

Gases Rarefeitos em Dutos Cilíndricos com Superfícies Refletoras: Uma Abordagem Espectral

Carmo H. Kamphorst,

URI/FW – Depto. de Ciências Exatas e da Terra
98400-000, Frederico Westphalen, RS
E-mail: carmo@uri.edu.br

Mariza Camargo, Patricia Rodrigues

UFSM – Depto. de Ciências Agronômicas e Ambientais/CESNORS
98400-000, Frederico Westphalen, RS
E-mail: mariza@ufsm.br, patricia@ufsm.br

Liliane B. Barichello

UFRGS – Instituto de Matemática
91509-900, Porto Alegre, RS
E-mail: lbaric@mat.ufrgs.br

Resumo: *A partir da equação integral do modelo cinético BGK, referente a problemas da dinâmica de gases rarefeitos formulados em geometria cilíndrica, apresentamos uma solução analítica para os problemas de Poiseuille e “creep” térmico resultante da aplicação de um método espectral associado ao uso de uma expansão truncada em termos de polinômios de Legendre. A formulação proposta, além de já ter se mostrado adequada em casos onde a reflexão do gás na superfície do duto cilíndrico ocorre de forma perfeitamente difusa, revela-se também apropriada para dutos cilíndricos que apresentam superfícies refletoras, de acordo com resultados numéricos obtidos, fato este que amplia as possibilidades de tratamento analítico de problemas da Dinâmica de Gases Rarefeitos.*

Palavras-chave: *Dinâmica de Gases Rarefeitos, Equação Integral, Geometria Cilíndrica, Superfícies Refletoras.*

1 Formulação do Problema

Para nos reportar à formulação integral do modelo BGK referente aos problemas da Dinâmica de Gases Rarefeitos (DGR) em dutos cilíndricos retos de comprimento infinito, sujeitos à condição de contorno de superfície refletora, recorreremos ao trabalho de Barichello et al. [2] e escrevemos

$$G(r) = C(r) + C_S(r) + \int_0^R t G(t) [\mathcal{K}(t \rightarrow r) + \mathcal{K}_S(t \rightarrow r)] dt, \quad (1)$$

onde $G(r)$, com $r \in [0, R]$, denota a velocidade macroscópica do escoamento, admitindo R como sendo o raio físico adimensional do duto. Decorre da adimensionalização que R corresponde ao parâmetro de rarefação do gás, ou seja, R é proporcional ao inverso do número de Knudsen [7].

Na definição dos termos de (1) temos [2]:

$$C(r) = \frac{4}{\pi} \int_0^R \int_0^\infty \frac{F_0(t/\tau, r/\tau)}{\tau^2} \int_r^\infty \frac{\xi Q(\xi) e^{-\xi^2}}{(\xi^2 - \tau^2)^{1/2}} d\xi d\tau dt, \quad (2)$$

$$C_S(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^R \int_0^\infty \int_0^1 t Q(\xi) \frac{\exp\{-\xi^2 - p(t, r, \mu)/\xi\}}{p(t, r, \mu)(1 - \mu^2)^{1/2}} T(t, r, \mu, \xi) d\mu d\xi dt, \quad (3)$$

$$\mathcal{K}(t \rightarrow r) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^{\infty} e^{-\tau^2} F_0(t/\tau, r/\tau) \frac{d\tau}{\tau^2} \quad (4)$$

e

$$\mathcal{K}_S(t \rightarrow r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 \exp\{-\xi^2 - p(t, r, \mu)/\xi\} \frac{T(t, r, \mu, \xi)}{p(t, r, \mu)(1 - \mu^2)^{1/2}} d\mu d\xi, \quad (5)$$

sendo

$$F_0(t/\tau, r/\tau) = I_0(t/\tau)K_0(r/\tau), \quad t < r \quad (6)$$

e

$$F_0(t/\tau, r/\tau) = K_0(t/\tau)I_0(r/\tau), \quad t > r, \quad (7)$$

onde $I_0(x)$ e $K_0(x)$ denotam as funções de Bessel modificadas de ordem zero, de primeira e segunda classe [1], respectivamente. Ainda, em (2) e (3) temos o termo fonte $Q(\xi)$ expresso de uma forma generalizada como

$$Q(\xi) = \frac{1}{2}[k_1 - k_2(\xi^2 - 1)] \quad (8)$$

sendo que de acordo com Siewert e Valougeorgis [12] para o problema de Poiseuille adotamos $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$, e para o problema *creep* térmico assumimos $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$. Em (3) e (5), temos:

$$p(t, r, \mu) = \sqrt{t^2 + r^2 - 2tr\mu} \quad (9)$$

e

$$T(t, r, \mu, \xi) = \frac{2(1 - \alpha)\exp\{-2R\mu_0[R, r, \beta(t, r, \mu)]/\xi\}}{1 - (1 - \alpha)\exp\{-2R\mu_0[R, r, \beta(t, r, \mu)]/\xi\}}, \quad (10)$$

onde

$$\beta(t, r, \mu) = \frac{r - \mu t}{p(t, r, \mu)} \quad \text{e} \quad \mu_0(t, r, \mu) = \frac{1}{t} \sqrt{t^2 - r^2 + r^2\mu^2} \quad (11)$$

Salientamos que na formulação apresentada os termos de subscrito S , definidos em (3) e (5), incluem a expressão usada para descrever os efeitos da superfície do cilindro, decorrentes da presença da constante $\alpha \in [0, 1]$ em (10). Quando escolhemos $\alpha = 1$, que equivale à ocorrência de reflexão totalmente difusa na superfície do duto, temos conseqüentemente a anulação dos termos $C_S(r)$ e $\mathcal{K}_S(t \rightarrow r)$, o que acaba ocasionando uma considerável simplificação em (1). A situação onde se admite $\alpha = 1$ já foi pesquisada em [11] e [12] onde foram usados os modelos cinéticos BGK e S, respectivamente, e através de uma transformação proposta por Mitsis [9] e Ferziger [4] seguida da aplicação do método de ordenadas discretas [3] os autores calcularam, analiticamente, quantidades de interesse físico para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico. Também trabalhando com a condição de reflexão totalmente difusa na superfície do duto apresentamos em [6] e [10] uma aproximação espectral associada a um esquema de colocação para resolver uma equação integral, formulada a partir do modelo BGK, referente ao fluxo de gases rarefeitos em tubos cilíndricos. Em [6] construímos a proposta de expansão utilizando splines cúbicas de Hermite, enquanto que em [10] empregamos polinômios de Legendre, e, em ambos os trabalhos, estimamos resultados numéricos para perfis de velocidade e taxas de fluxo relativos aos problemas de Poiseuille e *creep* térmico.

Neste trabalho vamos estender a metodologia já usada em [10], baseada em uma expansão truncada em termos de polinômios de Legendre, buscando obter uma solução analítica para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico desta vez incluindo a condição de superfície refletora, fato este não tratado pelas metodologias empregadas em [11] e [12].

As quantidades de interesse físico que desejamos calcular, tanto para o problema de Poiseuille como para o problema *creep* térmico são as velocidades macroscópicas

$$u(r) = G(r) \quad (12)$$

e as taxas de fluxo (do inglês *flow rate*)

$$U = \frac{4}{R^3} \int_0^R u(r)rdr. \quad (13)$$



2 Solução Analítica via Polinômios de Legendre

A fim de obter uma solução analítica tanto para o problema de Poiseuille como para o problema *creep* térmico, estabelecidos em dutos cilíndricos com superfícies refletoras, propomos utilizar uma expansão escrita em termos de polinômios de Legendre [5]:

$$G(r) = \sum_{j=0}^L a_j P_j \left(\frac{2r}{R} - 1 \right), \tag{14}$$

onde $P_j(x)$ representa o polinômio de Legendre [1] de ordem j .

Substituindo (14) em (1), escrevemos

$$\sum_{j=0}^L a_j \int_0^R P_j \left(\frac{2r}{R} - 1 \right) - \int_0^R t P_j \left(\frac{2t}{R} - 1 \right) \mathcal{N}(t \rightarrow r) dt = C(r) + C_S(r), \tag{15}$$

onde

$$\mathcal{N}(t \rightarrow r) = \mathcal{K}(t \rightarrow r) + \mathcal{K}_S(t \rightarrow r). \tag{16}$$

Buscando determinar um sistema linear simétrico podemos multiplicar (15) pela expressão:

$$\phi_i(r) = r P_i \left(\frac{2r}{R} - 1 \right) \tag{17}$$

para $i = 0, 1, 2, \dots, L$. Dessa forma, dividindo o intervalo de integração da variável t e realizando a integração da expressão resultante em r , obtemos

$$\sum_{j=0}^L a_j \{A_{i,j} - [B_{i,j} + C_{i,j}]\} = D_i \tag{18}$$

para $i = 0, 1, 2, \dots, L$, onde

$$A_{i,j} = \int_0^R \frac{\phi_i(r)\phi_j(r)}{r} dr, \tag{19}$$

$$B_{i,j} = \int_0^R \int_0^r \phi_i(r)\phi_j(t)\mathcal{N}(t \rightarrow r) dt dr, \tag{20}$$

$$C_{i,j} = \int_0^R \int_r^R \phi_i(r)\phi_j(t)\mathcal{N}(t \rightarrow r) dt dr \tag{21}$$

e

$$D_i = \int_0^R \phi_i(r) [C(r) + C_S(r)] dr. \tag{22}$$

Para avaliar numericamente as integrais das variáveis r e t , presentes nas expressões $A_{i,j}$, $B_{i,j}$, $C_{i,j}$ e D_i , mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, primeiramente, devemos efetuar algumas trocas de variáveis [5]. Para a variável r fazemos

$$\eta(r) = \frac{2r}{R} - 1, \tag{23}$$

e para a variável t usaremos as expressões

$$\eta_1(t) = \frac{2t}{r} - 1, \quad t \in [0, r] \tag{24}$$

e

$$\eta_2(t) = \frac{2t - r - R}{R - r}, \quad t \in [r, R]. \tag{25}$$

Sendo assim, (19) a (22) podem ser reescritas e avaliadas numericamente através das expressões

$$A_{i,j} = \frac{R}{2} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n P_i(\mu_n) P_j(\mu_n), \quad (26)$$

$$B_{i,j} = \frac{R}{4} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n^2 P_i(\mu_n) \sum_{m=1}^{N_t} \omega_m g_{m,n} P_j(\gamma_{m,n}) \mathcal{N}(g_{m,n} \rightarrow f_n), \quad (27)$$

$$C_{i,j} = \frac{R}{4} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n (R - f_n) f_n P_i(\mu_n) \sum_{m=1}^{N_t} \omega_m h_{m,n} P_j(\gamma_{m,n}^*) \mathcal{N}(h_{m,n} \rightarrow f_n) \quad (28)$$

e

$$D_i = \frac{R}{2} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n P_i(\mu_n) [C(f_n) + C_S(f_n)]. \quad (29)$$

Nestas equações, as constantes N_r e N_t indicam o número de pontos e pesos da quadratura de Gauss-Legendre usados na avaliação das integrais das variáveis r e t , respectivamente. Ainda, os demais termos presentes nesta formulação são definidos como

$$f_n = \frac{\mu_n + 1}{2} R, \quad (30)$$

$$g_{m,n} = \frac{\mu_m + 1}{2} f_n, \quad (31)$$

$$h_{m,n} = \frac{(\mu_m + 1)R - (\mu_m - 1)f_n}{2}, \quad (32)$$

$$\gamma_{m,n} = \frac{(\mu_m + 1)f_n - R}{R} \quad \text{e} \quad \gamma_{m,n}^* = \frac{(R - f_n)\mu_m + f_n}{R}. \quad (33)$$

Os termos $\mathcal{K}(t \rightarrow r)$ e $\mathcal{K}_S(t \rightarrow r)$, que definem $\mathcal{N}(t \rightarrow r)$ de (16) e presente em (20) e (21), bem como os termos $C(r)$ e $C_S(r)$ de (22), apresentam em suas integrais singularidades que proporcionam resultados divergentes ao serem avaliadas diretamente por quadratura de Gauss-Legendre. Sendo assim, como alternativa para avaliação destes termos usamos técnicas de modificação de seus integrandos, adicionando (e subtraindo) funções particulares, e, desta forma, obtivemos funções mais suaves, cuja avaliação por quadratura de Gauss-Legendre então possibilitou resultados convergentes. Os detalhes do tratamento das referidas singularidades estão em [5].

Destacamos que a necessidade de avaliação dos termos $C_S(r)$ e $\mathcal{K}_S(t \rightarrow r)$, não nulos quando se trata de reflexão difuso-especular na superfície do cilindro, estabelece dificuldades adicionais às tratadas em [6] e [10], onde a condição de reflexão totalmente difusa determina que estes dois termos sejam nulos; mas se a necessidade de tratamento específico destes dois termos tornou a metodologia empregada neste trabalho mais difícil de ser elaborada, por outro lado deixou-a mais abrangente.

Uma vez avaliadas todas as integrais de (18), temos um sistema linear simétrico cuja solução corresponde aos valores dos coeficientes constantes a_j usados na expansão dada em (14). A obtenção destes coeficientes possibilita a determinação das grandezas de interesse físico [5], (12) e (13), que avaliadas de acordo com a expansão proposta são escritas na forma

$$u_P(r) = \sum_{j=0}^L a_j P_j\left(\frac{r}{R} - 1\right) \quad (34)$$

e

$$u_T(r) = \sum_{j=0}^L a_j P_j\left(\frac{r}{R} - 1\right), \quad (35)$$

que correspondem às expressões para cálculo das velocidades macroscópicas do gás, e

$$U_P = \frac{2}{R^2} \sum_{s=1}^{N_r} \omega_s u_P(r_s^*) r_s^* \quad (36)$$

e

$$U_T = \frac{2}{R^2} \sum_{s=1}^{N_r} \omega_s u_T(r_s^*) r_s^* \quad (37)$$

que estabelecem as expressões para determinar as taxas de fluxo do gás. Aqui usamos os subscritos P e T para identificar os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, respectivamente. Salientamos ainda, que as expressões usadas para determinar as velocidades macroscópicas destes dois problemas diferem-se apenas em virtude das constantes k_1 e k_2 do termo de fonte indicado em (8) e que está presente nos termos $C(f_n)$ e $C_S(f_n)$ que compõem (29).

Em (36) e (37), N_r representa o número de pontos de quadratura de Gauss-Legendre $\mu_s \in [-1, 1]$ e de seus respectivos pesos ω_s utilizados na avaliação das integrais e

$$r_s^* = \frac{R}{2}(\mu_s + 1). \quad (38)$$

3 Resultados Numéricos

Para obter resultados numéricos relacionados às grandezas de interesse físico descritas anteriormente, realizamos uma implementação em linguagem Fortran, sendo que nas tabelas 1 e 2 são apresentados alguns resultados das taxas de fluxo do problema de Poiseuille e do problema *creep* térmico, respectivamente, em função de alguns valores de α e mediante a utilização dos parâmetros de entrada: $L = 10$, $N_\mu = 30$, $N_\xi = 50$, $N_r = 50$, $N_y = 100$ e $N_z = 50$. Utilizando parâmetros de entrada maiores observamos que os quatro dígitos apresentados nas tabelas 1 e 2 permanecem inalterados.

Tabela 1: Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille

R	$\alpha = 1.0$	$\alpha = 0.92$	$\alpha = 0.80$
0.01	1.476	1.717	2.166
0.10	1.404	1.586	1.921
0.20	1.381	1.535	1.814
1.00	1.458	1.530	1.653
2.00	1.657	1.695	1.755
5.00	2.349	2.357	2.368
10.00	3.579	3.580	3.582

Tabela 2: Taxas de Fluxo do Problema *Creep* Térmico

R	$\alpha = 1.0$	$\alpha = 0.92$	$\alpha = 0.80$
0.01	0.718	0.828	1.030
0.10	0.597	0.650	0.741
0.20	0.529	0.558	0.605
1.00	0.322	0.316	0.305
2.00	0.227	0.222	0.214
5.00	0.122	0.121	0.120
10.00	0.069	0.069	0.069

Pelos resultados explicitados nas tabelas acima constatamos, como esperado, que as taxas de fluxo calculadas com $\alpha = 1$ (reflexão totalmente difusa) concordam com os respectivos dígitos

apresentados em [6] e [10]. Também, os resultados das tabelas 1 e 2 podem ser encontrados em [8] onde Loyalka, partindo da equação integral referente ao modelo BGK, utilizou um esquema numérico para cálculo das taxas de fluxo (tabelas 4 e 5 de [8]) e perfis de velocidades referentes aos problemas de Poiseuille e *creep* térmico considerando a ocorrência de reflexão difuso-especular na superfície de dutos cilíndricos.

Nas figuras a seguir ilustramos as taxas de fluxo dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico, apresentadas nas tabelas 1 e 2, respectivamente. Optamos pela utilização de escala logarítmica no eixo horizontal para facilitar a visualização das informações contidas nos gráficos.

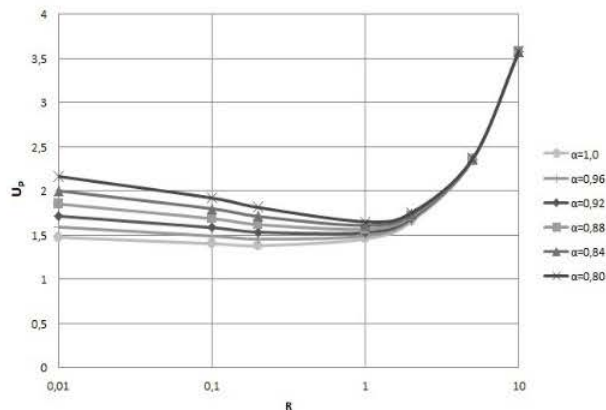


Figura 1: Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille

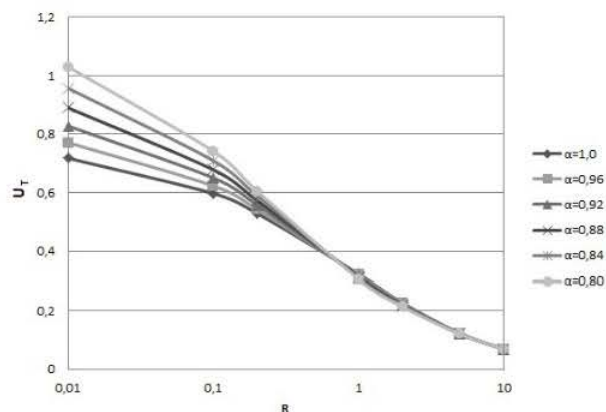


Figura 2: Taxas de Fluxo do Problema *Creep* Térmico

Na Figura 1 podemos observar que para o problema de Poiseuille temos taxas de fluxo maiores em dutos onde a reflexão das partículas do gás na superfície do cilindro é menos difusa, isto é, os menores valores de α produzem as maiores taxas de fluxo. Tal fato é mais evidente em dutos com valores de R pequenos, que apresentam escoamentos que tendem ao regime de transição e moléculas livres (R corresponde ao parâmetro de rarefação do gás que é definido de forma inversamente proporcional ao número de Knudsen), que, como esperado, são mais sensíveis aos efeitos de superfície, como acontece em microcanais.

Observando a Figura 2, constatamos que as taxas de fluxo do problema *creep* térmico também são mais sensíveis aos efeitos de superfície nos escoamentos com valores de R pequenos, embora

apresentem comportamentos distintos para valores de R menores e maiores que 0.6 (aproximadamente). Nos dutos com valores de R menores que 0.6 quanto menos difusa for a reflexão das partículas do gás na superfície do duto, maiores são as taxas de fluxo, enquanto que para dutos com valores de R maiores que 0.6 ocorre justamente o contrário.

Neste trabalho, em que verificamos resultados disponíveis na literatura [8], salientamos o fato de termos obtido uma solução de caráter analítico, sem aplicação de transformação proposta em [4] e [9] usualmente utilizada em outros trabalhos [11, 12] para obtenção de soluções em forma fechada em geometria cilíndrica, para problemas de gases rarefeitos.

Referências

- [1] M. Abramowitz, I. A. Stegun, “Handbook of mathematical function”, Dover Pub., New York, 1965.
- [2] L. B. Barichello, M. Camargo, P. Rodrigues, C. E. Siewert, An integral equation basic to the BGK model for flow in a cylindrical tube, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik Physik*, 53 (2002) 769-781.
- [3] L. B. Barichello, C. E. Siewert, A Discrete-Ordinates Solution for a Non-Grey Model with Complete Frequency Redistribution, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62 (1999) 665-675.
- [4] J. H. Ferziger, Flow of a Rarefied Gas Through a Cylindrical Tube, *The Physics of Fluids*, 10 (1967) 1448-1453.
- [5] C. H. Kamphorst, “Fluxo de Gases Rarefeitos em Dutos Cilíndricos: Uma Abordagem via Equações Integrais” Tese de Doutorado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2009.
- [6] C. H. Kamphorst, P. Rodrigues, L. B. Barichello, A Spectral Approach to Compute Rarefied Gas Flows in Cylindrical Geometry, *International Nuclear Atlantic Conference*, 2009, Rio de Janeiro, RJ, Brasil (CD-Rom).
- [7] G. E. Karniadakis, A. Beskok, “Micro Flows”, Springer-Verlag, New York, 2002.
- [8] S. K. Loyalka, Kinetic Theory of Thermal Transpiration and Mechanocaloric Effect II. *The Journal of Chemical Physics*, 63 (1975) 4054-4060.
- [9] G. J. Mitsis, “Transport Solutions to the Monoenergetic Critical Problems”, Tese de Doutorado, Argonne National Laboratory, Chicago, 1963.
- [10] P. Rodrigues, C. H. Kamphorst, L. B. Barichello, A Spectral Method for Rarefied Gas Dynamics Problems in Cylindrical Geometry, *International Journal of Pure and Applied Mathematics*, 51 (2009) 181-187.
- [11] C. E. Siewert, Poiseuille and Thermal-Creep Flow in a Cylindrical Tube, *Journal of Computational Physics*, 160 (2000) 470-480.
- [12] C. E. Siewert, D. Valougeorgis, An Analytic Discrete-Ordinates Solution of the S Model in Rarefied Gas Dynamics: Poiseuille and Thermal-Creep Flow in a Cylindrical Tube, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 72 (2002) 531-550.