{Q}_x(\tau)$
0.0	9.778867(-1)	1.5214	-9.778867(-1)	-6.0340(-1)	6.354345(-1)	2.8616(-1)	2.226139(-2)	4.2217(-1)
0.1	9.726300(-1)	1.3619	-9.726300(-1)	-5.7662(-1)	6.325047(-1)	3.0928(-1)	2.148563(-2)	3.4382(-1)
0.2	9.687854(-1)	1.2773	-9.687854(-1)	-5.6089(-1)	6.302020(-1)	3.2216(-1)	2.113416(-2)	2.9923(-1)
0.3	9.653484(-1)	1.2169	-9.653484(-1)	-5.4892(-1)	6.280924(-1)	3.3153(-1)	2.088877(-2)	2.6613(-1)
0.4	9.621393(-1)	1.1704	-9.621393(-1)	-5.3925(-1)	6.260946(-1)	3.3877(-1)	2.069768(-2)	2.3997(-1)
0.5	9.590810(-1)	1.1330	-9.590810(-1)	-5.3118(-1)	6.241725(-1)	3.4454(-1)	2.053990(-2)	2.1863(-1)
0.6	9.561316(-1)	1.1022	-9.561316(-1)	-5.2432(-1)	6.223065(-1)	3.4921(-1)	2.040460(-2)	2.0087(-1)
0.7	9.532656(-1)	1.0763	-9.532656(-1)	-5.1839(-1)	6.204842(-1)	3.5302(-1)	2.028542(-2)	1.8587(-1)
0.8	9.504658(-1)	1.0543	-9.504658(-1)	-5.1322(-1)	6.186970(-1)	3.5617(-1)	2.017828(-2)	1.7308(-1)
0.9	9.477203(-1)	1.0352	-9.477203(-1)	-5.0866(-1)	6.169391(-1)	3.5876(-1)	2.008045(-2)	1.6208(-1)
1.0	9.450202(-1)	1.0186	-9.450202(-1)	-5.0461(-1)	6.152061(-1)	3.6090(-1)	1.998999(-2)	1.5255(-1)
2.0	9.195606(-1)	9.2264(-1)	-9.195606(-1)	-4.7988(-1)	5.987491(-1)	3.6854(-1)	1.929327(-2)	1.0224(-1)
5.0	8.504929(-1)	8.2247(-1)	-8.504929(-1)	-4.5129(-1)	5.538197(-1)	3.5340(-1)	1.778703(-2)	7.7541(-2)
7.0	8.079058(-1)	7.8020(-1)	-8.079058(-1)	-4.3826(-1)	5.260856(-1)	3.3923(-1)	1.689966(-2)	7.6502(-2)

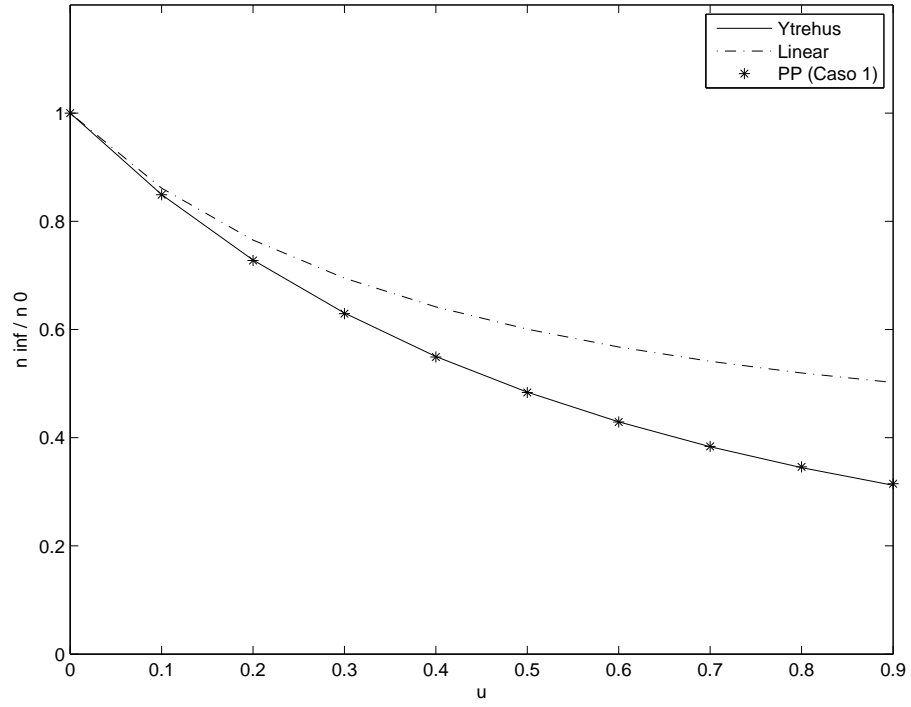


Figura 4.3 – Evaporação Forte:  $n_{\infty}/n_0$  com  $u_w = 0.0$

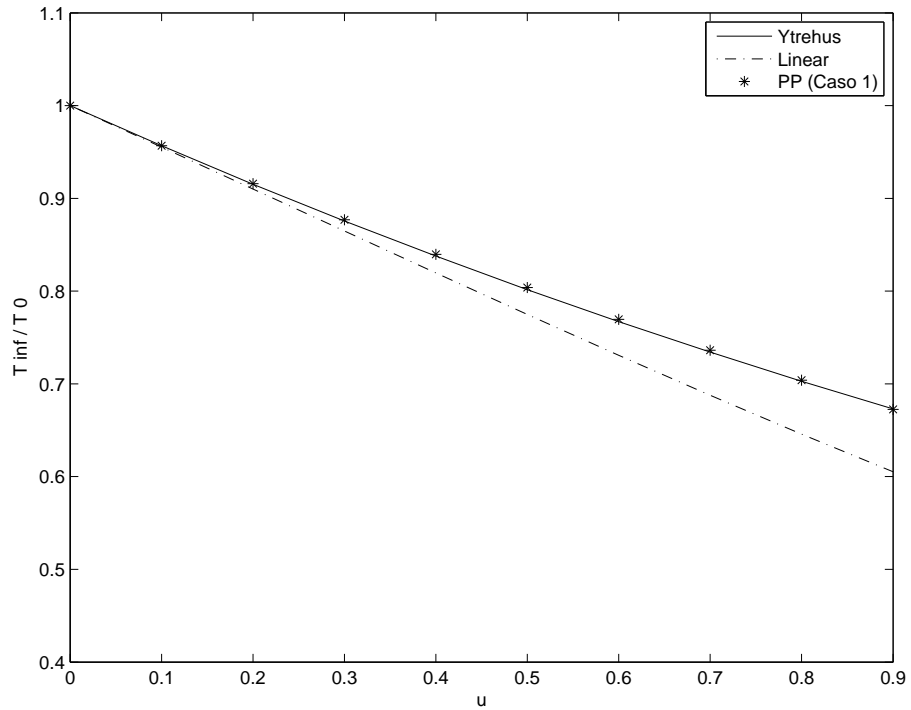


Figura 4.4 – Evaporação Forte:  $T_{\infty}/T_0$  com  $u_w = 0.0$

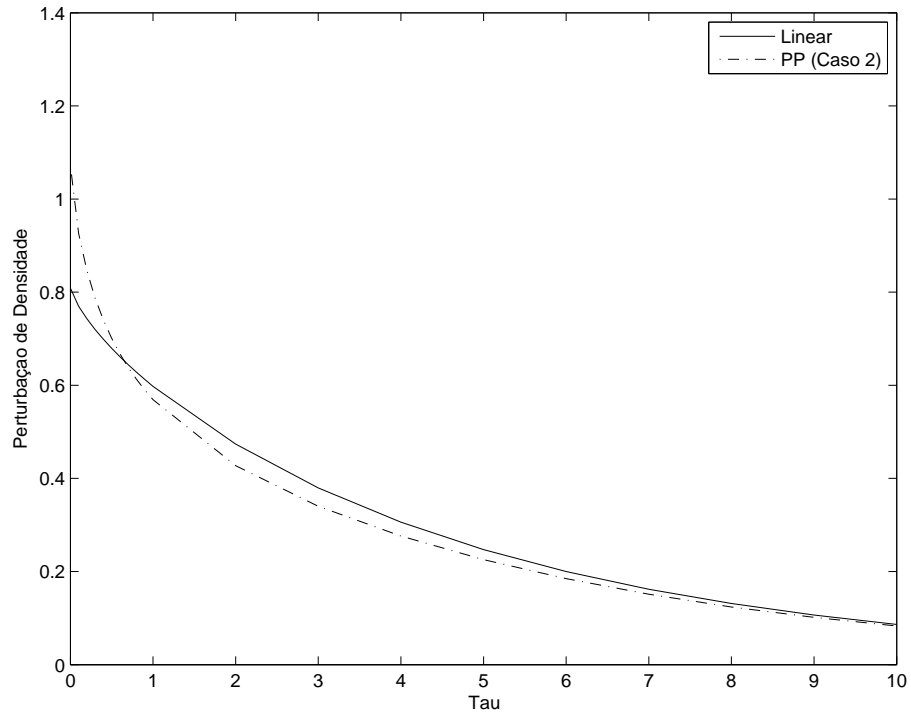


Figura 4.5 – Evaporação Forte: Perturbações de Densidade  $\Delta N(\tau)$  e  $\Delta \hat{N}(\tau)$  com  $u = 0.8$  e  $u_w = 0.0$

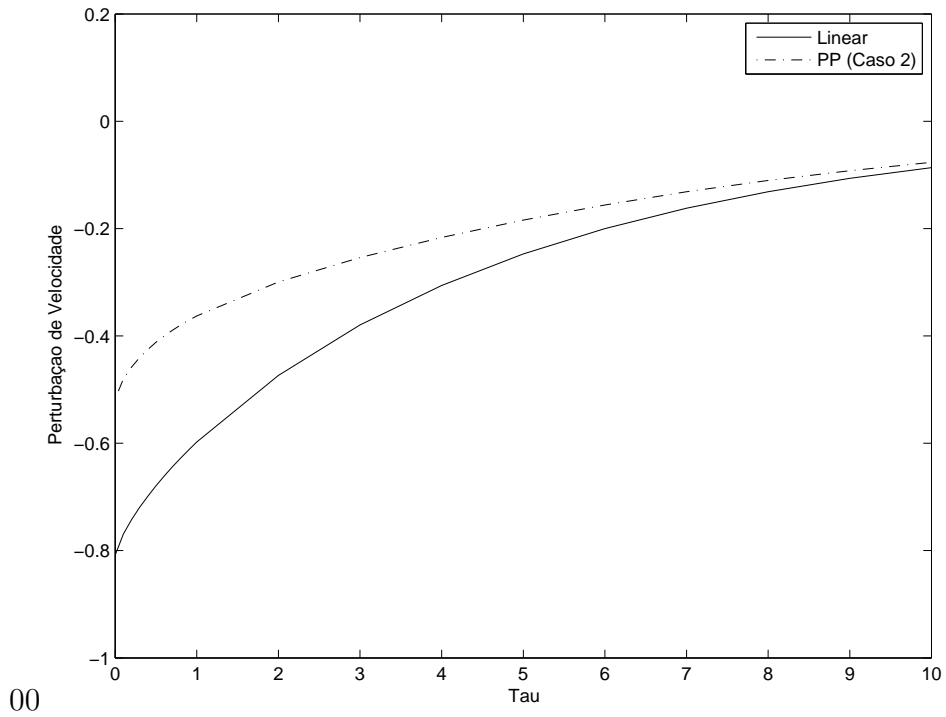


Figura 4.6 – Evaporação Forte: Perturbações de Velocidade  $\Delta U(\tau)$  e  $\Delta \hat{U}(\tau)$  com  $u = 0.8$  e  $u_w = 0.0$

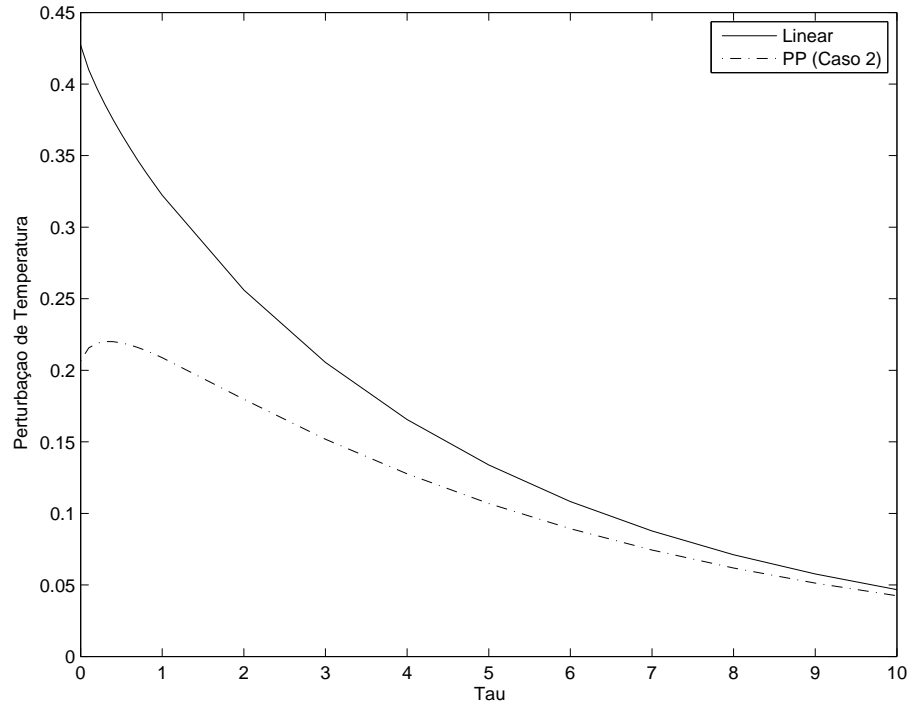


Figura 4.7 – Evaporação Forte: Perturbações de Temperatura  $\Delta T(\tau)$  e  $\widehat{\Delta T}(\tau)$  com  $u = 0.8$  e  $u_w = 0.0$

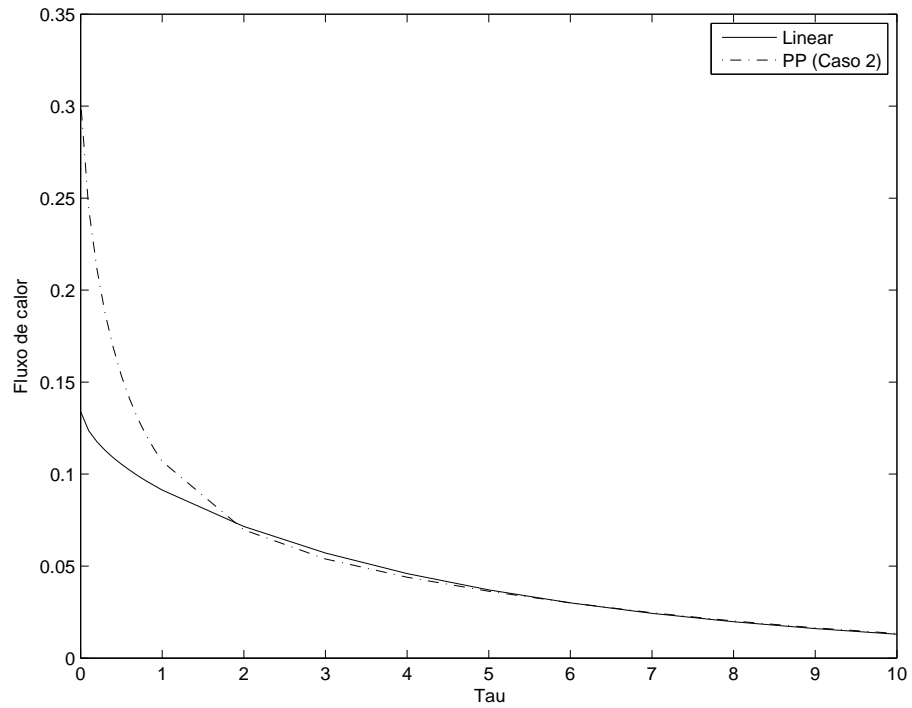


Figura 4.8 – Evaporação Forte: Fluxos de Calor  $Q_x(\tau)$  e  $\widehat{Q}_x(\tau)$  com  $u = 0.8$  e  $u_w = 0.0$

## 5 EVAPORAÇÃO FORTE: SOLUÇÃO UNIFICADA

Neste capítulo a versão linearizada do problema de evaporação forte, apresentada no capítulo anterior, é abordada com os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS. O objetivo é construir uma solução unificada para este problema usando o método ADO e os modelos cinéticos mencionados. Dessa forma, além de se apresentar novos resultados, também é feita uma análise comparativa entre os diferentes modelos.

### 5.1 Formulação Matemática

Assim como no capítulo 2, inicia-se com a equação não linear de Boltzmann [Williams, 1971; Williams, 2001] em sua forma estacionária dada por

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = J(f', f), \quad (5.1)$$

onde  $f$  é a função de distribuição de partículas ( $f'$  e  $f$  estão associadas, respectivamente, com as distribuições antes e após as colisões),  $J$  é o operador de colisão [Williams, 2001],  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  é o vetor espacial e  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$  é o vetor velocidade molecular.

Como neste problema o estado de equilíbrio do gás é atingido longe da fase condensada e é caracterizado por uma distribuição Maxwelliana que contém um parâmetro  $\mathbf{u}_\infty$ , assim como no capítulo anterior segue-se Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1981] e propõe-se para  $f$  a expressão

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_\infty(\mathbf{v})[1 + h(\mathbf{r}, \mathbf{v})], \quad (5.2)$$

onde  $h$  é uma perturbação na Maxwelliana absoluta [Ytrehus, 1976]

$$f_\infty(\mathbf{v}) = n_\infty \left[ \frac{m}{2\pi k T_\infty} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m|\mathbf{v} - \mathbf{u}_\infty|^2}{2kT_\infty} \right\}. \quad (5.3)$$

Aqui  $k$  é a constante de Boltzmann,  $m$  é a massa da partícula de gás,  $n_\infty$ ,  $\mathbf{u}_\infty$  e  $T_\infty$  são respectivamente a densidade, a velocidade e a temperatura do gás na região de equilíbrio. Seguindo Williams [Williams, 1971] novamente e fazendo a mudança de variáveis  $\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}_\infty$ , a Eq. (5.2) é reescrita como

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{V}) = f_\infty(\mathbf{V})[1 + h(\mathbf{r}, \mathbf{V})], \quad (5.4)$$

onde

$$f_{\infty}(\mathbf{V}) = n_{\infty} \left[ \frac{m}{2\pi k T_{\infty}} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{mV^2}{2kT_{\infty}} \right\}. \quad (5.5)$$

Substituindo a Eq. (5.4) na Eq. (5.1) e seguindo o procedimento mostrado nas Refs. [Williams, 1971] e [Barichello e Siewert, 2003], assume-se a equação linearizada unidimensional escrita na forma

$$(u + C_x) \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{C}) + \varepsilon h(\tau, \mathbf{C}) = \varepsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-C'^2} F(\mathbf{C}', \mathbf{C}) h(\tau, \mathbf{C}') dC'_x dC'_y dC'_z, \quad (5.6)$$

onde

$$\mathbf{C} = \mathbf{V} [m/(2kT_{\infty})]^{1/2} \quad (5.7)$$

é o vetor velocidade de partículas adimensionalizado  $\mathbf{C} = (C_x, C_y, C_z)$ , com magnitude  $C$ , e

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_{\infty} [m/(2kT_{\infty})]^{1/2} \quad (5.8)$$

é a velocidade de equilíbrio do gás adimensionalizada  $\mathbf{u} = (u, 0, 0)$ . A variável espacial adimensionalizada  $\tau = x/l$  é escrita em termos do livre caminho médio  $l$ , que até este ponto é considerado arbitrário. Continuando, o parâmetro  $\varepsilon$  é dado agora por

$$\varepsilon = \sigma_0^2 n_{\infty} \pi^{1/2} l, \quad (5.9)$$

onde  $\sigma_0$  é o diâmetro de colisão das partículas de gás (na forma de esferas rígidas). Na Eq. (5.6)  $F(\mathbf{C}', \mathbf{C})$  é o núcleo de espalhamento do modelo cinético a ser utilizado, o qual pode ser escrito de maneira unificada para os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS mediante a escolha apropriada dos parâmetros  $\beta$  e  $\varpi$  [Scherer, 2005; Garcia e Siewert, 2006]. Assim, na Eq. (5.6) tem-se

$$F(\mathbf{C}', \mathbf{C}) = 1 + 2(\mathbf{C}' \cdot \mathbf{C}) + (2/3) (C'^2 - 3/2) (C^2 - 3/2) + \beta M(\mathbf{C}', \mathbf{C}) + \varpi N(\mathbf{C}', \mathbf{C}), \quad (5.10)$$

onde

$$M(\mathbf{C}', \mathbf{C}) = (4/5) (\mathbf{C}' \cdot \mathbf{C}) (C'^2 - 5/2) (C^2 - 5/2) \quad (5.11)$$

e

$$N(\mathbf{C}', \mathbf{C}) = 2 [(\mathbf{C}' \cdot \mathbf{C})^2 - (1/3) C'^2 C^2]. \quad (5.12)$$

Continuando, conforme mostrado por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2003], dependendo do modelo cinético o parâmetro  $\varepsilon$  assumirá diferentes valores quando definido em

termos do livre caminho médio baseado na viscosidade ( $\varepsilon_p$ ) ou da condutividade térmica ( $\varepsilon_t$ ). Desta forma, assume-se novamente as derivações dadas nas Refs. [Siewert e Sharipov, 2002], [Barichello e Siewert, 2003], [Scherer, 2005] e [Garcia e Siewert, 2006] e completa-se as definições das Eqs. (5.6), (5.10) a (5.12) da seguinte maneira:

- **modelo BGK**

$$\beta = \varpi = 0 \quad \text{e} \quad \varepsilon_t = \varepsilon_p = 1 \quad (5.13)$$

- **modelo S**

$$\beta = 1/3, \quad \varpi = 0, \quad \varepsilon_t = 3/2 \quad \text{e} \quad \varepsilon_p = 1 \quad (5.14)$$

- **modelo Gross-Jackson (GJ)**

$$\beta = 5/9, \quad \varpi = 1/3, \quad \varepsilon_t = 9/4 \quad \text{e} \quad \varepsilon_p = 3/2 \quad (5.15)$$

- **modelo MRS**

$$\beta = 1 - (16/15)2^{1/2}, \quad \varpi = 1 - (8/5)2^{1/2}, \quad \varepsilon_t = (15/32)2^{1/2} \quad \text{e} \quad \varepsilon_p = (5/16)2^{1/2}. \quad (5.16)$$

Entretanto, seguindo o que já foi desenvolvido, para que o parâmetro  $u$  fique no termo integral da Eq. (5.6) define-se o vetor adimensional  $\mathbf{c} = \mathbf{C} + \mathbf{u}$  e reescreve-se as Eqs. (5.6), (5.10) a (5.12) como

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) + \varepsilon h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|\mathbf{c}' - \mathbf{u}|^2} F(\mathbf{c}', \mathbf{c} : \mathbf{u}) h(\tau, \mathbf{c}') dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (5.17)$$

onde

$$F(\mathbf{c}', \mathbf{c} : \mathbf{u}) = 1 + 2(\mathbf{c}' - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{c} - \mathbf{u}) + (2/3)(|\mathbf{c}' - \mathbf{u}|^2 - 3/2)(|\mathbf{c} - \mathbf{u}|^2 - 3/2) + \beta M(\mathbf{c}', \mathbf{c} : \mathbf{u}) + \varpi N(\mathbf{c}', \mathbf{c} : \mathbf{u}), \quad (5.18)$$

$$M(\mathbf{c}', \mathbf{c} : \mathbf{u}) = (4/5)(\mathbf{c}' - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{c} - \mathbf{u})(|\mathbf{c}' - \mathbf{u}|^2 - 5/2)(|\mathbf{c} - \mathbf{u}|^2 - 5/2) \quad (5.19)$$

e

$$N(\mathbf{c}', \mathbf{c} : \mathbf{u}) = 2 \{ [(\mathbf{c}' - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{c} - \mathbf{u})]^2 - (1/3)|\mathbf{c}' - \mathbf{u}|^2|\mathbf{c} - \mathbf{u}|^2 \}. \quad (5.20)$$

Para as condições de contorno da Eq. (5.17) repete-se o procedimento apresentado no capítulo 4 e usa-se para a interface a Eq. (4.16) e para o infinito a Eq. (4.20). As quantidades de interesse a serem calculadas também são dadas pelas mesmas expressões encontradas no capítulo anterior (Eqs. (4.21) a (4.24)). Dessa forma, novamente o objetivo é determinar as quantidades macroscópicas do gás e as relações entre densidade e temperatura da interface e da região de equilíbrio dadas pelos quocientes  $n_\infty/n_0$  e  $T_\infty/T_0$ .

## 5.2 Reformulação

Nesta seção apresenta-se uma reformulação que simplifica o problema original a fim de construir a solução em ordenadas discretas. Assim, ao invés de tratar-se diretamente com a Eq. (5.17), define-se problemas auxiliares que simplificam a resolução do problema original. Seguindo Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1982] definem-se as projeções

$$h_1(\tau, c_x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z \quad (5.21)$$

e

$$h_2(\tau, c_x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} (c_y^2 + c_z^2 - 1) h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z. \quad (5.22)$$

Primeiro multiplica-se a Eq. (5.17) por

$$\phi_1(c_y, c_z) = e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \quad (5.23)$$

e integra-se a equação resultante para todo  $c_y$  e todo  $c_z$ . Fazendo  $c_x = \xi$  encontra-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_1(\tau, \xi) + \varepsilon h_1(\tau, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi' - u)^2} [k_{11}(\xi', \xi : u) h_1(\tau, \xi') + k_{12}(\xi', \xi : u) h_2(\tau, \xi')] d\xi', \quad (5.24)$$

onde

$$\begin{aligned} k_{11}(\xi', \xi : u) = & 1 + 2(\xi' - u)(\xi - u) + (2/3) [(\xi' - u)^2 - 1/2] [(\xi - u)^2 - 1/2] + \\ & (4/5)\beta(\xi' - u)(\xi - u) [(\xi' - u)^2 - 3/2] [(\xi - u)^2 - 3/2] + \\ & 2\varpi [(2/3)(\xi' - u)^2(\xi - u)^2 - (1/3)(\xi' - u)^2 - (1/3)(\xi - u)^2 + 1/6] \end{aligned} \quad (5.25)$$



e

$$k_{12}(\xi', \xi : u) = (2/3) [(\xi - u)^2 - 1/2] + (4/5)\beta(\xi' - u)(\xi - u) [(\xi - u)^2 - 3/2] + 2\varpi [1/6 - (1/3)(\xi - u)^2]. \quad (5.26)$$

Multiplica-se também a Eq. (5.17) por

$$\phi_2(c_y, c_z) = (c_y^2 + c_z^2 - 1)e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \quad (5.27)$$

e integra-se a equação resultante para todo  $c_y$  e todo  $c_z$ . Fazendo  $c_x = \xi$  novamente encontra-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_2(\tau, \xi) + \varepsilon h_2(\tau, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi' - u)^2} [k_{21}(\xi', \xi : u)h_1(\tau, \xi') + k_{22}(\xi', \xi : u)h_2(\tau, \xi')] d\xi', \quad (5.28)$$

onde

$$k_{21}(\xi', \xi : u) = (2/3) [(\xi' - u)^2 - 1/2] + (4/5)\beta(\xi' - u)(\xi - u) [(\xi' - u)^2 - 3/2] + 2\varpi [1/6 - (1/3)(\xi' - u)^2] \quad (5.29)$$

e

$$k_{22}(\xi', \xi : u) = 2/3 + (4/5)\beta(\xi' - u)(\xi - u) + (1/3)\varpi. \quad (5.30)$$

Repetindo este procedimento encontra-se para as condições de contorno novamente as Eqs. (4.38) a (4.41) e para as quantidades de interesse as Eqs. (4.42) a (4.45).

As Eqs. (5.24) e (5.28) podem ser escritas vetorialmente como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{H}(\tau, \xi) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi' : u) \mathbf{K}(\xi', \xi : u) \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi', \quad (5.31)$$

onde

$$\mathbf{H}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} h_1(\tau, \xi) \\ h_2(\tau, \xi) \end{bmatrix}, \quad (5.32)$$

$$\psi(\xi : u) = \pi^{-1/2} e^{-(\xi - u)^2} \quad (5.33)$$

e o núcleo de espalhamento é dado pela matriz de dimensão  $2 \times 2$

$$\mathbf{K}(\xi', \xi : u) = \begin{bmatrix} k_{11}(\xi', \xi : u) & k_{12}(\xi', \xi : u) \\ k_{21}(\xi', \xi : u) & k_{22}(\xi', \xi : u) \end{bmatrix}, \quad (5.34)$$

cujas componentes  $k_{ij}$  são dadas pelas Eqs. (5.25), (5.26), (5.29) e (5.30). Em termos do vetor

$\mathbf{H}$ , a condição de contorno para a interface é dada pela Eq. (4.50), a condição de contorno para o infinito é dada pela Eq. (4.51) e as quantidades de interesse são dadas pelas Eqs. (4.52) a (4.55).

Assim como no capítulo anterior a função característica  $\psi(\xi : u)$ , dada pela Eq. (5.33), não é uma função par. Portanto, para que o termo exponencial seja colocado fora da integral da Eq. (5.31), define-se o vetor

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = e^{-(\xi-u)^2} \mathbf{H}(\tau, \xi) \quad (5.35)$$

e reescreve-se a Eq. (5.31) como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \psi(\xi : u) \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{K}(\xi', \xi : u) \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (5.36)$$

onde

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} g_1(\tau, \xi) \\ g_2(\tau, \xi) \end{bmatrix}, \quad (5.37)$$

e as condições de contorno como

$$\mathbf{G}(0, \xi) = \pi^{1/2} e^{-(\xi-u)^2} \left\{ \Delta N_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + 2(\xi-u)(u_w - u) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \Delta T_0 \begin{bmatrix} (\xi-u)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \right\} \quad (5.38)$$

e

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{0}. \quad (5.39)$$

As quantidades de interesse também podem ser escritas em termos do vetor  $\mathbf{G}$ . Assim, encontra-se para a perturbação de densidade

$$\Delta N(\tau) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi, \quad (5.40)$$

para a perturbação de velocidade

$$\Delta U(\tau) = \frac{\pi^{-1}}{u} \int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \xi - u \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi, \quad (5.41)$$

para a perturbação de temperatura

$$\Delta T(\tau) = \frac{2}{3}\pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} (\xi - u)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi \quad (5.42)$$

e para o fluxo de calor

$$Q_x(\tau) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi - u) \begin{bmatrix} (\xi - u)^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi, \quad (5.43)$$

onde  $T$  denota a operação de transposição. Na próxima seção será desenvolvida a solução em ordenadas discretas para o problema  $\mathbf{G}$ .

### 5.3 Solução em Ordenadas Discretas

Para sistemas como a Eq. (5.36) busca-se soluções exponenciais da forma

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) e^{-\varepsilon\tau/\nu}, \quad (5.44)$$

onde

$$\mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \begin{bmatrix} \Phi_1(\nu, \xi) \\ \Phi_2(\nu, \xi) \end{bmatrix}. \quad (5.45)$$

Substituindo a Eq. (5.44) na Eq. (5.36) encontra-se

$$(1 - \xi/\nu)\mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \psi(\xi : u) \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{K}(\xi', \xi : u) \mathbf{\Phi}(\nu, \xi') d\xi'. \quad (5.46)$$

Seguindo o procedimento utilizado no capítulo anterior, a Eq. (5.46) pode ser simplificada usando algumas condições de normalização. Assim, integrando a primeira componente da Eq. (5.46) para todo  $\xi$  encontra-se a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \xi \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) d\xi = 0. \quad (5.47)$$

Multiplicando a primeira componente da Eq. (5.46) por  $(\xi - u)$ , integrando a equação resultante para todo  $\xi$  e usando a Eq. (5.47) encontra-se a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \xi^2 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) d\xi = 0. \quad (5.48)$$

Multiplica-se agora a primeira componente da Eq. (5.46) por  $(\xi - u)^2$  e integra-se a equação resultante para todo  $\xi$ . Da mesma forma integra-se a segunda componente da Eq. (5.46) para todo  $\xi$  e, usando as Eqs. (5.47) e (5.48), encontra-se a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \xi^3 \\ \xi \end{bmatrix}^T \Phi(\nu, \xi) d\xi = 0. \quad (5.49)$$

Assim, usando as condições de normalização mostradas nas Eqs. (5.47) a (5.49), a Eq. (5.46) pode ser reescrita como

$$(1 - \xi/\nu)\Phi(\nu, \xi) = \psi(\xi : u)\mathbf{Q}(\xi : u) \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\nu, \xi') d\xi', \quad (5.50)$$

onde a matriz de dimensão  $2 \times 2$

$$\mathbf{Q}(\xi : u) = \begin{bmatrix} q_{11}(\xi : u) & q_{12}(\xi : u) \\ q_{21}(\xi : u) & q_{22}(\xi : u) \end{bmatrix} \quad (5.51)$$

possui as componentes

$$\begin{aligned} q_{11}(\xi : u) = & 1 - 2u(\xi - u) + (2/3)(u^2 - 1/2)[(\xi - u)^2 - 1/2] + \\ & (4/5)\beta(\xi - u)[(3/2)u - u^3][(\xi - u)^2 - 3/2] \\ & + 2\varpi[(2/3)u^2(\xi - u)^2 - (1/3)(\xi - u)^2 - (1/3)u^2 + 1/6], \end{aligned} \quad (5.52)$$

$$\begin{aligned} q_{12}(\xi : u) = & (2/3)[(\xi - u)^2 - 1/2] - (4/5)\beta u(\xi - u)[(\xi - u)^2 - 3/2] \\ & + 2\varpi[1/6 - (1/3)(\xi - u)^2], \end{aligned} \quad (5.53)$$

$$q_{21}(\xi : u) = (2/3)(u^2 - 1/2) + (4/5)\beta[(3/2)u - u^3](\xi - u) + 2\varpi[1/6 - (1/3)u^2] \quad (5.54)$$

e

$$q_{22}(\xi : u) = 2/3 - (4/5)\beta u(\xi - u) + \varpi/3. \quad (5.55)$$

Novamente a função característica  $\psi(\xi : u)$  dada pela Eq. (5.33) pode ser reescrita como uma soma de uma função par e uma função ímpar, ou seja,

$$\psi(\xi : u) = \pi^{-1/2} \cosh(2\xi u) e^{-(\xi^2 + u^2)} + \pi^{-1/2} \sinh(2\xi u) e^{-(\xi^2 + u^2)}, \quad (5.56)$$

o que é fundamental para o desenvolvimento da solução em ordenadas discretas. Assim, usando

a Eq. (5.56), a Eq. (5.50) pode ser reescrita como

$$(1 - \xi/\nu)\Phi(\nu, \xi) = P(\xi : u)[\mathbf{A}(\xi : u) + \mathbf{B}(\xi : u)] \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\nu, \xi') d\xi', \quad (5.57)$$

onde

$$P(\xi : u) = \pi^{-1/2} e^{-(\xi^2 + u^2)} \quad (5.58)$$

e as matrizes de dimensão  $2 \times 2$

$$\mathbf{A}(\xi : u) = \begin{bmatrix} a_{11}(\xi : u) & a_{12}(\xi : u) \\ a_{21}(\xi : u) & a_{22}(\xi : u) \end{bmatrix} \quad (5.59)$$

e

$$\mathbf{B}(\xi : u) = \begin{bmatrix} b_{11}(\xi : u) & b_{12}(\xi : u) \\ b_{21}(\xi : u) & b_{22}(\xi : u) \end{bmatrix} \quad (5.60)$$

possuem as componentes

$$\begin{aligned} a_{11}(\xi : u) = & \{1 + 2u^2 + (2/3)(u^2 - 1/2)(\xi^2 + u^2 - 1/2) \\ & + (4/5)\beta [(3/2)u - u^3] [(3/2)u - u^3 - 3u\xi^2] \\ & + 2\varpi [(2/3)u^2\xi^2 + (2/3)u^4 - (1/3)\xi^2 - (2/3)u^2 + 1/6]\} \cosh(2\xi u) + \\ & \{-(4/3)u^3\xi - (4/3)u\xi + (4/5)\beta [(3/2)u - u^3] [\xi^3 + 3u^2\xi - (3/2)\xi] \\ & + 2\varpi [(2/3)\xi u - (4/3)u^3\xi]\} \sinh(2\xi u), \quad (5.61) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{12}(\xi : u) = & \{(2/3)(\xi^2 + u^2 - 1/2) - (4/5)\beta u [(3/2)u - u^3 - 3u\xi^2] \\ & + 2\varpi [1/6 - (1/3)\xi^2 - (1/3)u^2]\} \cosh(2\xi u) + \\ & \{-(4/3)u\xi - (4/5)\beta u [\xi^3 + 3u^2\xi - (3/2)\xi] + (4/3)\varpi u\xi\} \sinh(2\xi u), \quad (5.62) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{21}(\xi : u) = & \{(2/3)(u^2 - 1/2) - (4/5)\beta u [(3/2)u - u^3] + 2\varpi [1/6 - (1/3)u^2]\} \cosh(2\xi u) + \\ & (4/5)\beta \xi [(3/2)u - u^3] \sinh(2\xi u), \quad (5.63) \end{aligned}$$

$$a_{22}(\xi : u) = [2/3 + (4/5)\beta u^2 + \varpi/3] \cosh(2\xi u) - (4/5)\beta u \xi \sinh(2\xi u), \quad (5.64)$$

$$\begin{aligned}
b_{11}(\xi : u) = & \{1 + 2u^2 + (2/3)(u^2 - 1/2)(\xi^2 + u^2 - 1/2) \\
& + (4/5)\beta [(3/2)u - u^3] [(3/2)u - u^3 - 3u\xi^2] + \\
& 2\varpi [(2/3)u^2\xi^2 + (2/3)u^4 - (1/3)\xi^2 - (2/3)u^2 + 1/6]\} \sinh(2\xi u) + \\
& \{-(4/3)u^3\xi - (4/3)u\xi + (4/5)\beta [(3/2)u - u^3] [\xi^3 + 3u^2\xi - (3/2)\xi] \\
& + 2\varpi [(2/3)\xi u - (4/3)u^3\xi]\} \cosh(2\xi u), \quad (5.65)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{12}(\xi : u) = & \{(2/3)(\xi^2 + u^2 - 1/2) - (4/5)\beta u [(3/2)u - u^3 - 3u\xi^2] \\
& + 2\varpi [1/6 - (1/3)\xi^2 - (1/3)u^2]\} \sinh(2\xi u) + \\
& \{-(4/3)u\xi - (4/5)\beta u [\xi^3 + 3u^2\xi - (3/2)\xi] + (4/3)\varpi u\xi\} \cosh(2\xi u), \quad (5.66)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{21}(\xi : u) = & \{(2/3)(u^2 - 1/2) - (4/5)\beta u [(3/2)u - u^3] + 2\varpi [1/6 - (1/3)u^2]\} \sinh(2\xi u) + \\
& (4/5)\beta \xi [(3/2)u - u^3] \cosh(2\xi u) \quad (5.67)
\end{aligned}$$

e

$$b_{22}(\xi : u) = [2/3 + (4/5)\beta u^2 + \varpi/3] \sinh(2\xi u) - (4/5)\beta u \xi \cosh(2\xi u). \quad (5.68)$$

A partir deste ponto segue-se o desenvolvimento apresentado no capítulo anterior para a obtenção do problema de autovalor e das soluções elementares, pois, com a excessão das componentes das matrizes  $\mathbf{A}(\xi : u)$  e  $\mathbf{B}(\xi : u)$  dadas pelas Eqs. (5.61) a (5.68), ele é igual ao encontrado aqui.

A quantidade de autovalores positivos, negativos e degenerados para os modelos S, Gross-Jackson e MRS é a mesma encontrada para o modelo BGK. Assim, seguindo o desenvolvimento apresentado no capítulo anterior, a solução geral em ordenadas discretas pode ser escrita para  $u = 0$  e para  $u^2 = 5/6$  como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = A_1^* \mathbf{G}_1(\pm\xi_i) + A_2^* \mathbf{G}_2(\pm\xi_i) + A_3^* \mathbf{G}_3(\pm\xi_i) + A_4^* \mathbf{G}_4(\tau, \pm\xi_i) + \sum_{j=1}^{4N-4} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon\tau/\nu_j} \quad (5.69)$$

e para  $0 < u^2 < 5/6$  e  $u^2 > 5/6$  como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = A_1^* \mathbf{G}_1(\pm\xi_i) + A_2^* \mathbf{G}_2(\pm\xi_i) + A_3^* \mathbf{G}_3(\pm\xi_i) + \sum_{j=1}^{4N-3} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon\tau/\nu_j}, \quad (5.70)$$

onde, seguindo Siewert e Thomas [Siewert e Thomas, 1982], nas Eqs. (5.69) e (5.70) as soluções

exatas da Eq. (5.36) são

$$\mathbf{G}_1(\xi) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-(\xi-u)^2}, \quad (5.71)$$

$$\mathbf{G}_2(\xi) = \begin{bmatrix} \xi - u \\ 0 \end{bmatrix} e^{-(\xi-u)^2} \quad (5.72)$$

e

$$\mathbf{G}_3(\xi) = \begin{bmatrix} (\xi - u)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} e^{-(\xi-u)^2}. \quad (5.73)$$

Para encontrar a quarta solução exata, presente apenas na Eq. (5.69), propõe-se para  $\mathbf{G}_4(\tau, \xi)$  uma expressão da forma

$$\mathbf{G}_4(\tau, \xi) = (\mathbf{A}\tau\xi^2 + \mathbf{B}\tau\xi + \mathbf{C}\tau + \mathbf{D}\xi^3 + \mathbf{E}\xi^2 + \mathbf{F}\xi + \mathbf{G})e^{-(\xi-u)^2}, \quad (5.74)$$

onde  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{F}$  e  $\mathbf{G}$  são vetores constantes de dimensão  $2 \times 1$ . Substituindo a Eq. (5.74) na Eq. (5.36) encontra-se para  $u^2 = 5/6$

$$\mathbf{G}_4(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} \tau(\xi - u)^2 - 3u\tau(\xi - u) + \tau + (\xi - u)^3/(\varepsilon\beta - \varepsilon) + 3u(\xi - u)^2/(\varepsilon - \varepsilon\varpi) \\ \tau + (\xi - u)/(\varepsilon\beta - \varepsilon) \end{bmatrix} e^{-(\xi-u)^2} \quad (5.75)$$

e para  $u = 0$

$$\mathbf{G}_4(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} \tau\xi^2 - 3\tau/2 + \xi^3/(\varepsilon\beta - \varepsilon) \\ \tau + \xi/(\varepsilon\beta - \varepsilon) \end{bmatrix} e^{-\xi^2}. \quad (5.76)$$

O próximo passo é determinar os coeficientes  $A_1^*$ ,  $A_2^*$ ,  $A_3^*$ ,  $A_4^*$  e  $A_j$ , para  $j = 1, \dots, 4N-3$ , nas Eqs. (5.69) e (5.70). Assim, usando a Eq. (5.39) encontra-se que os coeficientes  $A_j$  associados às constantes de separação negativas e os coeficientes  $A_1^*$ ,  $A_2^*$ ,  $A_3^*$  e  $A_4^*$  devem ser iguais a zero. Dessa forma a solução em ordenadas discretas é reescrita para  $u^2 < 5/6$  como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon\tau/\nu_j} \quad (5.77)$$

e para  $u^2 \geq 5/6$  como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{2N-3} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon\tau/\nu_j}, \quad (5.78)$$

onde agora  $\nu_j$  são apenas as constantes de separação positivas.

Continuando, substitui-se a Eq. (5.77) na versão em ordenadas discretas da condição de contorno dada pela Eq. (5.38)

$$\mathbf{G}(0, \xi_i) = \pi^{1/2}[\Delta N_0 \mathbf{G}_1(\xi_i) + 2(u_w - u) \mathbf{G}_2(\xi_i) + \Delta T_0 \mathbf{G}_3(\xi_i)], \quad (5.79)$$

para  $i = 1, \dots, N$ , onde  $\mathbf{G}_1$ ,  $\mathbf{G}_2$  e  $\mathbf{G}_3$  são dadas pelas Eqs. (5.71) a (5.73), e encontra-se para  $u^2 < 5/6$  o sistema linear quadrado com  $2N$  equações e  $2N$  incógnitas

$$\sum_{j=1}^{2N-2} A_j \Phi(\nu_j, \xi_i) - \pi^{1/2}[\Delta N_0 \mathbf{G}_1(\xi_i) + \Delta T_0 \mathbf{G}_3(\xi_i)] = 2\pi^{1/2}(u_w - u) \mathbf{G}_2(\xi_i), \quad (5.80)$$

para  $i = 1, \dots, N$ . Da mesma forma substitui-se a Eq. (5.78) na Eq. (5.79) e encontra-se para  $u^2 \geq 5/6$  o sistema linear retangular com  $2N$  equações e  $2N - 1$  incógnitas

$$\sum_{j=1}^{2N-3} A_j \Phi(\nu_j, \xi_i) - \pi^{1/2}[\Delta N_0 \mathbf{G}_1(\xi_i) + \Delta T_0 \mathbf{G}_3(\xi_i)] = 2\pi^{1/2}(u_w - u) \mathbf{G}_2(\xi_i), \quad (5.81)$$

para  $i = 1, \dots, N$ . Resolvendo os sistemas lineares dados pelas Eqs. (5.80) e (5.81) obtém-se os coeficientes  $A_j$  e as quantidades  $\Delta N_0$  e  $\Delta T_0$  definidas nas Eqs. (4.17) e (4.18).

Novamente, nota-se pela Eq. (5.80) que para  $u^2 < 5/6$  o sistema linear a ser resolvido possui o mesmo número de equações e de incógnitas, enquanto que para  $u^2 \geq 5/6$  o sistema linear (Eq. (5.81)) possui uma equação a mais que o número de incógnitas. Por isso este último sistema necessita ser resolvido com o método de mínimos quadrados. Entretanto, assim como no capítulo anterior, neste caso observa-se que os resultados das quantidades de interesse não convergem a medida que se aumenta o número de pontos de quadratura no método ADO, o que parece evidenciar que utilizando os modelos S, Gross-Jackson e MRS este problema de evaporação forte também não tem solução quando  $u^2 \geq 5/6$ . Isto confirma o que já havia sido mostrado por Arthur e Cercignani [Arthur e Cercignani, 1980], ou seja, que este problema possui solução apenas quando  $u < \sqrt{5/6}$ , o que corresponde a  $Ma < 1$ . Assim, utiliza-se a Eq. (5.77) como solução em ordenadas discretas.



## 5.4 Quantidades de Interesse

O passo seguinte é a determinação das quantidades de interesse dadas pelas Eqs. (5.40) a (5.43). Substituindo a Eq. (5.77) na Eq. (5.40) obtém-se para a perturbação de densidade

$$\Delta N(\tau) = \pi^{-1} \sum_{j=1}^{2N-2} A_j e^{-\varepsilon\tau/\nu_j} \mathbf{X}(\nu_j). \quad (5.82)$$

Aplicando a Eq. (5.77) na Eq. (5.41) e usando a Eq. (5.47) obtém-se para a perturbação de velocidade

$$\Delta U(\tau) = -\Delta N(\tau). \quad (5.83)$$

Substituindo a Eq. (5.77) na Eq. (5.42) e usando as Eqs. (5.47) e (5.48) obtém-se para a perturbação de temperatura

$$\Delta T(\tau) = \frac{2}{3} \pi^{-1} \sum_{j=1}^{2N-2} A_j e^{-\varepsilon\tau/\nu_j} \mathbf{Y}(\nu_j). \quad (5.84)$$

Aplicando a Eq. (5.77) na Eq. (5.43) e usando as Eqs. (5.47) a (5.49) encontra-se para o fluxo de calor

$$Q_x(\tau) = -u\pi^{-1} \sum_{j=1}^{2N-2} A_j e^{-\varepsilon\tau/\nu_j} \mathbf{Z}(\nu_j). \quad (5.85)$$

Nas equações acima

$$\mathbf{X}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (5.86)$$

$$\mathbf{Y}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \begin{bmatrix} u^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (5.87)$$

e

$$\mathbf{Z}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N w_k \begin{bmatrix} u^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (5.88)$$

## 5.5 Aspectos Computacionais e Resultados Numéricos

A implementação computacional da solução ADO é semelhante a dos capítulos anteriores. O primeiro passo é definir o esquema de quadratura a ser utilizado. Assim usa-se

novamente a quadratura de Gauss-Legendre mapeada no intervalo  $[0, \infty)$  conforme mostrado anteriormente. Após ter os  $N$  pontos  $\xi_k$  e pesos  $w_k$  definidos, a solução é rápida e fácil de implementar. As etapas desta implementação são as seguintes:

- resolver o problema de autovalor encontrado para obter as constantes de separação  $\nu_j$  e as soluções elementares  $\Phi_{\pm}(\nu_j)$ ;
- resolver o sistema linear dado pela Eq. (5.80) para obter os coeficientes  $A_j$  e as quantidades  $\Delta N_0$  e  $\Delta T_0$ ;
- calcular as perturbações de densidade, velocidade, temperatura e o fluxo de calor dados pelas Eqs. (5.82) a (5.85).

Os resultados numéricos mostrados aqui foram obtidos em FORTRAN usando  $N = 80$  pontos de quadratura no método ADO. Todos os dígitos mostrados aqui são preservados (com a tolerância de mais ou menos 1 no último dígito) variando-se  $N$  até 200. O tempo computacional para resolver o problema e obter os resultados das quantidades de interesse, para um modelo cinético e para um único valor de  $u$ , é de 3 segundos. Foi usado um PC com processador Pentium IV de 2.66 GHz, memória RAM de 1.5 Gbytes e novamente não se fez nenhuma otimização no programa.

Para ter confiabilidade no programa elaborado e comparar resultados numéricos, inicialmente foram determinados os quocientes  $n_{\infty}/n_0$  e  $T_{\infty}/T_0$  apresentados nas Tabelas 5.1 e 5.2. De fato, os resultados previamente conhecidos na Ref. [Siewert e Thomas, 1982] para o modelo BGK, onde foi usado o método das soluções elementares, foram encontrados (com concordância em todos os dígitos listados naquela referência) na formulação apresentada neste capítulo. Estes resultados também são iguais aos encontrados do capítulo anterior para o problema linearizado. Analisando as Tabelas 5.1 e 5.2 observa-se que, em geral, existem dois dígitos significativos de concordância entre os resultados dos modelos cinéticos. Isso mostra que para estas quantidades não há diferença significativa entre usar um modelo cinético ou outro. Os resultados dos quocientes  $n_{\infty}/n_0$  e  $T_{\infty}/T_0$  com os modelos S, Gross-Jackson e MRS são os mesmos para  $\varepsilon_p$  e  $\varepsilon_t$ , por isso não foi especificado nestas tabelas qual o  $\varepsilon$  utilizado.

As Tabelas 5.3 a 5.14 mostram os resultados para as perturbações de densidade, velocidade, temperatura e para o fluxo de calor. Como não há resultados na literatura para estas quantidades, foi possível apenas verificar que os resultados do modelo BGK são iguais aos resultados obtidos no capítulo anterior para o problema linearizado. Analisando estas tabelas

observa-se que há no máximo dois dígitos significativos de concordância entre os resultados dos modelos cinéticos. Além disso, nota-se que a medida que se aumenta o valor do parâmetro  $u$  os resultados dos modelos cinéticos se aproximam mais uns dos outros. Isso sugere que quanto mais forte é a evaporação, melhor é a concordância entre os modelos cinéticos.

Tabela 5.1 – Evaporação Forte:  $n_\infty/n_0$  com  $u_w = 0.0$

$u$	BGK	S	GJ	MRS
0.0	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
0.1	8.614158(-1)	8.611833(-1)	8.606162(-1)	8.624799(-1)
0.2	7.651737(-1)	7.645252(-1)	7.636107(-1)	7.666497(-1)
0.3	6.949421(-1)	6.939592(-1)	6.928747(-1)	6.964221(-1)
0.4	6.417889(-1)	6.406507(-1)	6.395786(-1)	6.430395(-1)
0.5	6.004481(-1)	5.993421(-1)	5.984461(-1)	6.013538(-1)
0.6	5.676282(-1)	5.667078(-1)	5.660933(-1)	5.681561(-1)
0.7	5.411764(-1)	5.405409(-1)	5.402268(-1)	5.413624(-1)
0.8	5.196389(-1)	5.193236(-1)	5.192394(-1)	5.195949(-1)
0.9	5.020202(-1)	5.019902(-1)	5.019925(-1)	5.019881(-1)

Tabela 5.2 – Evaporação Forte:  $T_\infty/T_0$  com  $u_w = 0.0$

$u$	BGK	S	GJ	MRS
0.0	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
0.1	9.552223(-1)	9.555355(-1)	9.554202(-1)	9.555117(-1)
0.2	9.101039(-1)	9.112058(-1)	9.113692(-1)	9.103781(-1)
0.3	8.647773(-1)	8.667803(-1)	8.674333(-1)	8.649911(-1)
0.4	8.195562(-1)	8.222314(-1)	8.233016(-1)	8.197786(-1)
0.5	7.747813(-1)	7.776872(-1)	7.788787(-1)	7.751038(-1)
0.6	7.307567(-1)	7.333949(-1)	7.343614(-1)	7.312361(-1)
0.7	6.877220(-1)	6.896750(-1)	6.902080(-1)	6.883358(-1)
0.8	6.458357(-1)	6.468655(-1)	6.469961(-1)	6.464230(-1)
0.9	6.051521(-1)	6.052573(-1)	6.052470(-1)	6.052735(-1)

Tabela 5.3 – Evaporação Forte:  $\Delta N(\tau)$  com  $u = 0.4$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	2.646477(-1)	2.717536(-1)	2.717536(-1)	2.821755(-1)	2.821755(-1)	2.467693(-1)	2.467693(-1)
0.1	2.098088(-1)	2.179594(-1)	2.017410(-1)	2.213387(-1)	2.038936(-1)	2.050803(-1)	1.915156(-1)
0.2	1.798141(-1)	1.880805(-1)	1.656964(-1)	1.893541(-1)	1.657517(-1)	1.798815(-1)	1.604853(-1)
0.3	1.575439(-1)	1.656964(-1)	1.398856(-1)	1.657517(-1)	1.387758(-1)	1.604853(-1)	1.377101(-1)
0.4	1.397678(-1)	1.477010(-1)	1.199253(-1)	1.469225(-1)	1.180373(-1)	1.446467(-1)	1.198526(-1)
0.5	1.250444(-1)	1.327044(-1)	1.038736(-1)	1.313039(-1)	1.014232(-1)	1.313081(-1)	1.053538(-1)
0.6	1.125657(-1)	1.199253(-1)	9.064832(-2)	1.180373(-1)	8.777805(-2)	1.198526(-1)	9.331528(-2)
0.7	1.018207(-1)	1.088675(-1)	7.956829(-2)	1.065862(-1)	7.638264(-2)	1.098776(-1)	8.315871(-2)
0.8	9.245976(-2)	9.919065(-2)	7.017073(-2)	9.658680(-2)	6.675122(-2)	1.011009(-1)	7.448537(-2)
0.9	8.423068(-2)	9.064832(-2)	6.212421(-2)	8.777805(-2)	5.853681(-2)	9.331528(-2)	6.700692(-2)
1.0	7.694444(-2)	8.305514(-2)	5.518213(-2)	7.996462(-2)	5.148128(-2)	8.636249(-2)	6.050754(-2)
2.0	3.425086(-2)	3.787779(-2)	1.893158(-2)	3.408701(-2)	1.566795(-2)	4.403219(-2)	2.511308(-2)
5.0	4.665052(-3)	5.415992(-3)	1.311640(-3)	3.657468(-3)	6.547064(-4)	9.799060(-3)	3.690587(-3)
7.0	1.447617(-3)	1.724996(-3)	2.744830(-4)	9.178717(-4)	9.066886(-5)	4.429411(-3)	1.360535(-3)

Tabela 5.4 – Evaporação Forte:  $\Delta U(\tau)$  com  $u = 0.4$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	-2.646477(-1)	-2.717536(-1)	-2.717536(-1)	-2.821755(-1)	-2.821755(-1)	-2.467693(-1)	-2.467693(-1)
0.1	-2.098088(-1)	-2.179594(-1)	-2.017410(-1)	-2.213387(-1)	-2.038936(-1)	-2.050803(-1)	-1.915156(-1)
0.2	-1.798141(-1)	-1.880805(-1)	-1.656964(-1)	-1.893541(-1)	-1.657517(-1)	-1.798815(-1)	-1.604853(-1)
0.3	-1.575439(-1)	-1.656964(-1)	-1.398856(-1)	-1.657517(-1)	-1.387758(-1)	-1.604853(-1)	-1.377101(-1)
0.4	-1.397678(-1)	-1.477010(-1)	-1.199253(-1)	-1.469225(-1)	-1.180373(-1)	-1.446467(-1)	-1.198526(-1)
0.5	-1.250444(-1)	-1.327044(-1)	-1.038736(-1)	-1.313039(-1)	-1.014232(-1)	-1.313081(-1)	-1.053538(-1)
0.6	-1.125657(-1)	-1.199253(-1)	-9.064832(-2)	-1.180373(-1)	-8.777805(-2)	-1.198526(-1)	-9.331528(-2)
0.7	-1.018207(-1)	-1.088675(-1)	-7.956829(-2)	-1.065862(-1)	-7.638264(-2)	-1.098776(-1)	-8.315871(-2)
0.8	-9.245976(-2)	-9.919065(-2)	-7.017073(-2)	-9.658680(-2)	-6.675122(-2)	-1.011009(-1)	-7.448537(-2)
0.9	-8.423068(-2)	-9.064832(-2)	-6.212421(-2)	-8.777805(-2)	-5.853681(-2)	-9.331528(-2)	-6.700692(-2)
1.0	-7.694444(-2)	-8.305514(-2)	-5.518213(-2)	-7.996462(-2)	-5.148128(-2)	-8.636249(-2)	-6.050754(-2)
2.0	-3.425086(-2)	-3.787779(-2)	-1.893158(-2)	-3.408701(-2)	-1.566795(-2)	-4.403219(-2)	-2.511308(-2)
5.0	-4.665052(-3)	-5.415992(-3)	-1.311640(-3)	-3.657468(-3)	-6.547064(-4)	-9.799060(-3)	-3.690587(-3)
7.0	-1.447617(-3)	-1.724996(-3)	-2.744830(-4)	-9.178717(-4)	-9.066886(-5)	-4.429411(-3)	-1.360535(-3)

Tabela 5.5 – Evaporação Forte:  $\Delta T(\tau)$  com  $u = 0.4$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	5.192263(-2)	4.530791(-2)	4.530791(-2)	4.685809(-2)	4.685809(-2)	4.163467(-2)	4.163467(-2)
0.1	4.539144(-2)	3.853673(-2)	3.607458(-2)	4.082801(-2)	3.851886(-2)	3.434854(-2)	3.181308(-2)
0.2	4.052959(-2)	3.391383(-2)	3.023332(-2)	3.645986(-2)	3.288407(-2)	2.961889(-2)	2.594620(-2)
0.3	3.653000(-2)	3.023332(-2)	2.581484(-2)	3.288407(-2)	2.847372(-2)	2.594620(-2)	2.164846(-2)
0.4	3.312779(-2)	2.717002(-2)	2.229420(-2)	2.984047(-2)	2.486218(-2)	2.295320(-2)	1.831755(-2)
0.5	3.017808(-2)	2.455763(-2)	1.940804(-2)	2.719429(-2)	2.183285(-2)	2.044907(-2)	1.565434(-2)
0.6	2.758804(-2)	2.229420(-2)	1.699788(-2)	2.486218(-2)	1.925323(-2)	1.831755(-2)	1.348071(-2)
0.7	2.529275(-2)	2.031078(-2)	1.495850(-2)	2.278724(-2)	1.703357(-2)	1.648051(-2)	1.167994(-2)
0.8	2.324425(-2)	1.855777(-2)	1.321561(-2)	2.092809(-2)	1.510906(-2)	1.488210(-2)	1.017077(-2)
0.9	2.140569(-2)	1.699788(-2)	1.171435(-2)	1.925323(-2)	1.343072(-2)	1.348071(-2)	8.894260(-3)
1.0	1.974791(-2)	1.560217(-2)	1.041297(-2)	1.773785(-2)	1.196031(-2)	1.224434(-2)	7.806243(-3)
2.0	9.422742(-3)	7.146653(-3)	3.541791(-3)	8.208175(-3)	3.985964(-3)	5.158060(-3)	2.393566(-3)
5.0	1.419800(-3)	9.717050(-4)	2.119116(-4)	1.003535(-3)	1.905379(-4)	5.526823(-4)	4.628457(-5)
7.0	4.553391(-4)	2.862264(-4)	3.454414(-5)	2.646662(-4)	2.716062(-5)	9.322312(-5)	-5.024933(-5)

Tabela 5.6 – Evaporação Forte:  $Q_x(\tau)$  com  $u = 0.4$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	7.470552(-2)	8.151671(-2)	8.151671(-2)	8.475535(-2)	8.475535(-2)	7.372695(-2)	7.372695(-2)
0.1	5.668866(-2)	6.406173(-2)	5.905167(-2)	6.403869(-2)	5.844614(-2)	6.142299(-2)	5.751841(-2)
0.2	4.760790(-2)	5.488391(-2)	4.813857(-2)	5.386575(-2)	4.657025(-2)	5.418128(-2)	4.862640(-2)
0.3	4.109959(-2)	4.813857(-2)	4.046536(-2)	4.657025(-2)	3.842609(-2)	4.862640(-2)	4.209498(-2)
0.4	3.603047(-2)	4.277839(-2)	3.459361(-2)	4.086472(-2)	3.229763(-2)	4.408677(-2)	3.695051(-2)
0.5	3.191090(-2)	3.834719(-2)	2.990461(-2)	3.620500(-2)	2.746957(-2)	4.025380(-2)	3.274892(-2)
0.6	2.847349(-2)	3.459361(-2)	2.606059(-2)	3.229763(-2)	2.355928(-2)	3.695051(-2)	2.923768(-2)
0.7	2.555265(-2)	3.136054(-2)	2.285221(-2)	2.896213(-2)	2.033291(-2)	3.406273(-2)	2.625551(-2)
0.8	2.303735(-2)	2.854159(-2)	2.013892(-2)	2.607786(-2)	1.763504(-2)	3.151112(-2)	2.369168(-2)
0.9	2.084885(-2)	2.606059(-2)	1.782107(-2)	2.355928(-2)	1.535629(-2)	2.923768(-2)	2.146621(-2)
1.0	1.892902(-2)	2.386075(-2)	1.582506(-2)	2.134313(-2)	1.341632(-2)	2.719839(-2)	1.951927(-2)
2.0	8.046698(-3)	1.086312(-2)	5.447557(-3)	8.709902(-3)	3.875604(-3)	1.451804(-2)	8.609094(-3)
5.0	1.014140(-3)	1.583374(-3)	3.975092(-4)	8.608660(-4)	1.475598(-4)	3.588014(-3)	1.448464(-3)
7.0	3.058434(-4)	5.182625(-4)	8.906672(-5)	2.083489(-4)	1.997117(-5)	1.715830(-3)	5.743639(-4)

Tabela 5.7 – Evaporação Forte:  $\Delta N(\tau)$  com  $u = 0.7$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	6.480378(-1)	6.576507(-1)	6.576507(-1)	6.637499(-1)	6.637499(-1)	6.403207(-1)	6.403207(-1)
0.1	5.890796(-1)	6.037912(-1)	5.850939(-1)	6.045101(-1)	5.852153(-1)	5.953409(-1)	5.781959(-1)
0.2	5.507261(-1)	5.683843(-1)	5.388684(-1)	5.682188(-1)	5.385754(-1)	5.625211(-1)	5.342383(-1)
0.3	5.190047(-1)	5.388684(-1)	5.009393(-1)	5.385754(-1)	5.008992(-1)	5.342383(-1)	4.971388(-1)
0.4	4.913093(-1)	5.129196(-1)	4.680562(-1)	5.127666(-1)	4.684079(-1)	5.089263(-1)	4.645588(-1)
0.5	4.664791(-1)	4.895079(-1)	4.387840(-1)	4.895939(-1)	4.395151(-1)	4.858454(-1)	4.353801(-1)
0.6	4.438615(-1)	4.680562(-1)	4.123173(-1)	4.684079(-1)	4.133658(-1)	4.645588(-1)	4.089339(-1)
0.7	4.230402(-1)	4.481977(-1)	3.881413(-1)	4.488079(-1)	3.894317(-1)	4.447755(-1)	3.847688(-1)
0.8	4.037272(-1)	4.296797(-1)	3.658979(-1)	4.305246(-1)	3.673555(-1)	4.262867(-1)	3.625573(-1)
0.9	3.857119(-1)	4.123173(-1)	3.453234(-1)	4.133658(-1)	3.468797(-1)	4.089339(-1)	3.420487(-1)
1.0	3.688332(-1)	3.959699(-1)	3.262143(-1)	3.971882(-1)	3.278095(-1)	3.925925(-1)	3.230443(-1)
2.0	2.429475(-1)	2.712298(-1)	1.903663(-1)	2.726327(-1)	1.906858(-1)	2.686681(-1)	1.897133(-1)
5.0	7.822184(-2)	9.665393(-2)	4.253290(-2)	9.501741(-2)	4.027203(-2)	9.956968(-2)	4.721510(-2)
7.0	3.803647(-2)	5.004725(-2)	1.619034(-2)	4.778849(-2)	1.446864(-2)	5.458998(-2)	2.045121(-2)

Tabela 5.8 – Evaporação Forte:  $\Delta U(\tau)$  com  $u = 0.7$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	-6.480378(-1)	-6.576507(-1)	-6.576507(-1)	-6.637499(-1)	-6.637499(-1)	-6.403207(-1)	-6.403207(-1)
0.1	-5.890796(-1)	-6.037912(-1)	-5.850939(-1)	-6.045101(-1)	-5.852153(-1)	-5.953409(-1)	-5.781959(-1)
0.2	-5.507261(-1)	-5.683843(-1)	-5.388684(-1)	-5.682188(-1)	-5.385754(-1)	-5.625211(-1)	-5.342383(-1)
0.3	-5.190047(-1)	-5.388684(-1)	-5.009393(-1)	-5.385754(-1)	-5.008992(-1)	-5.342383(-1)	-4.971388(-1)
0.4	-4.913093(-1)	-5.129196(-1)	-4.680562(-1)	-5.127666(-1)	-4.684079(-1)	-5.089263(-1)	-4.645588(-1)
0.5	-4.664791(-1)	-4.895079(-1)	-4.387840(-1)	-4.895939(-1)	-4.395151(-1)	-4.858454(-1)	-4.353801(-1)
0.6	-4.438615(-1)	-4.680562(-1)	-4.123173(-1)	-4.684079(-1)	-4.133658(-1)	-4.645588(-1)	-4.089339(-1)
0.7	-4.230402(-1)	-4.481977(-1)	-3.881413(-1)	-4.488079(-1)	-3.894317(-1)	-4.447755(-1)	-3.847688(-1)
0.8	-4.037272(-1)	-4.296797(-1)	-3.658979(-1)	-4.305246(-1)	-3.673555(-1)	-4.262867(-1)	-3.625573(-1)
0.9	-3.857119(-1)	-4.123173(-1)	-3.453234(-1)	-4.133658(-1)	-3.468797(-1)	-4.089339(-1)	-3.420487(-1)
1.0	-3.688332(-1)	-3.959699(-1)	-3.262143(-1)	-3.971882(-1)	-3.278095(-1)	-3.925925(-1)	-3.230443(-1)
2.0	-2.429475(-1)	-2.712298(-1)	-1.903663(-1)	-2.726327(-1)	-1.906858(-1)	-2.686681(-1)	-1.897133(-1)
5.0	-7.822184(-2)	-9.665393(-2)	-4.253290(-2)	-9.501741(-2)	-4.027203(-2)	-9.956968(-2)	-4.721510(-2)
7.0	-3.803647(-2)	-5.004725(-2)	-1.619034(-2)	-4.778849(-2)	-1.446864(-2)	-5.458998(-2)	-2.045121(-2)

Tabela 5.9 – Evaporação Forte:  $\Delta T(\tau)$  com  $u = 0.7$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	2.743201(-1)	2.666060(-1)	2.666060(-1)	2.680831(-1)	2.680831(-1)	2.617110(-1)	2.617110(-1)
0.1	2.542379(-1)	2.454150(-1)	2.376395(-1)	2.454595(-1)	2.375523(-1)	2.427814(-1)	2.353812(-1)
0.2	2.395896(-1)	2.306225(-1)	2.181383(-1)	2.304966(-1)	2.180664(-1)	2.285959(-1)	2.163442(-1)
0.3	2.269865(-1)	2.181383(-1)	2.020280(-1)	2.180664(-1)	2.021570(-1)	2.163442(-1)	2.003108(-1)
0.4	2.157186(-1)	2.071191(-1)	1.880654(-1)	2.071747(-1)	1.884161(-1)	2.053974(-1)	1.863003(-1)
0.5	2.054496(-1)	1.971711(-1)	1.756706(-1)	1.973751(-1)	1.762186(-1)	1.954457(-1)	1.738233(-1)
0.6	1.959814(-1)	1.880654(-1)	1.645063(-1)	1.884161(-1)	1.652140(-1)	1.863003(-1)	1.625793(-1)
0.7	1.871825(-1)	1.796519(-1)	1.543507(-1)	1.801380(-1)	1.551795(-1)	1.778329(-1)	1.523625(-1)
0.8	1.789591(-1)	1.718251(-1)	1.450472(-1)	1.724307(-1)	1.459610(-1)	1.699499(-1)	1.430220(-1)
0.9	1.712403(-1)	1.645063(-1)	1.364784(-1)	1.652140(-1)	1.374456(-1)	1.625793(-1)	1.344419(-1)
1.0	1.639707(-1)	1.576345(-1)	1.285533(-1)	1.584271(-1)	1.295466(-1)	1.556641(-1)	1.265300(-1)
2.0	1.088688(-1)	1.059397(-1)	7.324026(-2)	1.068772(-1)	7.375916(-2)	1.041065(-1)	7.215450(-2)
5.0	3.525918(-2)	3.630980(-2)	1.560675(-2)	3.603586(-2)	1.501632(-2)	3.670972(-2)	1.682587(-2)
7.0	1.714595(-2)	1.844392(-2)	5.802108(-3)	1.787099(-2)	5.320091(-3)	1.958261(-2)	7.009265(-3)

Tabela 5.10 – Evaporação Forte:  $Q_x(\tau)$  com  $u = 0.7$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	1.655903(-1)	1.804191(-1)	1.804191(-1)	1.831376(-1)	1.831376(-1)	1.734278(-1)	1.734278(-1)
0.1	1.454059(-1)	1.649681(-1)	1.600441(-1)	1.654245(-1)	1.602207(-1)	1.618180(-1)	1.575869(-1)
0.2	1.339392(-1)	1.557153(-1)	1.481625(-1)	1.557317(-1)	1.480329(-1)	1.537390(-1)	1.468054(-1)
0.3	1.249674(-1)	1.481625(-1)	1.385281(-1)	1.480329(-1)	1.383645(-1)	1.468054(-1)	1.376707(-1)
0.4	1.174119(-1)	1.415686(-1)	1.301706(-1)	1.414031(-1)	1.300486(-1)	1.405810(-1)	1.295758(-1)
0.5	1.108133(-1)	1.356258(-1)	1.226945(-1)	1.354718(-1)	1.226310(-1)	1.348738(-1)	1.222516(-1)
0.6	1.049226(-1)	1.301706(-1)	1.158905(-1)	1.300486(-1)	1.158813(-1)	1.295758(-1)	1.155454(-1)
0.7	9.958648(-2)	1.251038(-1)	1.096305(-1)	1.250206(-1)	1.096636(-1)	1.246182(-1)	1.093575(-1)
0.8	9.470202(-2)	1.203593(-1)	1.038289(-1)	1.203149(-1)	1.038897(-1)	1.199532(-1)	1.036169(-1)
0.9	9.019601(-2)	1.158905(-1)	9.842401(-2)	1.158813(-1)	9.849790(-2)	1.155454(-1)	9.827006(-2)
1.0	8.601401(-2)	1.116626(-1)	9.336904(-2)	1.116832(-1)	9.344271(-2)	1.113674(-1)	9.327450(-2)
2.0	5.575097(-2)	7.862417(-2)	5.635417(-2)	7.862177(-2)	5.603297(-2)	7.875578(-2)	5.703714(-2)
5.0	1.773314(-2)	2.953246(-2)	1.338593(-2)	2.867453(-2)	1.242329(-2)	3.115357(-2)	1.538340(-2)
7.0	8.622280(-3)	1.566695(-2)	5.241024(-3)	1.468740(-2)	4.541958(-3)	1.765124(-2)	6.956119(-3)

Tabela 5.11 – Evaporação Forte:  $\Delta N(\tau)$  com  $u = 0.9$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	9.778867(-1)	9.785677(-1)	9.785677(-1)	9.785192(-1)	9.785192(-1)	9.786145(-1)	9.786145(-1)
0.1	9.726300(-1)	9.739671(-1)	9.722324(-1)	9.732383(-1)	9.713914(-1)	9.750203(-1)	9.734984(-1)
0.2	9.687854(-1)	9.706235(-1)	9.676391(-1)	9.697108(-1)	9.666505(-1)	9.720435(-1)	9.692641(-1)
0.3	9.653484(-1)	9.676391(-1)	9.635147(-1)	9.666505(-1)	9.624982(-1)	9.692641(-1)	9.653030(-1)
0.4	9.621393(-1)	9.648547(-1)	9.596446(-1)	9.638401(-1)	9.586488(-1)	9.666020(-1)	9.615028(-1)
0.5	9.590810(-1)	9.622022(-1)	9.559389(-1)	9.611889(-1)	9.549872(-1)	9.640215(-1)	9.578143(-1)
0.6	9.561316(-1)	9.596446(-1)	9.523502(-1)	9.586488(-1)	9.514537(-1)	9.615028(-1)	9.542102(-1)
0.7	9.532656(-1)	9.571593(-1)	9.488500(-1)	9.561912(-1)	9.480138(-1)	9.590333(-1)	9.506737(-1)
0.8	9.504658(-1)	9.547313(-1)	9.454195(-1)	9.537972(-1)	9.446452(-1)	9.566045(-1)	9.471933(-1)
0.9	9.477203(-1)	9.523502(-1)	9.420459(-1)	9.514537(-1)	9.413330(-1)	9.542102(-1)	9.437606(-1)
1.0	9.450202(-1)	9.500082(-1)	9.387198(-1)	9.491516(-1)	9.380668(-1)	9.518458(-1)	9.403696(-1)
2.0	9.195606(-1)	9.278990(-1)	9.070951(-1)	9.274270(-1)	9.068925(-1)	9.293140(-1)	9.080547(-1)
5.0	8.504929(-1)	8.675746(-1)	8.209701(-1)	8.676492(-1)	8.211629(-1)	8.678601(-1)	8.207836(-1)
7.0	8.079058(-1)	8.300717(-1)	7.684775(-1)	8.302514(-1)	7.686990(-1)	8.299555(-1)	7.680311(-1)

Tabela 5.12 – Evaporação Forte:  $\Delta U(\tau)$  com  $u = 0.9$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	-9.778867(-1)	-9.785677(-1)	-9.785677(-1)	-9.785192(-1)	-9.785192(-1)	-9.786145(-1)	-9.786145(-1)
0.1	-9.726300(-1)	-9.739671(-1)	-9.722324(-1)	-9.732383(-1)	-9.713914(-1)	-9.750203(-1)	-9.734984(-1)
0.2	-9.687854(-1)	-9.706235(-1)	-9.676391(-1)	-9.697108(-1)	-9.666505(-1)	-9.720435(-1)	-9.692641(-1)
0.3	-9.653484(-1)	-9.676391(-1)	-9.635147(-1)	-9.666505(-1)	-9.624982(-1)	-9.692641(-1)	-9.653030(-1)
0.4	-9.621393(-1)	-9.648547(-1)	-9.596446(-1)	-9.638401(-1)	-9.586488(-1)	-9.666020(-1)	-9.615028(-1)
0.5	-9.590810(-1)	-9.622022(-1)	-9.559389(-1)	-9.611889(-1)	-9.549872(-1)	-9.640215(-1)	-9.578143(-1)
0.6	-9.561316(-1)	-9.596446(-1)	-9.523502(-1)	-9.586488(-1)	-9.514537(-1)	-9.615028(-1)	-9.542102(-1)
0.7	-9.532656(-1)	-9.571593(-1)	-9.488500(-1)	-9.561912(-1)	-9.480138(-1)	-9.590333(-1)	-9.506737(-1)
0.8	-9.504658(-1)	-9.547313(-1)	-9.454195(-1)	-9.537972(-1)	-9.446452(-1)	-9.566045(-1)	-9.471933(-1)
0.9	-9.477203(-1)	-9.523502(-1)	-9.420459(-1)	-9.514537(-1)	-9.413330(-1)	-9.542102(-1)	-9.437606(-1)
1.0	-9.450202(-1)	-9.500082(-1)	-9.387198(-1)	-9.491516(-1)	-9.380668(-1)	-9.518458(-1)	-9.403696(-1)
2.0	-9.195606(-1)	-9.278990(-1)	-9.070951(-1)	-9.274270(-1)	-9.068925(-1)	-9.293140(-1)	-9.080547(-1)
5.0	-8.504929(-1)	-8.675746(-1)	-8.209701(-1)	-8.676492(-1)	-8.211629(-1)	-8.678601(-1)	-8.207836(-1)
7.0	-8.079058(-1)	-8.300717(-1)	-7.684775(-1)	-8.302514(-1)	-7.686990(-1)	-8.299555(-1)	-7.680311(-1)



Tabela 5.13 – Evaporação Forte:  $\Delta T(\tau)$  com  $u = 0.9$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	6.354345(-1)	6.348516(-1)	6.348516(-1)	6.349474(-1)	6.349474(-1)	6.346144(-1)	6.346144(-1)
0.1	6.325047(-1)	6.318651(-1)	6.306955(-1)	6.315715(-1)	6.303280(-1)	6.322134(-1)	6.311829(-1)
0.2	6.302020(-1)	6.296037(-1)	6.275703(-1)	6.291858(-1)	6.270917(-1)	6.301967(-1)	6.283134(-1)
0.3	6.280924(-1)	6.275703(-1)	6.247558(-1)	6.270917(-1)	6.242393(-1)	6.283134(-1)	6.256354(-1)
0.4	6.260946(-1)	6.256701(-1)	6.221189(-1)	6.251615(-1)	6.215964(-1)	6.265127(-1)	6.230749(-1)
0.5	6.241725(-1)	6.238608(-1)	6.196014(-1)	6.233398(-1)	6.190890(-1)	6.247710(-1)	6.205980(-1)
0.6	6.223065(-1)	6.221189(-1)	6.171713(-1)	6.215964(-1)	6.166777(-1)	6.230749(-1)	6.181854(-1)
0.7	6.204842(-1)	6.204296(-1)	6.148088(-1)	6.199126(-1)	6.143388(-1)	6.214158(-1)	6.158246(-1)
0.8	6.186970(-1)	6.187828(-1)	6.125005(-1)	6.182759(-1)	6.120565(-1)	6.197874(-1)	6.135070(-1)
0.9	6.169391(-1)	6.171713(-1)	6.102371(-1)	6.166777(-1)	6.098201(-1)	6.181854(-1)	6.112264(-1)
1.0	6.152061(-1)	6.155897(-1)	6.080115(-1)	6.151115(-1)	6.076218(-1)	6.166063(-1)	6.089780(-1)
2.0	5.987491(-1)	6.008068(-1)	5.870731(-1)	6.005039(-1)	5.869101(-1)	6.016740(-1)	5.877120(-1)
5.0	5.538197(-1)	5.612320(-1)	5.309531(-1)	5.612340(-1)	5.310445(-1)	5.614842(-1)	5.309017(-1)
7.0	5.260856(-1)	5.368572(-1)	4.969475(-1)	5.369369(-1)	4.970741(-1)	5.368533(-1)	4.967095(-1)

Tabela 5.14 – Evaporação Forte:  $Q_x(\tau)$  com  $u = 0.9$  e  $u_w = 0.0$ 

$\tau$	BGK	S		GJ		MRS	
		$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$	$\varepsilon = \varepsilon_p$	$\varepsilon = \varepsilon_t$
0.0	2.226139(-2)	2.366119(-2)	2.366119(-2)	2.348827(-2)	2.348827(-2)	2.402355(-2)	2.402355(-2)
0.1	2.148563(-2)	2.355240(-2)	2.357023(-2)	2.329287(-2)	2.330942(-2)	2.403016(-2)	2.405164(-2)
0.2	2.113416(-2)	2.359603(-2)	2.365523(-2)	2.333883(-2)	2.341166(-2)	2.407356(-2)	2.411455(-2)
0.3	2.088877(-2)	2.365523(-2)	2.374290(-2)	2.341166(-2)	2.352527(-2)	2.411455(-2)	2.416484(-2)
0.4	2.069768(-2)	2.371464(-2)	2.381955(-2)	2.348807(-2)	2.362885(-2)	2.414966(-2)	2.420133(-2)
0.5	2.053990(-2)	2.376987(-2)	2.388305(-2)	2.356125(-2)	2.371830(-2)	2.417848(-2)	2.422546(-2)
0.6	2.040460(-2)	2.381955(-2)	2.393386(-2)	2.362885(-2)	2.379339(-2)	2.420133(-2)	2.423890(-2)
0.7	2.028542(-2)	2.386334(-2)	2.397304(-2)	2.369010(-2)	2.385501(-2)	2.421868(-2)	2.424314(-2)
0.8	2.017828(-2)	2.390135(-2)	2.400179(-2)	2.374489(-2)	2.390433(-2)	2.423105(-2)	2.423944(-2)
0.9	2.008045(-2)	2.393386(-2)	2.402121(-2)	2.379339(-2)	2.394251(-2)	2.423890(-2)	2.422887(-2)
1.0	1.998999(-2)	2.396120(-2)	2.403231(-2)	2.383590(-2)	2.397066(-2)	2.424266(-2)	2.421232(-2)
2.0	1.929327(-2)	2.401984(-2)	2.383686(-2)	2.400404(-2)	2.387455(-2)	2.412264(-2)	2.383798(-2)
5.0	1.778703(-2)	2.315396(-2)	2.208638(-2)	2.321838(-2)	2.213654(-2)	2.307038(-2)	2.198788(-2)
7.0	1.689966(-2)	2.230727(-2)	2.075061(-2)	2.236138(-2)	2.077906(-2)	2.220804(-2)	2.067008(-2)

## 6 CONCLUSÕES

Neste trabalho o método analítico de ordenadas discretas (ADO) foi utilizado para construir soluções unificadas para problemas de evaporação fraca e forte da dinâmica de gases rarefeitos. Além disso, este método também foi usado para resolver um problema com um modelo não linear de colisão.

Em relação aos problemas de evaporação fraca, para o caso de uma espécie (capítulo 2) foi construída uma solução unificada usando os modelos cinéticos BGK, S, Gross-Jackson e MRS da equação linearizada de Boltzmann (ELB). Estes modelos cinéticos parecem ser boas alternativas para aproximar o núcleo de colisão da ELB, pois simplificam o desenvolvimento da solução, diminuem consideravelmente o esforço computacional empregado e produzem resultados numéricos que apresentam, em geral, um a dois dígitos significativos de concordância com resultados obtidos a partir da utilização da ELB propriamente dita. Continuando, os resultados dos modelos S, Gross-Jackson e MRS referentes aos problemas resolvidos ainda não se encontravam na literatura e, portanto, disponibilizaram-se novos resultados para serem comparados com outras equações modelo e outros métodos de resolução. Além disso, a solução construída neste capítulo é semelhante à desenvolvida nas Refs. [Scherer et al., 2009a] e [Scherer et al., 2009b] para outros problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos. Essa é uma boa qualidade do método ADO pois, apesar de sua característica analítica, ele permite que uma classe de problemas seja resolvida usando um procedimento análogo.

Ainda em relação aos problemas de evaporação fraca, para o caso de misturas binárias (capítulo 3) foi utilizado o modelo McCormack para formular os problemas. Novamente foram apresentados resultados que não estavam na literatura, além de se obter uma solução em ordenadas discretas semelhante ao caso de uma espécie e com uma formulação matricial simplificada para o problema de autovalor, se comparada à apresentada nas Refs. [Garcia e Siewert, 2004], [Siewert, 2005] e [Knackfuss e Barichello, 2006] onde o modelo McCormack foi utilizado na formulação de outros problemas.

Continuando, o problema de evaporação forte foi também abordado com o método ADO (capítulo 4). Devido a alta velocidade de escoamento do gás, este problema é originalmente não linear e, por isso, utilizou-se a versão não linear do modelo BGK para formulá-lo. Para resolvê-lo, o problema original foi linearizado em torno das condições de equilíbrio, onde considera-se que a velocidade do gás não é nula, e o problema linearizado foi então resolvido com o método ADO. O

método novamente se mostrou eficiente no sentido de se obter uma solução em forma fechada, o que permitiu fazer pós-processamentos na equação original e recalculas as quantidades de interesse físico. Os resultados numéricos obtidos se aproximam dos resultados encontrados por Ytrehus [Ytrehus, 1976], os quais apresentam boa concordância com trabalhos experimentais. Assim, devido ao seu caráter analítico, pode-se concluir que o método ADO foi adequado para resolver um problema não linear de evaporação. No desenvolvimento da solução ressalta-se uma formulação diferenciada, pois obteve-se um problema de autovalor quadrático, o que não havia acontecido em nenhum outro trabalho onde foi usado o método ADO.

Ainda com relação ao problema de evaporação forte, no capítulo 5 foi construída uma solução unificada com os modelos BGK, S, Gross-Jackson e MRS para a versão linearizada do problema. Dessa forma encontrou-se os resultados dos modelos S, Gross-Jackson e MRS, os quais não estavam disponíveis na literatura.

De maneira geral, em todos os casos o método ADO se mostrou eficiente, exato, fácil de implementar e rápido de se executar em um PC. As facilidades se restringem a implementação de passos padrões como a resolução de problemas de autovalor e sistemas lineares. Apresentou também ótima convergência, pois obteve-se precisão de 7 dígitos para os casos lineares e 5 dígitos para o caso não linear. Os modelos cinéticos BGK, S, Gross-Jackson e MRS mostraram-se adequados para formular os problemas, para o caso de uma espécie, havendo em geral concordância de um a dois dígitos significativos entre seus resultados.

Portanto, acredita-se que os objetivos deste trabalho foram alcançados pois:

- desenvolveu-se uma formulação matemática e computacional comum para os problemas de evaporação utilizando o método ADO e modelos cinéticos;
- resolveu-se um problema não linear de evaporação fazendo pós-processamentos com a solução do método ADO;
- encontraram-se resultados numéricos que ainda não estavam disponíveis na literatura;
- a solução em ordenadas discretas mostrou-se eficiente, fácil de ser implementada e exata, obtendo-se ótima convergência.

Como futuros trabalhos pretende-se resolver os problemas de evaporação usando modelos cinéticos com frequência de colisão variável, como o CES, e a própria ELB. Também pretende-se resolver o problema de evaporação forte com o modelo McCormack.

## 7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aleksandrov, V. Y.; Erofeev, A. I.; Kogan, M. N.; Friedlander, O. G. Condensation Interaction Between Aerosol Particles, **Fluid Dynamics**, v. 43, p. 132–146, 2008.

Anderson, J. D. An Engineering Survey of Radiating Shock Layers, **AIAA Journal**, v. 7, p. 1665–1675, 1969.

Aoki, K.; Cercignani, C. Evaporation and Condensation on Two Parallel Plates at Finite Reynolds Numbers, **Physics of Fluids**, v. 26, p. 1163–1164, 1983.

Aoki, K.; Masukawa, N. Gas Flows Caused By Evaporation and Condensation on two Parallel Condensed Phases and the Negative Temperature Gradient: Numerical Analysis by Using a Nonlinear Kinetic Equation, **Physics of Fluids**, v. 6, p. 1379–1395, 1994.

Aoki, K.; Nishino, K.; Sone, Y.; Sugimoto, H. Numerical Analysis of Steady Flows of a Gas Condensing on or Evaporating From its Plane Condensed Phase on the Basis of Kinetic Theory: Effect of Gas Motion Along the Condensed Phase, **Physics of Fluids**, v. 3, p. 2260–2275, 1991.

Aoki, K.; Sone, Y.; Yamada, T. Numerical Analysis of Gas Flows Condensing on its Plane Condensed Phase on the Basis of Kinetic Theory, **Physics of Fluids A**, v. 2, p. 1867–1878, 1990.

Aoki, K.; Takata, S.; Aikawa, H.; Golse, F. A Rarefied Gas Flow Caused by a Discontinuous Wall Temperature, **Physics of Fluids**, v. 13, p. 2645–2661, 2001.

Aoki, K.; Takata, S.; Kosuge, S. Vapor Flows Caused by Evaporation and Condensation on two Parallel Plane Surfaces: Effect of the Presence of a Noncondensable Gas, **Physics of Fluids**, v. 10, p. 1519–1533, 1998.

Arthur, M. D.; Cercignani, C. Non-Existence of a Steady Rarefied Supersonic Flow in a Half-Space, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 31, p. 634–645, 1980.

Atkins, K. R.; Rosenbaun, B.; Seiki, H. Evaporation Effects During Superflow of Liquid Helium II, **The Physical Review**, v. 113, p. 751–754, 1959.

Barichello, L. B.; Bartz, A. C. R.; Camargo, M.; Siewert, C. E. The Temperature-Jump Problem for a Variable Collision Frequency Model, **Physics of Fluids**, v. 14, p. 382–391, 2002.

Barichello, L. B.; Camargo, M.; Rodrigues, P.; Siewert, C. E. Unified Solutions to Classical Flow Problems Based on the BGK Model, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 52, p. 517–534, 2001.

Barichello, L. B.; Siewert, C. E. A Discrete-Ordinates Solution for a Poiseuille Flow in a Plane Channel, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 50, p. 972–981, 1999a.

Barichello, L. B.; Siewert, C. E. A Discrete-Ordinates Solution for Non-Grey Model with Complete Frequency Redistribution, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 62, p. 665–675, 1999b.

Barichello, L. B.; Siewert, C. E. The Temperature-Jump Problem in Rarefied-Gas Dynamics, **European Journal of Applied Mathematics**, v. 11, p. 353–364, 2000.

Barichello, L. B.; Siewert, C. E. Some Comments on Modeling the Linearized Boltzmann Equation, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 77, p. 43–59, 2003.

Bassanini, P.; Cercignani, C.; Pagani, C. D. Comparison of Kinetic Theory Analysis of Linearized Heat Transfer Between Parallel Plates, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 10, p. 447–460, 1967.

Bassanini, P.; Cercignani, C.; Pagani, C. D. Influence of the Accommodation Coefficient on the Heat Transfer in a Rarefied Gas, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 11, p. 1359–1369, 1968.

Bhatnagar, P. L.; Gross, E. P.; Krook, M. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems, **Physical Review**, v. 94, p. 511–525, 1954.

Bird, G. A. **Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows**. Oxford University Press, Oxford, 1994.

Breyiannis, G.; Varoutis, S.; Valougeorgis, D. Rarefied Gas Flow in Concentric Annular Tube: Estimation of the Poiseuille Number and the Exact Hydraulic Diameter, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 27, p. 609–622, 2008.

Cabrera, L. C.; Barichello, L. B. Unified Solutions to Some Classical Problems in Rarefied Gas Dynamics Based on the S-Model Equations, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 57, p. 285–312, 2006.

Camargo, M.; Barichello, L. B. Unified Approach for Variable Collision Frequency Models in Rarefied Gas Dynamics, **Transport Theory and Statistical Physics**, v. 33, p. 227–260, 2004.

Case, K. M.; Zweifel, P. F. **Linear Transport Theory**. Addison-Wesley, Massachusetts, 1967.

Cassell, J. S.; Williams, M. M. R. An Exact Solution of the Temperature Slip Problem in Rarefied Gas, **Transport Theory and Statistical Physics**, v. 2, p. 81–90, 1972.

Cercignani, C. The Method of Elementary Solutions for Kinetic Models With Velocity-Dependent Collision Frequency, **Annals of Physics**, v. 40, p. 469–481, 1966.

Cercignani, C. **Mathematical Problems in the Kinetic Theory of Gases**. Verlag P. D. Lang, Frankfurt, 1980.

Cercignani, C. **The Boltzmann Equation and its Applications**. Springer Verlag, New York, 1988.

Cercignani, C.; Lampis, M. Kinetic Models for Gas-Surface Interaction, **Transport Theory and Statistical Physics**, v. 1, p. 101–114, 1971.

Cercignani, C.; Lampis, M. Variational Calculation of the Temperature Jump for a Binary Mixture, **Rarefied Gas Dynamics**, edited by A. E. Beylich, VCH, pages 1379–1384, 1991.

Chandrasekhar, S. **Radiative Transfer**. Dover, New York, 1960.

Chapman, S.; Cowling, T. G. **The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases**. Cambridge University Press, Cambridge, 1970.

Cipolla, J. W.; Lang, H.; Loyalka, S. K. Kinetic Theory of Condensation and Evaporation. II, **Journal of Chemical Physics**, v. 61, p. 69–77, 1974.

Datta, B. N. **Numerical Linear Algebra and Applications**. Brooks/Cole, Pacific Grove, 1995.

Dushman, S. **Scientific Foundations of Vacuum Technique**. John Wiley and Sons, London, 1949.

Fan, J.; Boyd, I. D.; Cai, C. P.; Hennighausen, K.; Candler, G. V. Computation of Rarefied Gas Flows Around a NACA 0012 Airfoil, **AIAA Journal**, v. 39, p. 618–625, 2001.

Ferziger, J. H.; Kaper, H. G. **Mathematical Theory of Transport Processes in Gases**. North-Holland, Amsterdam, 1972.

Frankowski, K.; Alterman, Z.; Pekeris, C. L. Heat Transport Between Parallel Plates in a Rarefied Gas of Rigid Sphere Molecules, **Physics of Fluids**, v. 8, p. 245–258, 1965.

Frezzotti, A. A Numerical Investigation of the Steady Evaporation of a Polyatomic Gas, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 26, p. 93–104, 2007.

Frezzotti, A.; Gibelli, L.; Lorenzani, S. Mean Field Kinetic Theory Description of Evaporation of a Fluid Into Vacuum, **Physics of Fluids**, v. 17, p. 012102(1)–012102(12), 2005.

Frezzotti, A.; Ytrehus, T. Kinetic Theory Study of Steady Condensation of a Polyatomic Gas, **Physics of Fluids**, v. 18, p. 027101(1)–027101(12), 2006.

Gad-El-Hak, M. **Handbook of MEMS**. CRC Press, Boca Raton, 2006.

Galambos, P.; James, C. D.; Lantz, J.; Givler, R. C.; McClain, J.; Simonson, R. J. Passive MEMS Valves With Preset Operating Pressures for Microgas Analyzer, **Journal of Microelectromechanical Systems**, v. 18, p. 14–27, 2009.

Garcia, R. D. M. **Métodos para Solução da Equação de Transporte de Partículas Íntegro-Diferencial**. Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras, Porto Alegre, 2002.

Garcia, R. D. M.; Siewert, C. E. The McCormack Model for Gas Mixtures: Heat Transfer in a Plane Channel, **Physics of Fluids**, v. 16, p. 3393–3402, 2004.

Garcia, R. D. M.; Siewert, C. E. The McCormack Model for Gas Mixtures: Plane Couette Flow, **Physics of Fluids**, v. 17, p. 037102(1)–037102(6), 2005.

Garcia, R. D. M.; Siewert, C. E. The Linearized Boltzmann Equation: Sound-Wave Propagation in a Rarefied Gas, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 57, p. 94–122, 2006.

Garcia, R. D. M.; Siewert, C. E. Channel Flow of a Binary Mixture of Rigid Spheres Described by the Linearized Boltzmann Equation and Driven by Temperature, Pressure, and Density Gradients, **SIAM Journal on Applied Mathematics**, v. 67, p. 1041–1063, 2007a.

Garcia, R. D. M.; Siewert, C. E. Heat Transfer Between Parallel Plates: An Approach Based on the Linearized Boltzmann Equation for a Binary Mixture of Rigid-Spheres Gases, **Physics of Fluids**, v. 19, p. 027102(1)–027102(7), 2007b.

Garcia, R. D. M.; Siewert, C. E. The Temperature-Jump Problem Based on the Linearized Boltzmann Equation for a Binary Mixture of Rigid Spheres, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 26, p. 132–153, 2007c.

Garcia, R. D. M.; Siewert, C. E. The Viscous-Slip, Diffusion-Slip, and Thermal-Creep Problems for a Binary Mixture of Rigid Spheres Described by the Linearized Boltzmann Equation, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 26, p. 749–778, 2007d.

Garcia, R. D. M.; Siewert, C. E. Couette Flow of a Binary Mixture of Rigid-Sphere Gases Described by the Linearized Boltzmann Equation, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 27, p. 823–836, 2008.

Garno, J. P. Simple High Vacuum Evaporation System With Low-Temperature Substrate, **Review of Scientific Instruments**, v. 49, p. 1218–1220, 1978.

Ghisi, A.; Kalicinski, S.; Mariani, S.; Wolf, I.; Corigliano, A. Polysilicon MEMS Accelerometers Exposed to Shocks: Numerical-Experimental Investigations, **Journal of Micromechanics and Microengineering**, v. 19, p. 035023(1)–035023(12), 2009.

Gross, E. P.; Jackson, E. A. Kinetic Models and the Linearized Boltzmann Equation, **Physics of Fluids**, v. 2, p. 432–441, 1959.

Gross, E. P.; Ziering, S. Heat Flow Between Parallel Plates, **Physics of Fluids**, v. 2, p. 701–712, 1959.



Hamel, B. B. Kinetic Model for Binary Gas Mixture, **Physics of Fluids**, v. 8, p. 418–425, 1965.

Hermans, L. J. F.; Beenakker, J. J. M. The Temperature Paradox in the Kinetic Theory of Evaporation, **Physics of Fluids**, v. 29, p. 4231–4232, 1986.

Kaito, C.; Fujita, T.; Kimura, T.; Hanamoto, K.; Suzuki, N.; Kimura, S.; Saito, Y. Structure and Crystallization of Sb-Se Films Prepared by Vacuum Evaporation Method, **Thin Solid Films**, v. 312, p. 93–98, 1998.

Karniadakis, G. E.; Beskok, A. **Micro Flows**. Springer-Verlag, New York, 2002.

Karniadakis, G. E.; Beskok, A.; Aluru, N. **Microflows and Nanoflows**. Springer-Verlag, New York, 2005.

Kasagi, N.; Suzuki, Y.; Fukagata, K. Microelectromechanical Systems - Based Feedback Control of Turbulence for Skin Friction Reduction, **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 41, p. 231–251, 2009.

Knackfuss, R. F.; Barichello, L. B. On the Temperature-Jump Problem in the Rarefied Gas Dynamics: the Effect of the Cercignani-Lampis Boundary Condition, **SIAM Journal on Applied Mathematics**, v. 66, p. 2149–2186, 2006.

Koffman, L. D.; Plesset, M. S.; Lees, L. Theory of Evaporation and Condensation, **Physics of Fluids**, v. 27, p. 876–880, 1984.

Kogan, M. N. Kinetic Theory in Aerothermodynamics, **Progress in Aerospace Sciences**, v. 29, p. 271–354, 1992.

Kuznetsova, I. A.; Yushkanov, A. A.; Yalamov, Y. I. Influence of the Evaporation Coefficient on the Strong Condensation of a Monoatomic Gas, **Technical Physics**, v. 42, p. 1133–1137, 1997.

Lee, C.; Hsieh, W.; Wu, G. Embedded Flexible Micro-Sensors in MEA for Measuring Temperature and Humidity in a Micro-Fuel Cell, **Journal of Power Sources**, v. 181, p. 237–243, 2008.

Liu, R.; Wang, H.; Li, X.; Tang, J.; Mao, S.; Ding, G. Analysis, Simulation and Fabrication of MEMS Springs for a Micro-Tensile System, **Journal of Micromechanics and Microengineering**, v. 19, p. 015027(1)–015027(10), 2008.

Loyalka, S. K. Temperature Jump and Thermal Creep Slip: Rigid Sphere Gas, **Physics of Fluids A**, v. 1, p. 403–408, 1989.

Loyalka, S. K.; Ferziger, J. H. Model Dependence of the Temperature Slip Coefficient, **Physics of Fluids**, v. 11, p. 1668–1671, 1968.

Loyalka, S. K.; Hickey, K. A. Plane Poiseuille Flow: Near Continuum Results for a Rigid Sphere Gas, **Physica A**, v. 160, p. 395–408, 1989.

Loyalka, S. K.; Hickey, K. A. The Kramers Problem: Velocity Slip and Defect for a Hard Sphere Gas With Arbitrary Accommodation, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 41, p. 245–253, 1990.

Loyalka, S. K.; Hickey, K. A. Kinetic Theory of Thermal Transpiration and the Mechanocaloric Effect: Planar Flow of a Rigid Sphere Gas With Arbitrary Accommodation at the Surface, **Journal of Vacuum Science and Technology A**, v. 9, p. 158–163, 1991.

Loyalka, S. K.; Siewert, C. E.; Thomas, J. R. Temperature-Jump Problem With Arbitrary Accommodation, **Physics of Fluids**, v. 21, p. 854–855, 1978.

Loyalka, S. K.; Siewert, C. E.; Thomas, J. R. An Approximate Solution Concerning Strong Evaporation into a Half Space, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 32, p. 745–747, 1981.

Loyalka, S. K.; Tompson, R. V. The Velocity Slip Problem: Accurate Solutions of the BGK Model Integral Equation, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 28, p. 211–213, 2009.

Luiten, O. J.; Reynolds, M. W.; Walraven, J. T. M. Kinetic Theory of the Evaporative Cooling of a Trapped Gas, **Physical Review A**, v. 53, p. 381–389, 1996.

Martinelli, M.; Viktorov, V. Modelling of Laminar Flow in the Inlet Section of Rectangular Microchannels, **Journal of Micromechanics and Microengineering**, v. 19, p. 025013(1)–025013(9), 2009.

McCormack, F. J. Construction of Linearized Kinetic Models for Gaseous Mixtures and Molecular Gases, **Physics of Fluids**, v. 16, p. 2095–2105, 1973.

Meland, R.; Frezzotti, A.; Ytrehus, T.; Hafskjold, B. Nonequilibrium Molecular-Dynamics Simulation of Net Evaporation and Net Condensation, and Evaluation of the Gas-Kinetic Boundary Condition at the Interphase, **Physics of Fluids**, v. 16, p. 223–243, 2004.

Mills, C. T.; Phillips, L. F. The Gas-Liquid Interface and the Paradox of Inverted Temperature Profiles in the Two-Surface Problem, **Chemical Physics Letters**, v. 372, p. 609–614, 2003.

Ohwada, T.; Sone, Y.; Aoki, K. Numerical Analysis of the Poiseuille and Thermal Transpiration Flows Between Two Parallel Plates on the Basis of the Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules, **Physics of Fluids A**, v. 1, p. 2042–2049, 1989.

Onishi, Y. Effects of Accommodation Coefficient on Temperature and Density Fields in a Slightly Rarefied Gas, **Japan Society for Aeronautical and Space Sciences**, v. 17, p. 151–159, 1974.

Onishi, Y. Kinetic Theory Analysis for Temperature and Density Fields of a Slightly Rarefied Binary Gas Mixture Over a Solid Wall, **Physics of Fluids**, v. 9, p. 226–238, 1997.

Orr, B. G.; Goldman, A. M. Ultrahigh-Vacuum Evaporation System With Low-Temperature Measurement Capability, **Review of Scientific Instruments**, v. 56, p. 1288–1290, 1985.

Østmo, S.; Frezzotti, A.; Ytrehus, T. Kinetic Theory Study of Steady Evaporation From a Spherical Condensed Phase Containing Inert Solid Particles, **Physics of Fluids**, v. 9, p. 211–225, 1997.

Pan, S.; Storvick, T. S. Kinetic Theory Calculations of Pressure Effects of Diffusion, **Journal of Chemical Physics**, v. 97, p. 2671–2681, 1992.

Pao, Y. Application of Kinetic Theory to the Problem of Evaporation and Condensation, **Physics of Fluids**, v. 14, p. 306–312, 1971a.

Pao, Y. Temperature and Density Jumps in the Kinetic Theory of Gases and Vapors, **Physics of Fluids**, v. 14, p. 1340–1346, 1971b.

Pekeris, C. L.; Alterman, Z. Solution of the Boltzmann-Hilbert Integral Equation II. The Coefficients of Viscosity and Heat Conduction, **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 43, p. 998–1007, 1957.

Peng, B.; Zhu, Y.; Petrov, I.; Espinosa, H. D. A Microelectromechanical System for Nano-Scale Testing of One Dimensional Nanostructures, **Sensors Letters**, v. 6, p. 1–12, 2008.

Popov, S.; Melling, A.; Durst, F.; Ward, C. A. Apparatus for Investigation of Evaporation at Free Liquid-Vapour Interfaces, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 48, p. 2299–2309, 2005.

Raju, R.; Roy, S. Hydrodynamic Study of High-Speed Flow and Heat Transfer Through a Microchannel, **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 19, p. 106–113, 2005.

Rinaldi, G.; Packirisamy, M.; Stiharu, I. Boundary Characterization of MEMS Structures Through Electro-Mechanical Testing, **Sensors and Actuators A**, v. 143, p. 415–422, 2008.

Roth, A. **Vacuum Technology**. North Holland, Amsterdam, 1990.

Savoulides, N.; Jacobson, S. A.; Li, H.; Ho, L.; Khanna, R.; Teo, C.; Protz, J. M.; Wang, L.; Ward, D.; Schmidt, M. A.; Epstein, A. H. Fabrication and Testing of a High-Speed Microscale Turbocharger, **Journal of Microelectromechanical Systems**, v. 17, p. 1270–1282, 2008.

Scherer, C. S., 2005. “**Modelos Cinéticos da Equação Linearizada de Boltzmann e um Problema de Transferência de Calor em Microescala**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Scherer, C. S.; Barichello, L. Um Problema de Transferência de Calor na Dinâmica de Gases Rarefeitos, **Proceedings of 11<sup>th</sup> Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering - Encit 2006**, 2006.

Scherer, C. S.; Barichello, L. B. An Analytical Approach to the Unified Solution of Kinetic Equations in Rarefied Gas Dynamics. III. Evaporation and Condensation Problem, **Submetido à publicação**, 2008.

Scherer, C. S.; Barichello, L. B. A Heat Transfer Problem in Rarefied Gas Dynamics, **Heat Transfer Engineering**, v. 30, p. 282–291, 2009.

Scherer, C. S.; Prolo, J. F.; Barichello, L. B. An Analytical Approach to the Unified Solution of Kinetic Equations in Rarefied Gas Dynamics. I. Flow Problems, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 60, p. 70–115, 2009a.

Scherer, C. S.; Prolo, J. F.; Barichello, L. B. An Analytical Approach to the Unified Solution of Kinetic Equations in the Rarefied Gas Dynamics. II. Heat Transfer Problems, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 60, p. 651–687, 2009b.

Schlichting, H. **Boundary-Layer Theory**. McGraw-Hill, New York, 1976.

Shakhov, E. M. Generalization of the Krook Kinetic Relaxation Equation, **Fluid Dynamics**, v. 3, p. 142–145, 1968.

Shakhov, E. M.; Titarev, V. A. Numerical Study of the Generalized Cylindrical Couette Flow of Rarefied Gas, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 28, p. 152–169, 2009.

Shankar, P. N.; Deshpande, M. D. On the Temperature Distribution in Liquid-Vapor Phase Change Between Plane Liquid Surfaces, **Physics of Fluids A**, v. 2, p. 1030–1038, 1990.

Sharipov, F. Application of the Cercignani-Lampis Scattering Kernel to Calculations of Rarefied Gas Flows. I. Plane Flow Between Two Parallel Plates, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 21, p. 113–123, 2002.

Sharipov, F. Application of the Cercignani-Lampis Scattering Kernel to Calculations of Rarefied Gas Flows. II. Slip and Jump Coefficients, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 22, p. 133–143, 2003.

Sharipov, F.; Bertoldo, G. **Dinâmica de Gases Rarefeitos e Suas Aplicações**. Escola de Inverno de Matemática Aplicada, Santa Maria, 2009.

Sharipov, F.; Kalempa, D. Velocity Slip and Temperature Jump Coefficients for Gaseous Mixtures. I. Viscous Slip Coefficient, **Physics of Fluids**, v. 15, p. 1800–1806, 2003.

Sharipov, F.; Kalempa, D. Oscillatory Couette flow at Arbitrary Oscillation Frequency Over the Whole Range of the Knudsen Number, **Microfluid Nanofluid**, v. 4, p. 363–374, 2008.

Sharipov, F.; Seleznev, V. Data on Internal Gas Flows, **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, v. 27, p. 657–706, 1998.

Sibold, D.; Urbassek, H. M. Kinetic Study of Evaporation Flows From Cylindrical Jets, **Physics of Fluids A**, v. 3, p. 870–878, 1991.

Siewert, C. E. A Discrete-Ordinates Solution for Heat Transfer in a Plane Channel, **Journal of Computational Physics**, v. 152, p. 251–263, 1999.

Siewert, C. E. Kramers Problem for a Variable Collision Frequency Model, **European Journal of Applied Mathematics**, v. 12, p. 179–191, 2001.

Siewert, C. E. Generalized Boundary Conditions for the S-Model Kinetic Equations Basic to Flow in a Plane Channel, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 72, p. 75–88, 2002a.

Siewert, C. E. Poiseuille, Thermal Creep and Couette Flow: Results Based on the CES Model of the Linearized Boltzmann Equation, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 21, p. 579–597, 2002b.

Siewert, C. E. Heat Transfer and Evaporation/Condensation Problems Based on the Linearized Boltzmann Equation, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 22, p. 391–408, 2003a.

Siewert, C. E. The Linearized Boltzmann Equation: a Concise and Accurate Solution of the Temperature-Jump Problem, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 77, p. 417–432, 2003b.

Siewert, C. E. The Linearized Boltzmann Equation: Concise and Accurate Solutions to Basic Flow Problems, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 54, p. 273–303, 2003c.

Siewert, C. E. The Temperature-Jump Problem Based on the CES Model of the Linearized Boltzmann Equation, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 55, p. 92–104, 2004.

Siewert, C. E. The McCormack Model for Gas Mixtures: the Temperature-Jump Problem, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, v. 56, p. 273–292, 2005.

Siewert, C. E.; Sharipov, F. Model Equations in Rarefield Gas Dynamics: Viscous-Slip and Thermal-Slip Coefficients, **Physics of Fluids**, v. 14, p. 4123–4129, 2002.

Siewert, C. E.; Thomas, J. R. Half-Space Problems in the Kinetic Theory of Gases, **Physics of Fluids**, v. 16, p. 1557–1559, 1973.

Siewert, C. E.; Thomas, J. R. Strong Evaporation into a Half Space, **Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Physik**, v. 32, p. 421–433, 1981.

Siewert, C. E.; Thomas, J. R. Strong Evaporation into a Half Space. II. The Three-Dimensional BGK Model, **Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Physik**, v. 33, p. 202–218, 1982.

Siewert, C. E.; Valougeorgis, D. Concise and Accurate Solutions to Half-Space Binary-Gas Flow Problems Defined by the McCormack Model and Specular-Difuse Wall Conditions, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 23, p. 709–726, 2004a.

Siewert, C. E.; Valougeorgis, D. The McCormack Model: Channel Flow of a Binary Gas Mixture Driven by Temperature, Pressure and Density Gradients, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 23, p. 645–664, 2004b.

Soga, T. A Kinetic Theory Analysis of Evaporation and Condensation of a Diatomic Gas, **Physics of Fluids**, v. 28, p. 1280–1285, 1985.

Sone, Y. Theoretical and Numerical Analyses of the Boltzmann Equation - Theory and Analysis of Rarefied Gas Flows- Part I, **Lecture Notes Department of Aeronautics and Astronautics, Graduate School of Engineering, Kyoto University**, 1998.

Sone, Y. **Kinetic Theory and Fluid Dynamics**. Birkhauser, Boston, 2002.

Sone, Y.; Ohwada, T.; Aoki, K. Evaporation and Condensation on a Plane Condensed Phase: Numerical Analysis of the Linearized Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules, **Physics of Fluids A**, v. 1, p. 1398–1405, 1989a.

Sone, Y.; Ohwada, T.; Aoki, K. Temperature Jump and Knudsen Layer in a Rarefied Gas Over a Plane Wall: Numerical Analysis of the Linearized Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules, **Physics of Fluids A**, v. 1, p. 363–370, 1989b.

Sone, Y.; Sugimoto, H. Kinetic Theory Analysis of Steady Evaporating Flows From a Spherical Condensed Phase Into a Vacuum, **Physics of Fluids A**, v. 5, p. 1491–1511, 1993.

Sone, Y.; Sugimoto, H. Evaporation of a Rarefied Gas From a Cylindrical Condensed Phase Into a Vacuum, **Physics of Fluids**, v. 7, p. 2072–2085, 1995.

Sone, Y.; Sugimoto, H.; Aoki, K. Cylindrical Couette Flows of a Rarefied Gas With Evaporation and Condensation: Reversal and Bifurcation of Flows, **Physics of Fluids**, v. 11, p. 476–490, 1999.

Sone, Y.; Takata, S.; Golse, F. Notes on the Boundary Conditions for Fluid-Dynamic Equations on the Interface of a Gas and its Condensed Phase, **Physics of Fluids**, v. 13, p. 324–334, 2001.

Sone, Y.; Takata, S.; Ohwada, T. Numerical Analysis of the Plane Couette Flow of a Rarefied Gas on the Basis of the Linearized Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 9, p. 273–288, 1990.

Sone, Y.; Takata, S.; Sugimoto, H. The Behavior of a Gas in the Continuum Limit in the Light of Kinetic Theory: The Case of Cylindrical Couette Flows With Evaporation and Condensation, **Physics of Fluids**, v. 8, p. 3403–3413, 1996.

Taguchi, S.; Aoki, K.; Takata, S. Vapor Flows Condensing at Incidence Onto a Plane Condensed Phase in the Presence of a Noncondensable Gas. I. Subsonic Condensation, **Physics of Fluids**, v. 15, p. 689–705, 2003.

Taguchi, S.; Aoki, K.; Takata, S. Vapor Flows in the Continuum Limit in the Presence of a Small Amount of Noncondensable Gas, **Physics of Fluids**, v. 16, p. 4105–4120, 2004.

Taheri, P.; Torrilhon, M.; Struchtrup, H. Couette and Poiseuille Microflows: Analytical Solutions for Regularized 13-Moment Equations, **Physics of Fluids**, v. 21, p. 017102(1)–017102(11), 2009.

Takata, S.; Aoki, K. Two-Surface Problems of a Multicomponent Mixture of Vapors and Noncondensable Gases in the Continuum Limit in the Light of Kinetic Theory, **Physics of Fluids**, v. 11, p. 2743–2756, 1999.

Takata, S.; Aoki, K.; Yasuda, S.; Kosuge, S. Temperature, Pressure and Concentration Jumps for a Binary Mixture of Vapors on a Plane Condensed Phase: Numerical Analysis of the Linearized Boltzmann Equation, **Physics of Fluids**, v. 18, p. 067102(1)–067102(13), 2006.

Takata, S.; Golse, F. Half-Space Problem of the Nonlinear Boltzmann Equation for Weak Evaporation and Condensation of a Binary Mixture of Vapors, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 26, p. 105–131, 2007.



Takata, S.; Sone, Y.; Lhuillier, D.; Wakabayashi, M. Evaporation From or Condensation Onto a Sphere: Numerical Analysis of the Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules, **Computational and Applied Mathematics**, v. 35, p. 193–214, 1998.

Thomas, J. R. The  $F_N$  Method in Kinetic Theory I. Half-Space Problems, **Transport Theory and Statistical Physics**, v. 14, p. 485–496, 1985.

Thomas, J. R.; Chang, T. S.; Siewert, C. E. Heat Transfer Between Parallel Plates With Arbitrary Surface Accommodation, **Physics of Fluids**, v. 16, p. 2116–2120, 1973.

Thomas, J. R.; Chang, T. S.; Siewert, C. E. Reverse Temperature Gradient in the Kinetic Theory of Evaporation, **Physical Review Letters**, v. 33, p. 680–682, 1974.

Valougeorgis, D.; Thomas, J. R. The  $F_N$  Method in Kinetic Theory: II. Heat Transfer Between Parallel Plates, **Transport Theory and Statistical Physics**, v. 14, p. 497–512, 1985.

Varoutis, S.; Naris, S.; Hauer, V.; Day, C.; Valougeorgis, D. Computational and Experimental Study of Gas Flows Through Long Channels of Various Cross Sections in the Whole Range of the Knudsen Number, **The Journal of Vacuum Science and Technology A**, v. 27, p. 89–100, 2009.

Varoutis, S.; Valougeorgis, D.; Sazhin, O.; Sharipov, F. Rarefied Gas Flow Through Short Tubes Into Vacuum, **The Journal of Vacuum Science and Technology A**, v. 26, p. 228–238, 2008a.

Varoutis, S.; Valougeorgis, D.; Sharipov, F. Application of the Integro-Moment Method to Steady-State Two-Dimensional Rarefied Gas Flows Subject to Boundary Induced Discontinuities, **Journal of Computational Physics**, v. 227, p. 6272–6287, 2008b.

Wakabayashi, M.; Ohwada, T.; Golse, F. Numerical Analysis of the Shear and Thermal Creep Flows of a Rarefied Gas Over the Plane Wall of a Maxwell-Type Boundary on the Basis of the Linearized Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 15, p. 175–201, 1996.

Welander, P. On the Temperature Jump in a Rarefied Gas, **Arkiv Fysik**, v. 7, p. 507–553, 1954.

Wick, G. C. Uber Ebene Diffusionsprobleme, **Zeitschrift fur Physik A Hadrons and Nuclei**, v. 121, p. 702–718, 1943.

Willett, L. J.; Hashim, S. A. F.; Tompson, R. V.; Loyalka, S. K. Effect of Surface Heterogeneities on Condensation on an Aerosol Particle, **Journal of Aerosol Science**, v. 30, p. 569–585, 1999.

Williams, M. M. R. **Mathematical Methods in Particle Transport Theory**. Butterworth, London, 1971.

Williams, M. M. R. A Review of the Rarefied Gas Dynamics Theory Associated With Some Classical Problems in Flow and Heat Transfer, **Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Physik**, v. 52, p. 500–516, 2001.

Williams, M. M. R.; Loyalka, S. K. **Aerosol Science: Theory and Practice, With Special Applications to the Nuclear Industry**. Pergamon Press, Oxford, 1992.

Wutz, M.; Adam, H.; Walcher, W. **Theory and Practice of Vacuum Technology**. Friedrich Vieweg and Sohn Verlag, Braunschweig, 1989.

Yano, T. Half-Space Problem for Gas Flows With Evaporation or Condensation on a Planar Interface With a General Boundary Condition, **Fluid Dynamics Research**, v. 40, p. 474–484, 2008.

Yasuda, S.; Takata, S.; Aoki, K. Evaporation and Condensation of a Binary Mixture of Vapors on a Plane Condensed Phase: Numerical Analysis of the Linearized Boltzmann Equation, **Physics of Fluids**, v. 17, p. 047105(1)–047105(19), 2005.

Yoo, B.; Park, J.; Park, I. H.; Lee, J.; Kim, M.; Jin, J.; Jeon, J.; Kim, S.; Kim, Y. MEMS Micromirror Characterization in Space Environments, **Optics Express**, v. 17, p. 3370–3380, 2009.

Ytrehus, T. Theory and Experiments on Gas Kinetics in Evaporation, 10<sup>th</sup> **International Symposium on Rarefied Gas Dynamics**, pages 1197–1212, 1976.

Zhang, Z.; Xu, J.; Qi, Z.; Xi, G. A Discrete Velocity Direction Model for the Boltzmann Equation and Applications to Micro Gas Flows, **Journal of Computational Physics**, v. 227, p. 5256–5271, 2008.