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

DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS E TRANSFERÊNCIA RADIATIVA: APLICAÇÕES EM GEOMETRIA CILÍNDRICA

por

Patricia Rodrigues

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, janeiro de 2003

DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS E TRANSFERÊNCIA RADIATIVA: APLICAÇÕES EM GEOMETRIA CILÍNDRICA

por

Patricia Rodrigues

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, 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^a. Dra. Liliane Basso Barichello

Comissão de Avaliação:

Prof. PhD. Antônio José da Silva Neto (UERJ/RJ)

Prof. PhD. Charles Edward Siewert (NCSU/USA)

Prof. Dr. Jorge Rodolfo Silva Zabadal (UFRGS/RS)

Prof. PhD. Roberto David Martinez Garcia (CTA–IEAv/SP)

Prof. PhD. Jun Sérgio Ono Fonseca
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 29 de janeiro de 2003

Para meus pais

Dalmires e *Iracema*

e para o *Luis Carlos*

AGRADECIMENTOS

De uma forma muito especial, gostaria de agradecer à minha orientadora, Dra. Liliane Basso Barichello, pela acolhida desde a época do Mestrado, pelo seu incentivo incansável, pelo seu carinho, pelo entusiasmo profissional e também pela oportunidade de participar de seu grupo de trabalho.

Quero registrar a minha admiração e o meu agradecimento ao Dr. Charles Edward Siewert pelos esclarecimentos e sugestões durante a realização desse e de outros trabalhos.

À minha grande amiga e colega Mariza de Camargo (Má) pelo trabalho conjunto, pela troca de idéias e pelos dez anos de apoio e amizade inabaláveis.

Ao meu noivo, Luis Carlos, por estar sempre ao meu lado, dando amor, carinho e compreensão.

Aos meus pais, Dalmires e Iracema, por incentivarem o gosto pelos estudos e ensinarem a nunca desistir, sempre lutar.

Aos colegas do Curso de Matemática da Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões, Campus de Frederico Westphalen, por todo o apoio recebido.

Às amigas Ana Paula, Graciela e Izabel e ao colega Rosenei pela amizade sincera e pelas descontraídas conversas ao telefone durante toda esta jornada.

Aos colegas da pós-graduação e ao PROMEC, representado pelo seu corpo de docentes e funcionários.

Aos familiares e demais amigos que sempre torceram por mim e, essencialmente a Deus, por me presentear com a vida e também com a chance e condições que poucos têm de atingirem seus objetivos.

RESUMO

DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS E TRANSFERÊNCIA RADIATIVA: APLICAÇÕES EM GEOMETRIA CILÍNDRICA

Neste trabalho são investigados problemas formulados em geometria cilíndrica na área da dinâmica de gases rarefeitos bem como na área de transferência radiativa. Com relação à dinâmica de gases rarefeitos, primeiramente são abordadas duas formas diferenciadas de se avaliar numericamente as funções de Chapmann-Enskog e de Burnett, necessárias na composição de soluções gerais nessa geometria. Em seguida é apresentada a derivação de uma equação integral baseada no modelo BGK para descrever o fluxo de um gás rarefeito em um tubo cilíndrico. Problemas relacionados à transferência radiativa, incluindo o caso não-linear acoplado radiação-condução, são solucionados com a aplicação de uma versão reformulada do método de ordenadas discretas, sendo que resultados numéricos relevantes a estes problemas são também apresentados.

Autor: Patricia Rodrigues

Orientador: Prof^a. Dra. Liliane Basso Barichello

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, janeiro de 2003.

ABSTRACT

RAREFIED GAS DYNAMICS AND RADIATIVE TRANSFER: APPLICATIONS IN CYLINDRICAL GEOMETRY

In this work some problems of the general area of the transport theory, in cylindrical geometry, are investigated. In the field of the rarefied gas dynamics the evaluation of the Chapman-Enskog and Burnett functions, used in particular solutions of general problems in cylindrical geometry, are evaluated. A complete derivation of the integral equation for the BGK model, in cylindrical geometry, is also presented. In addition, linear and nonlinear problems in radiative transfer in cylindrical geometry are solved based on the use of the integral equation along with an analytical version of the discrete ordinates method. Numerical results relevant to all these problems are presented.

Author: Patricia Rodrigues

Orientador: Prof^a. Dra. Liliane Basso Barichello

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, janeiro de 2003.

ÍNDICE

LISTA DE SÍMBOLOS

	Letras Romanas
$a(c)$	Função de Chapman-Enskog para condutividade térmica
$b(c)$	Função de Chapman-Enskog para a viscosidade
$d(c)$	Primeira função de Burnett
$e(c)$	Segunda função de Burnett
$I_n(x)$	Função de Bessel modificada de primeiro tipo
$K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$	Núcleo de espalhamento
$K_n(x)$	Função de Bessel modificada de segundo tipo
$k_n(c', c)$	Componente da expansão do núcleo de espalhamento
N_c	Parâmetro de condução-radiação
$Q(r)$	Fluxo de calor total normalizado
$Q_c(r)$	Fluxo de calor condutivo normalizado
$Q_r(r)$	Fluxo de calor radiativo normalizado
$q_r(r)$	Fluxo de calor radiativo
R	Raio do cilindro
	Letras Gregas
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker
$\nu(c)$	Freqüência de colisão
$\Theta(r)$	Distribuição de temperaturas
ϖ	Albedo de espalhamento simples

ÍNDICE DE FIGURAS

ÍNDICE DE TABELAS

CAPÍTULO 1

Introdução

A forma linearizada da equação de Boltzmann tem sido amplamente usada na descrição de diversas aplicações. Entre elas destaca-se, neste trabalho, a abordagem de problemas relacionados à dinâmica de gases rarefeitos e à transferência radiativa, todos eles formulados em geometria cilíndrica.

O interesse pelos problemas da dinâmica de gases rarefeitos [Williams, 1971; Cercignani, 1969] tem sido impulsionado, entre outros, pelo desenvolvimento de microssistemas (microválvulas, microcanais, microssensores, etc.) [Sharipov, 1999a], aplicações na aerodinâmica [Anderson Jr., 1969; Sharipov e Kalempa, 2003] bem como pelo desenvolvimento de tecnologias relacionadas a equipamentos de vácuo [Sharipov, 1999b]. Estudos teóricos deste ramo da teoria de transporte de partículas têm sido desenvolvidos ao longo do tempo basicamente de duas maneiras diferenciadas: através da obtenção de soluções provenientes da equação de Boltzmann propriamente dita [Ohwada e Sone, 1992; Siewert, 2003b; Siewert, 2003a]; ou, então, através do desenvolvimento de soluções obtidas a partir da aplicação de modelos [Barichello e Siewert, 2003] que visam a simplificar o termo de colisão desta equação [Cercignani, 1969; Williams, 1971]. No caso de geometria cilíndrica, uma proposta geral (pelo menos do ponto de vista teórico) considerando tubos circulares e um operador de colisão intermolecular arbitrário, pode ser encontrada no trabalho de Simons [Simons, 1967], também discutido por Williams [Williams, 1971]. No referido trabalho, uma proposta de solução geral da equação de Boltzmann linearizada é apresentada, sendo que certas funções, que são soluções de uma classe de equações integrais, desempenham papel fundamental nessa proposta. São as chamadas funções de Chapman-Enskog [Williams, 1971]. Na verdade, estas funções, bem como as chamadas funções de Burnett [Loyalka e Hickey, 1989], são também determinantes na avaliação da viscosidade e condutividade térmica de um gás rarefeito, e, conseqüentemente, no cálculo do livre caminho médio [Barichello e Siewert, 2003; Siewert e Sharipov, 2002]. Mais recentemente [Barichello e Siewert, 2003], o uso dessas funções foi também salientado na derivação de equações modelo provindas da equação de Boltzmann.

Resultados numéricos para as funções de Chapman-Enskog e de Burnett podem ser encontrados nas Refs. [Loyalka e Hickey, 1989] e [Ohwada e Sone, 1992] e mais recentemente na Ref. [Siewert, 2002b]. Entretanto, considerando a existência de certas diferenças entre alguns desses resultados e visando a desenvolver uma metodologia alternativa, talvez mais eficiente, aborda-se como ponto inicial neste trabalho o desenvolvimento de uma forma numérica diferenciada de avaliar essas funções, gerando assim mais uma fonte de dados para análise e comparação de resultados, bem como uma ferramenta computacional para o estudo futuro de problemas mais complexos de dinâmica de gases rarefeitos que necessitam da avaliação das funções de Chapman-Enskog e de Burnett.

Por outro lado, seguindo um estilo diferente ao da abordagem proposta por Simons na Ref. [Simons, 1967] (na qual foi apresentada uma solução para a equação de Boltzmann linearizada propriamente dita), vários pesquisadores já há muitos anos têm utilizado principalmente o modelo BGK [Bhatnagar et al., 1954] para descrever o núcleo de espalhamento presente no termo de colisão da equação de Boltzmann linearizada. Como exemplos das aplicações desse modelo na geometria cilíndrica podem-se citar, entre outros, os trabalhos numéricos de Cercignani e Sernagiotto [Cercignani e Sernagiotto, 1966; Cercignani e Sernagiotto, 1967] nos quais o modelo BGK foi utilizado respectivamente na descrição do fluxo de Poiseuille (termo usado para descrever o movimento de um gás que sofre a influência de um gradiente de pressão) e na descrição do fluxo de Couette (que descreve o movimento de um gás entre corpos que se movem); o trabalho de Ferziger [Ferziger, 1967] onde o problema do fluxo de Poiseuille já investigado de forma numérica por Cercignani e Sernagiotto foi desta vez analisado analiticamente. Também como exemplos da aplicação do modelo BGK em geometria cilíndrica, cita-se o trabalho de Valougeorgis e Thomas Jr. [Valougeorgis e Thomas Jr., 1986] no qual o método F_N foi utilizado no cálculo de resultados numéricos para o problema do fluxo de Poiseuille e para o problema "creep" térmico (que descreve um efeito de superfície que surge quando há um gradiente de temperatura que faz com que o gás se movimente com relação à parede fixa), o trabalho de Sharipov e Kremer [Sharipov e Kremer, 1996] em que foi calculado numericamente o fluxo de Couette entre dois cilindros em rotação (com velocidades diferentes) para uma grande variação do número de Knudsen (parâmetro relacionado ao estado de rarefação do gás), e ainda o trabalho de Siewert [Siewert, 2000] no qual foram tratados em geometria cilíndrica os problemas fluxo de Poiseuille e "creep" térmico. Trabalhos mais recentes em geometria cilíndrica também enfocam a caracterização e utilização de outros modelos, como é o caso da Ref. [Sharipov, 2003], onde o modelo S [Sharipov e Seleznev, 1998] foi utilizado no tratamento dos já mencionados problemas fluxo de Poiseuille e "creep" térmico.

Exceto pelas referências acima relacionadas aos trabalhos de Sharipov e co-autores, todas as demais tratam os problemas em geometria cilíndrica através da equação integral associada, e, assim, diferentes abordagens voltadas à resolução desta classe de equações têm sido propostas, algumas delas baseadas em métodos numéricos [Cercignani e Sernagiotto, 1966], ou alternativamente usando uma transformação apresentada por Mitsis [Mitsis, 1963] e generalizada na Ref. [Siewert e Thomas Jr., 1984] sendo que desta forma a solução da equação integral passa, então, a ser relacionada aos chamados "pseudo" problemas que reduzem os problemas formulados em geometria cilíndrica (ou mesmo em geometria esférica) a problemas definidos em termos das variáveis da geometria plana, que, conseqüentemente, tornam-se mais fáceis de serem resolvidos do que suas formulações originais.

Assim, a segunda proposta a ser apresentada neste trabalho, visando a usar a abordagem da equação integral baseada no modelo BGK como forma de descrever o fluxo de um gás rarefeito em um tubo cilíndrico, está voltada a uma dedução detalhada desta equação [Barichello et al., 2002a] enfatizando a inclusão de um termo de fonte não homogêneo geral na equação de balanço e um termo não homogêneo geral na condição de contorno do modelo considerado e, ainda, como um caso especial, destaca-se também, nesta mesma derivação a formulação da equação integral para o caso de reflexão especular na superfície do tubo.

Como forma de solucionar os "pseudo" problemas obtidos pela formulação integral a partir da aplicação da transformação proposta por Mitsis [Mitsis, 1963], recentemente Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 1999a] desenvolveram uma reformulação do método de ordenadas discretas que, entre outras aplicações, também tem sido utilizada na resolução de problemas da dinâmica de gases rarefeitos. Nesta nova versão do método de ordenadas discretas, diferentemente do que foi feito por Chandrasekhar [Chandrasekhar, 1960], as constantes de separação são calculadas a partir de problemas de autovalores, e esquemas de quadratura mais arbitrários podem ser usados. Entre as primeiras aplicações na área da dinâmica de gases rarefeitos com essa nova abordagem, destaca-se a Ref. [Barichello e Siewert, 1999b], em que Barichello e Siewert apresentaram uma solução em ordenadas discretas baseada em um esquema de quadratura do tipo "half-range" (que reduz a ordem do sistema e simplifica o problema de autovalores a ser resolvido) para o fluxo de Poiseuille descrito de acordo com o modelo BGK, sendo que nesta abordagem as constantes de separação podem ser encontradas como autovalores de um tipo especial de matriz na forma diagonal mais uma matriz de posto um. Em continuidade a este trabalho, a solução em ordenadas discretas apresentada por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 1999b] foi reavaliada [Rodrigues, 1998], sendo que a implementação computacional da solução desta vez foi elaborada através do uso de rotinas específicas para o problema de autovalores simplificado, e, além disso, foram introduzidos estudos aos problemas da dinâmica de gases rarefeitos em meio semi-infinito através da investigação dos problemas sugeridos por Loyalka, Petrellis e Storvick na Ref. [Loyalka et al., 1975]. Ainda na Ref. [Rodrigues, 1998] foi apresentada, tanto para o problema de domínio finito como para os de domínio semi-infinito, uma solução em ordenadas discretas com duas abordagens diferenciadas, uma avaliando analiticamente as soluções elementares e outra numericamente. Também, como conseqüência da nova versão do método de ordenadas discretas em geometria plana, foram resolvidos de uma maneira unificada [Barichello et al., 2001] alguns problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos baseados no modelo BGK, em particular, foram solucionados os problemas "creep" térmico e "viscous-slip" para o caso semi-infinito, enquanto que os problemas fluxo de Poiseuille, fluxo de Couette e também "creep" térmico foram resolvidos com uma grande variação do número de Knudsen. A nova versão do método de ordenadas discretas também foi testada nos problemas da dinâmica de gases rarefeitos em coordenadas cilíndricas (também baseados no modelo BGK), e nesse caso destacam-se as Refs. [Siewert, 2000] e [Camargo et al., 2000], nas quais foram solucionados alguns problemas clássicos tais como o fluxo de Poiseuille e "creep" térmico com o uso de esquemas de quadratura diferentes.

Tendo-se já trabalhado em geometria cilíndrica e com base nos bons resultados obtidos com a aplicação do método de ordenadas discretas nos problemas associados à dinâmica de gases rarefeitos, surgiu o interesse em investigar alguns problemas mais complexos formulados também em geometria cilíndrica, só que desta vez em outras áreas da teoria de transporte de partículas, mantendo-se ainda a proposta de aplicação do método de ordenadas discretas.

Para compor, portanto, a terceira proposta deste trabalho, aborda-se inicialmente problemas lineares de transferência radiativa em geometria cilíndrica, apresentando uma solução geral em ordenadas discretas juntamente com uma solução particular associada, contemplando inclusive o caso conservativo [Rodrigues e Barichello, 2003]. Sabendo também que o estudo de problemas acoplados de radiação e condução [Özışık, 1973; Modest, 1993] é de grande interesse das aplicações da engenharia [Viskanta e Anderson, 1975] passou-se a investigar esta área que, segundo Andre e Degiovanni [Andre e Degiovanni, 1995], Banoczi e Kelley [Banoczi e Kelley, 1998], Klar e Siedow [Klar e Siedow, 1998] e Wang et al. [Wang et al., 2002], está relacionada com o comportamento térmico de materiais isolantes e de materiais semi-transparentes tais como vidros, polímeros e papéis. Consta na literatura que esta classe de problemas relacionada à transferência de calor pelo modo acoplado radiação-condução vem sendo investigada há várias décadas. Como exemplo tem-se que no ano de 1965, Viskanta [Viskanta, 1965] estudou problemas de transferência de calor por radiação-condução em estado estacionário com espalhamento isotrópico, usando uma solução iterativa para a forma integral da equação de transferência. Em 1972, Lii e Özışık resolveram um problema de radiação-condução transiente [Lii e Özışık, 1972] aplicando uma técnica de expansão desenvolvida por K. M. Case [Case e Zweifel, 1967] para resolver a equação de transferência em uma placa com fronteiras refletoras.

Dando continuidade à evolução histórica dos estudos de alguns problemas acoplados de radiação e condução, citam-se os trabalhos de Siewert e Thomas [Siewert e Thomas Jr., 1991a; Siewert e Thomas Jr., 1991b; Siewert e Thomas Jr., 1992] que empregaram uma versão estável do método P_N, também conhecido como método dos harmônicos esféricos, juntamente com as splines cúbicas de Hermite na obtenção de uma técnica iterativa para solucionar uma classe de problemas em estado estacionário, não lineares, formulados por Özışık [Özışık, 1973], com relação à transferência de calor pelo modo acoplado de radiação e condução em geometria esférica e cilíndrica. Ainda em 1991, Li e Özışık [Li e Özışık, 1991] usaram o método de diferenças finitas em combinação com o método de ordenadas discretas para estudar a transferência de calor pelo modo acoplado de radiação e condução (estado estacionário) em um cilindro sólido com espalhamento anisotrópico.

Nos consecutivos anos de 1992 e 1993, Spuckler and Siegel [Spuckler e Siegel, 1992; Spuckler e Siegel, 1993] aplicaram o método de diferenças finitas e as funções de Green para resolver problemas (estado estacionário) de transferência de calor por radiação-condução em placas semitransparentes unidimensionais. Depois, em 1995, Siewert introduziu neste campo de problemas acoplados de transferência de calor (em geometria plana) um método iterativo [Siewert, 1995], baseado no método de Newton, com o qual obteve soluções computacionalmente mais eficientes. Neste mesmo ano, Andre e Degiovanni [Andre e Degiovanni, 1995] estudaram a transferência de calor transiente pelo modo acoplado de radiação e condução em vidros. Em 1996, Sakami, Charette e Le Dez [Sakami et al., 1996] aplicaram o método de ordenadas discretas para determinar a intensidade radiativa e a distribuição de temperatura em um meio semi-transparente pelo modo acoplado de radiação e condução em geometria bidimensional. Ainda, Saldanha da Gama [Saldanha da Gama, 1996] desenvolveu um trabalho de simulação numérica para o processo de transferência de calor por radiação-condução em um cilindro não-convexo, e Ruperti, Raynaud e Sacadura [Ruperti et al., 1996] estudaram um problema inverso de transferência de calor por radiação-condução objetivando estimar temperaturas e fluxos na superfície de uma placa semitransparente através de medições simuladas de temperatura transiente. A forma transiente de transferência de calor pelo modo acoplado de radiação-condução foi investigada também por Hahn et al. [Hahn et al., 1997], que, no ano de 1997, desenvolveram um modelo para determinação da difusividade térmica de materiais cerâmicos usando o método "flash" com laser, que, segundo eles, até então não havia sido aplicado a materiais que, além de absorverem e emitirem, também pudessem espalhar radiação.

No ano de 1998 Andre e Degiovanni [Andre e Degiovanni, 1998] resolveram analiticamente um problema de transferência de energia transiente unidimensional pelo modo acoplado de radiação e condução em meio finito com a aproximação "two-flux" e usando a transformada de Laplace. Em 1999, Vargas e de Vilhena [Vargas e de Vilhena, 1999] desenvolveram uma solução em forma fechada para um problema acoplado de transferência de calor por radiação-condução em uma placa, usando o método LTS_N, apresentando simulações numéricas com a formulação LTS_2, e Tan et al. [Tan et al., 1999] trabalharam com a transferência transiente de calor pelo modo acoplado de condução-radiação em um meio participante (emite, absorve e espalha radiação). No ano 2000, Lazard et al. [Lazard et al., 2000] criaram um modelo analítico para estimar parâmetros em problemas de transferência de calor por radiação-condução, e Anteby et al. [Anteby et al., 2000] desenvolveram um código computacional numérico para calcular a transferência de calor transiente pelo modo acoplado radiação-condução em um cilindro de material semitransparente com propriedades térmicas dependentes da temperatura. Liu e Tan [Liu e Tan, 2001] analisaram numericamente, em 2001, a transferência de calor transiente por radiação-condução em uma placa semitransparente unidimensional e o processo transiente de transferência de calor por radiação-condução em um cilindro, empregando o método de ordenadas discretas para resolver a equação de transferência radiativa e um esquema implícito para tratar a equação de energia, enquanto que Lazard et al. [Lazard et al., 2001] investigaram a transferência de calor transiente acoplada por radiação-condução em uma placa com espalhamento anisotrópico.

Demonstrando que o interesse pelos problemas de transferência de calor pelo modo acoplado radiação-condução continua a crescer, destacam-se, no ano de 2002, os trabalhos de Thomas Götz [Götz, 2002], que utilizou o método das diferenças finitas implícito para computar a transferência de calor acoplada pela forma radiação-condução em meio semitransparente, de Park e Lee [Park e Lee, 2002], que empregaram a aproximação S_4 na resolução de um problema inverso de radiação buscando determinar a intensidade (dependente do tempo) de uma fonte de calor que simula chamas de um forno usando medições de temperatura em um meio participante tridimensional onde radiação-condução ocorrem simultaneamente, de Liu [Liu, 2002], que analisou o acoplamento transiente de radiação-condução em cilindros semitransparentes infinitos cujo termo de fonte de calor radiativo foi calculado pelos coeficientes de transferência radiativa e a equação de energia foi resolvida pelo método de diferenças finitas implícito, assim como o trabalho de Hendi e Abulwafa [Hendi e Abulwafa, 2002] que consideraram um meio esférico de espalhamento anisotrópico com fronteiras de temperatura constante e reflexão difusa, em que o método de Galerkin foi usado para resolver o problema de transferência radiativa enquanto que um método iterativo foi usado para solucionar a relação não linear entre a equação de transferência radiativa e a equação de energia.

Cabe salientar, ainda, que questões de existência e unicidade para esses problemas também já foram estudadas [Kelley, 1996] no caso de geometria plana. Um outro aspecto a ser ressaltado é que devido às complicações computacionais e matemáticas encontradas nesta classe de problemas de transferência de calor não lineares acoplados, é importante que se tenha um algoritmo eficiente e preciso que auxilie a obtenção de uma solução satisfatória. Estes aspectos de eficiência e precisão são ainda mais significantes quando, por exemplo, métodos baseados em iterações são usados na investigação de problemas inversos de transferência de calor acoplados [Silva Neto e Özışık, 1993; Özışık e Orlande, 2000].

Neste sentido, a solução geral em ordenadas discretas (baseada na formulação apresentada por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 1999a]) para os problemas de transferência radiativa em geometria cilíndrica foi proposta de tal forma que também fosse possível abranger o caso não-linear acoplado de radiação-condução [Barichello et al., 2002b], solução esta desenvolvida também em conjunto com as splines cúbicas de Hermite [Schultz, 1973] e o método de Newton.

Dessa forma, para compor este trabalho, propõem-se no Capítulo 2, com o intuito de tratar futuramente problemas mais gerais em geometria cilíndrica e também explorar diferentes equações modelo na dinâmica de gases rarefeitos, duas formas diferenciadas de avaliar numericamente as chamadas funções de Chapman-Enskog e de Burnett, e ainda com relação aos problemas da dinâmica de gases rarefeitos apresenta-se no Capítulo 3 a formulação da equação integral para descrever o fluxo de um gás rarefeito em um tubo cilíndrico. No Capítulo 4, no qual também é utilizada a geometria cilíndrica, propõe-se o desenvolvimento de uma formulação geral baseada no uso do método de ordenadas discretas para tratar aplicações primeiramente voltadas à resolução de problemas de transferência de calor unicamente na forma radiativa e posteriormente no enfoque de problemas não lineares de transferência de calor pelo modo acoplado de radiação-condução. Finalmente, conclusões com relação aos assuntos abordados aqui são apresentadas no Capítulo 5.

CAPÍTULO 2

Avaliação das Funções de Chapman-Enskog e de Burnett

Em um trabalho enfocando o tratamento teórico da equação de Boltzmann descrita em geometria cilíndrica, Simons [Simons, 1967] propôs uma solução geral para a equação de Boltzmann linearizada, na qual foram empregadas as chamadas funções de Chapman-Enskog. Na Ref. [Williams, 1971] o trabalho de Simons é mencionado e estas mesmas funções recebem um maior destaque, sendo definidas e posteriormente usadas na determinação da viscosidade e da condutividade térmica de gases rarefeitos. As funções de Chapman-Enskog bem como as chamadas funções de Burnett podem também ser encontradas na Ref. [Barichello e Siewert, 2003] em meio à obtenção de equações modelo derivadas da equação de Boltzmann. Considerando que a avaliação numérica dessas funções requer um trabalho computacional intenso e visando a sua utilização em aplicações de problemas em geometria cilíndrica mais gerais, bem como nas aplicações já mencionadas acima, neste capítulo apresentam-se duas formas diferenciadas de avaliação das referidas funções. Assim, considera-se inicialmente a equação linearizada de Boltzmann escrita segundo o modelo de esferas rígidas [Pekeris e Alterman, 1957] na forma

$$c\mu\frac{\partial}{\partial\tau}h(\tau,\mathbf{c}) = \varepsilon L\{h\}(\tau,\mathbf{c}) \tag{2.1}$$

onde

$$L\{h\}(\tau,\mathbf{c}) = -\nu(c)h(\tau,\mathbf{c}) + \int_0^\infty\int_{-1}^1\int_0^{2\pi} e^{-c'^2}h(\tau,\mathbf{c}')K(\mathbf{c}',\mathbf{c})c'^2d\chi'd\mu'dc'. \tag{2.2}$$

Aqui o núcleo de espalhamento é escrito segundo Pekeris e Alterman [Pekeris e Alterman, 1957] na forma

$$K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{n} (2n+1)(2-\delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) k_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi) \tag{2.3}$$

sendo que as funções *normalizadas* de Legendre são dadas por

$$P_n^m(\mu) = \left[\frac{(n-m)!}{(n+m)!}\right]^{1/2} (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_n(\mu), \quad n \geq m, \tag{2.4}$$

onde $P_n(\mu)$ denota os polinômios usuais de Legendre para os quais

$$\int_{-1}^{1} P_n^m(\mu) P_{n'}^m(\mu) d\mu = \left(\frac{2}{2n+1}\right) \delta_{n,n'} \tag{2.5}$$

onde $\delta_{i,j}$ é o delta de Kronecker. Ainda

$$\varepsilon = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} l, \tag{2.6}$$

sendo que l é o livre caminho médio, n_0 é a densidade e σ_0 é o diâmetro de colisão das partículas de gás. A variável espacial τ é escrita adimensionalmente em termos do livre caminho médio l e $c(2kT_0/m_0)^{1/2}$ é a magnitude da velocidade da partícula. Tem-se também que k é a constante de Boltzmann, m_0 é a massa da partícula de gás, T_0 é uma temperatura de referência conveniente [Siewert, 2003a] e que a função desconhecida $h(\tau, \mathbf{c})$ na Eq. (2.1) é uma perturbação da função de distribuição Maxweliana [Barichello e Siewert, 2003]

$$f_0(c) = n_0[m_0/(2\pi k T_0)]^{3/2} e^{-c^2}. \tag{2.7}$$

Continuando, tem-se que os termos $k_n(c', c)$ na Eq. (2.3) são os componentes da expansão do núcleo de espalhamento $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ [Pekeris e Alterman, 1957],

$$\nu(c) = \frac{2c^2+1}{c} \int_0^c e^{-x^2} dx + e^{-c^2} \tag{2.8}$$

é a "freqüência de colisão", e, ainda, que as coordenadas esféricas $(c, \arccos\mu, \chi)$ definem (adimensionalmente) o vetor velocidade $\mathbf{c}$.

Embora o núcleo de espalhamento definido por Pekeris e Alterman [Pekeris e Alterman, 1957], baseado no modelo de esferas rígidas, contenha os componentes $k_n(c', c)$ requeridos para todo n, na próxima seção, durante a determinação de soluções para as funções de Chapman-Enskog e de Burnett, somente serão usados $n = 0, 1, 2$ e 3, cujas formas exatas (nas quais, em geral, $k_n(c', c) = k_n(c, c')$) podem ser escritas para $c' < c$ [Pekeris e Alterman, 1957; Loyalka e Hickey, 1989] como

$$-(1/2)c'ck_0(c', c) = (2/3)c'^3 + 2c'c^2 - 4H(c'), \tag{2.9}$$

$$-(1/2)c'^2c^2k_1(c', c) = (2/15)c'^5 - 4c' - (2/3)c'^3c^2 - 4(c'^2 - 1)H(c'), \tag{2.10}$$

$$-(1/2)c'^3c^3k_2(c', c) = a_2(c', c) + b_2(c', c)H(c') \tag{2.11}$$

e

$$-(1/2)c'^4c^4k_3(c', c) = a_3(c', c) + b_3(c', c)H(c') \tag{2.12}$$

onde

$$a_2(c', c) = (2/35)c'^7 - 3c'^3 + 18c' - [(2/15)c'^5 - 3c']c^2, \tag{2.13}$$

$$b_2(c', c) = -6c'^4 + 15c'^2 - 18 + [2c'^2 - 3]c^2, \tag{2.14}$$

$$a_3(c', c) = (2/63)c'^9 - 5c'^5 + 20c'^3 - 150c' - [(2/35)c'^7 - c'^3 + 30c']c^2, \tag{2.15}$$

$$b_3(c', c) = -10c'^6 + 45c'^4 - 120c'^2 + 150 + [6c'^4 - 21c'^2 + 30]c^2 \tag{2.16}$$

e

$$H(c) = e^{c^2} \int_0^c e^{-x^2} dx. \tag{2.17}$$

Pela literatura, pode-se perceber que o livre caminho médio tem sido definido em termos da viscosidade quando a aplicação está relacionada a problemas de determinação de fluxos (tais como o Problema do Fluxo de Poiseuille), ou, então, em termos da condutividade térmica quando se trata de problemas de fluxo de calor (tais como o Problema "Creep" Térmico). Assim, como discutido nas Refs. [Pekeris e Alterman, 1957], [Loyalka e Hickey, 1989], [Barichello e Siewert, 2003] e [Siewert e Sharipov, 2002], se o livre caminho médio for definido em termos da viscosidade, isto é,

$$l = l_p = \frac{\mu_*}{p_0}\Big(\frac{2kT_0}{m_0}\Big)^{1/2}, \tag{2.18}$$

onde μ_* é a viscosidade e $p_0 = n_0 k T_0$, tem-se para o modelo de esferas rígidas

$$\mu_* = \frac{8(2m_0 kT_0)^{1/2}}{15\pi\sigma_0^2}\int_0^\infty e^{-c^2} b(c) c^6 dc, \tag{2.19}$$

e, assim, pode-se usar na Eq. (2.1)

$$\varepsilon = \varepsilon_p = \frac{16}{15}\pi^{-1/2}\int_0^\infty e^{-c^2} b(c) c^6 dc \tag{2.20}$$

sendo que a função $b(c)$ é solução da equação de Chapman-Enskog para a viscosidade (definida na próxima seção). Por outro lado, se o livre caminho médio estiver baseado na condutividade térmica, tem-se

$$l = l_t = \frac{4\lambda_*}{5n_0 k}\Big(\frac{m_0}{2kT_0}\Big)^{1/2}, \tag{2.21}$$

onde λ_* é a condutividade térmica, que, de acordo com o modelo de esferas rígidas, pode ser expressa na forma

$$\lambda_* = \frac{4k(2kT_0/m_0)^{1/2}}{3\pi\sigma_0^2}\int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 dc, \tag{2.22}$$

e, assim, tem-se

$$\varepsilon = \varepsilon_t = \frac{16}{15}\pi^{-1/2}\int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 dc \tag{2.23}$$

sendo que a função $a(c)$ é solução da equação de Chapman-Enskog para a condutividade térmica (também definida na próxima seção).

Além de se fazerem presentes na determinação do livre caminho médio, definido em termos da viscosidade ou da condutividade térmica, as funções de Chapman-Enskog $b(c)$ e $a(c)$ são também usadas na determinação de soluções lineares na variável espacial para a

Eq. (2.1), a saber [Barichello e Siewert, 2003]

$$h(\tau, \mathbf{c}) = c(1-\mu^2)^{1/2}\cos\chi[\varepsilon\tau - \mu c b(c)], \tag{2.24}$$

$$h(\tau, \mathbf{c}) = c(1-\mu^2)^{1/2}\mathrm{sen}\,\chi[\varepsilon\tau - \mu c b(c)], \tag{2.25}$$

e, ainda,

$$h(\tau, \mathbf{c}) = (c^2 - 5/2)\varepsilon\tau - \mu c a(c), \tag{2.26}$$

que juntamente com outras cinco soluções exatas (estas outras independentes da parte espacial) totalizam oito soluções linearmente independentes referentes à Eq. (2.1), usadas na determinação de núcleos sintéticos, denotados na Ref. [Barichello e Siewert, 2003] por $F(\mathbf{c}', \mathbf{c})$, que têm sido utilizados para aproximar o núcleo exato $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ apresentado aqui na Eq. (2.3), determinando modelos como o CES e CEBS [Barichello e Siewert, 2003].

A definição dos chamados núcleos sintéticos baseia-se (em termos gerais), além do truncamento do somatório de índice n da Eq. (2.3), na determinação de núcleos separáveis, sendo que $N = 2$ caracteriza o Modelo CES, enquanto que $N = 3$ caracteriza o modelo CEBS [Barichello e Siewert, 2003]. Este último modelo (CEBS) está relacionado com a resolução da equação de Boltzmann não homogênea, cuja solução particular é dada em termos das já mencionadas funções de Chapman-Enskog para a viscosidade $b(c)$ e condutividade térmica $a(c)$, bem como das funções de Burnett [Simons, 1967; Williams, 1971], chamadas de primeira e segunda função de Burnett nas Refs. [Loyalka e Hickey, 1989] e [Barichello e Siewert, 2003] e denotadas aqui respectivamente por $d(c)$ e $e(c)$.

Tendo mencionado algumas situações que envolvem o uso das funções de Chapman-Enskog e das funções de Burnett, passa-se agora a propor uma notação padrão para cumprir o objetivo deste capítulo que é o de definir e posteriormente solucionar estas referidas funções.

2.1 Definição das Funções de Chapman-Enskog e de Burnett

A classe geral das funções a serem solucionadas neste capítulo pode ser escrita na forma [Siewert, 2002b; Barichello et al., 2003]

$$\mathcal{L}_n\{f\}(c) = r(c), \qquad c \in [0, \infty) \tag{2.27}$$

com $r(c)$ dado, e com

$$\mathcal{L}_n\{f\}(c) = \nu(c)f(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2} f(c')k_n(c', c)c'^2 dc', \tag{2.28}$$

onde, assim como na seção anterior, $\nu(c)$ é a "freqüência de colisão" dada pela Eq. (2.8) e as funções $k_n(c', c)$ são os componentes da expansão do núcleo de espalhamento do modelo de esferas rígidas de Pekeris-Alterman [Pekeris e Alterman, 1957] dados pelas Eqs. (2.9)-(2.16).

Buscando conservar massa, momento e energia, o núcleo $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ dado pela Eq. (2.3) deve ser tal que

$$\nu(c)\mathbf{S}(c, \mu, \chi) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} \mathbf{S}(c', \mu', \chi') K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) c'^2 d\chi' d\mu' dc', \tag{2.29}$$

onde

$$\mathbf{S}(c, \mu, \chi) = \begin{bmatrix} 1 \\ c\mu \\ c(1-\mu^2)^{1/2}\cos\chi \\ c(1-\mu^2)^{1/2}\mathrm{sen}\chi \\ c^2 \end{bmatrix}. \tag{2.30}$$

Pela Eq. (2.3), tem-se que a Eq. (2.29) satisfaz somente três condições:

$$\nu(c) = \int_0^\infty e^{-c'^2} k_0(c', c)c'^2 dc', \tag{2.31}$$

$$\nu(c)c = \int_0^\infty e^{-c'^2} k_1(c', c)c'^3 dc' \tag{2.32}$$

e

$$\nu(c)c^2 = \int_0^\infty e^{-c'^2} k_0(c', c)c'^4 dc'. \tag{2.33}$$

Como essas últimas equações mostram que a versão homogênea da Eq. (2.27) possui soluções para $n = 0$ e 1, pode-se listar condições de solvabilidade (conseqüências de uma manifestação da Alternativa de Fredholm)

$$\int_0^\infty e^{-c^2} r(c) c^2 dc = 0, \quad n = 0, \tag{2.34}$$

$$\int_0^\infty e^{-c^2} r(c) c^4 dc = 0, \quad n = 0, \tag{2.35}$$

e

$$\int_0^\infty e^{-c^2} r(c) c^3 dc = 0, \quad n = 1, \tag{2.36}$$

que devem ser satisfeitas para esses dois casos ($n = 0$ e 1).

Usando a notação geral introduzida na Eq. (2.27), os casos específicos abordados aqui podem ser escritos como

$$\pounds_2\{c^2 b\}(c) = c^2 \tag{2.37}$$

que representa a Equação de Chapman-Enskog para viscosidade,

$$\pounds_1\{ca\}(c) = c(c^2 - 5/2) \tag{2.38}$$

com a condição de normalização [Williams, 1971]

$$\int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^4 dc = 0 \tag{2.39}$$

que simboliza a Equação de Chapman-Enskog para condutividade térmica, e ainda as duas Equações de Burnett [Loyalka e Hickey, 1989] que podem ser escritas na forma

$$\pounds_1\{c^3 d\}(c) = 2c^3 b(c) - 5c\varepsilon_p, \tag{2.40}$$

com a condição de normalização

$$\int_0^\infty e^{-c^2} d(c) c^6 dc = 0, \tag{2.41}$$

e

$$\pounds_3\{c^3 e\}(c) = 2c^3 b(c), \tag{2.42}$$

sendo ε_p dado pela Eq. (2.20).

A partir de agora, propõe-se o desenvolvimento de duas formas diferenciadas de solucionar as funções de Chapman-Enskog e de Burnett, sendo que na primeira abordagem reproduz-se aqui a formulação desenvolvida por Siewert na Ref. [Siewert, 2002b] pelo fato de que os resultados numéricos do referido trabalho (que envolvem as splines cúbicas de Hermite também usadas aqui no Capítulo 3) foram realmente verificados durante o desenvolvimento desta tese, servindo como experiência computacional para que fosse, então, desenvolvida uma nova proposta de solução para as funções de Chapman-Enskog e de Burnett, desta vez, usando uma expansão em termos dos Polinômios de Legendre [Barichello et al., 2003].

2.2 Uma Expansão em Splines Cúbicas de Hermite

Tendo como referência o intervalo $[0,1]$ onde as splines cúbicas de Hermite [veja Anexo A] estão definidas, introduz-se as variáveis

$$u(c) = e^{-c} \quad \text{e} \quad u'(c') = e^{-c'}, \tag{2.43}$$

e, assim, reescreve-se o problema geral, dado pela Eq. (2.27), na forma

$$\nu(-\ln u) f(-\ln u) - \int_0^1 f(-\ln u') k_n(-\ln u', -\ln u) J(u') du' = r(-\ln u) \tag{2.44}$$

para $u \in [0,1]$, onde

$$J(u) = (1/u)(\ln u)^2 e^{-(\ln u)^2}. \tag{2.45}$$

Introduzindo a representação em splines [Anexo A]

$$f(-\ln u) = \sum_{k=0}^{K} a_k F_k(u) \tag{2.46}$$

na Eq. (2.44), obtém-se

$$\sum_{k=0}^{K} a_k[\nu(-\ln u)F_k(u) - U_k(u) - V_k(u)] = r(-\ln u) \tag{2.47}$$

onde

$$U_k(u) = \int_0^u F_k(u')k_n(-\ln u', -\ln u)J(u')du' \tag{2.48}$$

e

$$V_k(u) = \int_u^1 F_k(u')k_n(-\ln u', -\ln u)J(u')du'. \tag{2.49}$$

Usando o método da colocação propõe-se avaliar a Eq. (2.47) nos pontos (de colocação)

$$u_k = (k/K)^2, \quad k = 0, 1, ..., K, \tag{2.50}$$

e, conseqüentemente, resolver o sistema de equações algébricas resultante, objetivando encontrar os coeficientes $\{a_k\}$. Finalmente, após usar a Eq. (2.46), substituindo a referida aproximação no termo integral da Eq. (2.44), obtém-se o resultado pós-processado

$$f(c) = \{r(c) + \sum_{k=0}^{K} a_k[U_k(e^{-c}) + V_k(e^{-c})]\}/\nu(c) \tag{2.51}$$

válido para todo c. Tendo já definido toda a estrutura para o cálculo proposto nesta seção, passa-se agora a comentar importantes aspectos relevantes ao cálculo das funções U e V. Considerando $[\alpha_k, \beta_k]$ o intervalo de definição da função spline $F_k(x)$, ou seja,

$$F_k(x) = 0, \quad x \notin [\alpha_k, \beta_k], \tag{2.52}$$

pode-se, então, escrever

$$U_k(u) = 0, \quad u \leq \alpha_k, \tag{2.53}$$

e

$$U_k(u) = \int_{\alpha_k}^{\min\{u,\beta_k\}} F_k(u')k_n(-\ln u', -\ln u)J(u')du', \quad u > \alpha_k. \tag{2.54}$$

De forma semelhante, escreve-se

$$V_k(u) = 0, \quad u \geq \beta_k, \tag{2.55}$$

e

$$V_k(u) = \int_{\max\{u,\alpha_k\}}^{\beta_k} F_k(u')k_n(-\ln u', -\ln u)J(u')du', \quad u < \beta_k. \tag{2.56}$$

Como as funções splines têm definições diferentes em cada um dos subintervalos $[\alpha_k, \beta_k]$, propõe-se, com o intuito de avaliar as integrais requeridas, o uso do esquema de quadratura de Gauss-Legendre sobre cada um desses subintervalos. Assim, bons resultados podem ser obtidos para as funções U e V, mesmo usando um esquema de quadratura de ordem bem baixa, e este fato torna esta proposta [Siewert, 2002b] eficiente tanto quanto precisa.

2.3 Uma Expansão em Polinômios de Legendre

Inicia-se esta seção expressando uma solução em polinômios de Legendre (aproximada) para a Eq. (2.27), na forma [Barichello et al., 2003]

$$f(c) = \sum_{k=0}^{K} a_k P_k(2e^{-c} - 1), \tag{2.57}$$

sendo que as constantes $\{a_k\}$ devem ser determinadas. Expansões como essa também foram usadas nas Refs. [Siewert, 2003a] e [Siewert, 2003b], na solução de vários problemas da dinâmica de gases rarefeitos relacionados com a equação de Boltzmann linearizada e com a lei de interação baseada no modelo de esferas rígidas. Para calcular os coeficientes $\{a_k\}$ necessários na Eq. (2.57), substitui-se a Eq. (2.57) na Eq. (2.27), multiplica-se a equação resultante por

$$\mathbf{W}(c) = \mathbf{P}^T(c)c^2e^{-c^2}, \tag{2.58}$$

onde o superescrito T denota a operação transposta e

$$\mathbf{P}(c) = [P_0(2e^{-c} - 1), P_1(2e^{-c} - 1), ..., P_K(2e^{-c} - 1)], \tag{2.59}$$

e integra-se para todo c, de onde se obtém o seguinte sistema de equações algébricas lineares

$$(\mathbf{S} - \mathbf{M}_n)\mathbf{V} = \mathbf{R}. \tag{2.60}$$

Aqui, o vetor $\mathbf{V}$ contém as constantes $\{a_k\}$,

$$\mathbf{S} = \int_0^\infty e^{-c^2}\mathbf{P}^T(c)\mathbf{P}(c)\nu(c)c^2 dc, \tag{2.61}$$

$$\mathbf{R} = \int_0^\infty e^{-c^2}\mathbf{P}^T(c)r(c)c^2 dc, \tag{2.62}$$

e

$$\mathbf{M}_n = \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-c^2}e^{-c'^2}\mathbf{P}^T(c)\mathbf{P}(c')k_n(c',c)c^2c'^2dc'dc. \tag{2.63}$$

Sendo que as funções $k_n(c', c)$ são tais que $k_n(c', c) = k_n(c, c')$ para $c' < c$, pode-se observar que as matrizes $\mathbf{M}_n$ são simétricas, e, portanto, o trabalho numérico requerido para avaliar essas matrizes torna-se reduzido.

Tendo-se resolvido o sistema linear dado pela Eq. (2.60), uma primeira solução pode ser dada pela Eq. (2.57), porém um resultado aperfeiçoado por um pós processamento pode ser obtido usando-se a Eq. (2.57) na Eq. (2.27), ou seja,

$$f(c) = [r(c) + \sum_{k=0}^{K} a_k I_k(c)]/\nu(c) \tag{2.64}$$

onde

$$I_k(c) = \int_0^\infty e^{-c'^2}P_k(2e^{-c'} - 1)k_n(c', c)c'^2dc'. \tag{2.65}$$

2.4 Resultados Numéricos

Neste capítulo, foram apresentadas duas formas diferenciadas de se avaliar as equações de Chapman-Enskog para a viscosidade e condutividade térmica, bem como de se avaliar as equações de Burnett.

Na primeira abordagem [Siewert, 2002b], foram usadas as splines cúbicas de Hermite e o método da colocação, sendo necessária somente a indicação de dois parâmetros: o número de nós $M+1$ e a ordem $\aleph$ do esquema de quadratura de Gauss-Legendre para avaliação das funções U e V. Contudo, buscando-se evitar as desvantagens que o método da colocação pode algumas vezes causar (em relação à escolha dos pontos de colocação), na segunda abordagem foi proposta uma expansão em Polinômios de Legendre [Barichello et al., 2003], sendo, também neste caso, necessária somente a indicação de dois parâmetros: a ordem K na expansão em Polinômios de Legendre e o número $\aleph$ de pontos na quadratura de Gauss-Legendre usado durante a avaliação das integrais envolvidas na determinação dos coeficientes $\{a_k\}$.

Na avaliação da equação de Chapman-Enskog para condutividade térmica e da primeira equação de Burnett, em ambas as abordagens, foi necessário um pequeno esforço adicional para que o resultado final viesse a satisfazer, respectivamente, a Eq. (2.39) e a Eq. (2.41). Sendo que a Eq. (2.32) mostra que c é uma solução da versão homogênea das Eqs. (2.38) e (2.40), pode-se escrever

$$ca(c) = c\widehat{a}(c) - \widehat{a}c \tag{2.66}$$

e

$$c^3 d(c) = c^3 \widehat{d}(c) - \widehat{d}c, \tag{2.67}$$

onde $\widehat{a}(c)$ e $\widehat{d}(c)$ são obtidas pelas Eqs. (2.46) ou (2.51) na abordagem usando splines, ou, ainda, pelas Eqs. (2.57) ou (2.64) na abordagem usando os polinômios de Legendre. Prosseguindo, pode-se usar as condições de normalização listadas nas Eqs. (2.39) e (2.41) para definir respectivamente as constantes $\widehat{a}$ e $\widehat{d}$. Assim, substituindo-se a Eq. (2.66) na Eq. (2.39), e a Eq. (2.67) na Eq. (2.41), obtém-se

$$\widehat{a} = -\frac{8}{3}\pi^{-1/2}\int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^4 dc \tag{2.68}$$

e

$$\widehat{d} = -\frac{8}{3}\pi^{-1/2}\int_0^\infty e^{-c^2} d(c) c^6 dc. \tag{2.69}$$

Portanto, os resultados finais para $ca(c)$ e $c^3d(c)$, expressos pelas Eqs. (2.66) e (2.67), tornam-se completamente definidos.

Para efeito de comparação com a literatura, na Tabela 2.1 estão listados alguns resultados numéricos de implementações em FORTRAN referentes às quantidades $c^2b(c)$, $ca(c)$, $c^3d(c)$ e $c^3e(c)$ encontrados na primeira abordagem com os parâmetros $M = 300$ e $\aleph = 4$, bem como na segunda abordagem com $K = 90$ e $\aleph = 120$ (mesmos resultados nas duas abordagens). Os resultados de três das quatro colunas da Tabela 2.1 estão consistentes com os resultados apresentados por Loyalka e Hickey na Ref. [Loyalka e Hickey, 1989], mas os resultados da terceira coluna (quando divididos por ε_p) não concordam com os que estão na segunda coluna da Tabela 1 desta mesma Referência. Entretanto, segundo Siewert [Siewert, 2002b], os resultados numéricos apresentados aqui estão em perfeita concordância com os resultados apresentados por Ohwada e Sone na Ref. [Ohwada e Sone, 1992].

Grande parte da dificuldade numérica na avaliação dessas funções está ligada ao tratamento das componentes $k_n(c', c)$, e, conseqüentemente, ao tratamento das integrais que as contêm, sendo necessário, durante a avaliação dessas integrais, sob pena de se perder precisão, uma quebra nos intervalos de integração justamente nos locais onde $c' = c$. Assim, com base em todo esforço dedicado durante a avaliação numérica das componentes $k_n(c', c)$ (que possuem derivadas descontínuas em $c' = c$ até mesmo para pequenos valores de n), salienta-se que mesmo truncando o núcleo de espalhamento dado pela Eq. (2.3) após alguns termos, o problema de resolver a equação linearizada de Boltzmann permanece ainda difícil do ponto de vista numérico.

Enfatiza-se, então, a importância da utilização bem como do desenvolvimento de novas equações modelos que visam à simplificação do termo de colisão da equação de Boltzmann linearizada. Seguindo esta idéia (da utilização de equações modelo), aborda-se no próximo capítulo problemas da dinâmica de gases rarefeitos, descritos em geometria cilíndrica, com a utilização da forma integral da equação associada a uma equação modelo.

Tabela 2.1 – Resultados para as Funções de Chapman-Enskog e de Burnett

c	$ca(c)$	$c^2b(c)$	$c^3d(c)$	$c^3e(c)$
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.100	–2.157649(–1)	6.195829(–3)	–1.843725(–1)	6.343351(–4)
0.200	–4.242989(–1)	2.466807(–2)	–3.611823(–1)	5.016259(–3)
0.300	–6.186095(–1)	5.508042(–2)	–5.232815(–1)	1.661186(–2)
0.400	–7.921517(–1)	9.690213(–2)	–6.642904(–1)	3.837047(–2)
0.500	–9.389864(–1)	1.494472(–1)	–7.788429(–1)	7.256883(–2)
0.600	–1.053877	2.119202(–1)	–8.627076(–1)	1.207471(–1)
0.700	–1.132324	2.834619(–1)	–9.127896(–1)	1.837290(–1)
0.800	–1.170547	3.631912(–1)	–9.270432(–1)	2.617043(–1)
0.900	–1.165432	4.502387(–1)	–9.043268(–1)	3.543473(–1)
1.000	–1.114455	5.437725(–1)	–8.442335(–1)	4.609468(–1)
1.100	–1.015593	6.430146(–1)	–7.469235(–1)	5.805298(–1)
1.200	–8.672413(–1)	7.472510(–1)	–6.129716(–1)	7.119675(–1)
1.300	–6.681341(–1)	8.558355(–1)	–4.432399(–1)	8.540611(–1)
1.400	–4.172767(–1)	9.681900(–1)	–2.387759(–1)	1.005605
1.450	–2.721903(–1)	1.025618	–1.238779(–1)	1.084553
1.490	–1.466085(–1)	1.072107	–2.601601(–2)	1.149106
1.500	–1.138869(–1)	1.083802	–7.351806(–4)	1.165430
1.550	5.770553(–2)	1.142685	1.305002(–1)	1.248100
1.600	2.426514(–1)	1.202218	2.696756(–1)	1.332434
1.700	6.528254(–1)	1.323043	5.712385(–1)	1.505600
1.800	1.117024	1.445929	9.027520(–1)	1.684000
1.900	1.635558	1.570574	1.263048(–1)	1.866799
1.950	1.915282	1.633472	1.453637	1.959612
2.000	2.208681	1.696714	1.651005	2.053253
2.500	5.899307	2.342811	3.970062	3.020008
3.000	1.097512(1)	3.002212	6.842049	4.008393
3.500	1.744438(1)	3.665129	1.018088(1)	4.991261
4.000	2.531190(1)	4.326807	1.392144(1)	5.957431
4.500	3.458077(1)	4.985040	1.801342(1)	6.903581
5.000	4.525312(1)	5.638929	2.241714(1)	7.830029

CAPÍTULO 3

Gases Rarefeitos em Meio Cilíndrico

Como mencionado na introdução deste trabalho, neste capítulo propõe-se desenvolver uma equação integral, baseada no modelo BGK, para descrever o fluxo de um gás rarefeito em um tubo cilíndrico. Assim, de acordo com Williams [Williams, 1971], pode-se partir da equação de Boltzmann e, através de uma linearização em torno de uma Maxweliana local, chegar a uma nova equação dada em termos da perturbação $h(r, \mathbf{c})$, onde $\mathbf{c} = (\xi, c_z, \phi)$ é o vetor velocidade (como na Figura 3.1). Então, definindo

$$g(r, \xi, \phi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c_z^2} h(r, \mathbf{c}) c_z dc_z \tag{3.1}$$

onde c_z é a componente de $\mathbf{c}$ paralela ao eixo central do tubo, obtém-se a seguinte equação integro-diferencial

$$\xi(\cos\phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\operatorname{sen}\phi \frac{\partial}{\partial \phi}) g(r, \xi, \phi) + g(r, \xi, \phi) = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} e^{-\xi'^2} g(r, \xi', \phi')\xi' d\xi' d\phi' + Q(\xi). \tag{3.2}$$

Aqui $\xi \in [0, \infty)$ e $\phi \in [0, 2\pi]$, enquanto que $r \in [0, R]$ simboliza a distância radial em relação ao centro do tubo.

Figura 3.1 – Coordenadas: Cilindro de raio R onde $\mathbf{c}$ denota a direção do movimento de uma partícula de gás

Está-se ainda assumindo neste trabalho que o termo não homogêneo $Q(\xi)$ na Eq. (3.2) é conhecido e que a condição de contorno referente à Eq. (3.2) tem a forma

$$g(R, \xi, \phi) = f(\xi, \phi), \quad \phi \in (\pi/2, 3\pi/2) \;\; e \;\; \xi \in [0, \infty), \tag{3.3}$$

onde $f(\xi,\phi)$ é também considerada conhecida. Impondo agora a condição de simetria

$$f(\xi,2\pi-\phi)=f(\xi,\phi),\quad \phi\in(\pi/2,\pi], \tag{3.4}$$

pode-se concluir pelas Eqs. (3.2) e (3.4) que

$$g(r,\xi,2\pi-\phi)=g(r,\xi,\phi),\quad \phi\in[0,\pi], \tag{3.5}$$

para todo r e ξ. E assim, fazendo $\mu=\cos\phi$, para $\phi\in[0,\pi]$, e

$$G(r,\xi,\mu)=g(r,\xi,\arccos\mu),\quad \mu\in[-1,1], \tag{3.6}$$

as Eqs. (3.2) e (3.3) podem ser reescritas como

$$\xi(\mu\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1-\mu^2}{r}\frac{\partial}{\partial\mu})G(r,\xi,\mu)+G(r,\xi,\mu)=\int_{-1}^{1}\int_{0}^{\infty}\Psi(\xi^{'},\mu^{'})G(r,\xi^{'},\mu^{'})d\xi^{'}d\mu^{'}+Q(\xi), \tag{3.7}$$

para $\mu\in[-1,1],\xi\in[0,\infty)$ e $r\in(0,R)$, e

$$G(R,\xi,-\mu)=F(\xi,\mu),\quad \mu\in(0,1]\ \ e\ \ \xi\in[0,\infty). \tag{3.8}$$

Aqui

$$\Psi(\xi,\mu)=\frac{2\xi e^{-\xi^2}}{\pi(1-\mu^2)^{1/2}} \tag{3.9}$$

e

$$F(\xi,\mu)=f(\xi,\pi-\arccos\mu),\quad \mu\in(0,1]. \tag{3.10}$$

Sendo que as Eqs. (3.7) e (3.8) estão na forma usualmente encontrada nas aplicações do modelo BGK em geometria cilíndrica, procede-se agora de forma a desenvolver uma equação integral para este problema.

3.1 Desenvolvimento da Equação Integral

Para reformular o problema BGK definido pelas Eqs. (3.7) e (3.8) em termos de uma equação integral, inicia-se aqui usando o método das características [Debnath, 1997] fazendo $\mu = \eta(r)$ e

$$\widehat{G}(r) = G[r, \xi, \eta(r)] \tag{3.11}$$

podendo-se, assim, escrever

$$\frac{d}{dr}\widehat{G}(r) = \frac{\partial}{\partial r}G(r, \xi, \eta) + \frac{d\eta}{dr}\frac{\partial}{\partial \eta}G(r, \xi, \eta). \tag{3.12}$$

Tomando neste ponto

$$\frac{d\eta}{dr} = \frac{1 - \eta^2}{r\eta} \tag{3.13}$$

pode-se reescrever a Eq. (3.12) como

$$\frac{d}{dr}\widehat{G}(r) = \frac{1}{\eta}\left[\eta\frac{\partial}{\partial r}G(r, \xi, \eta) + \frac{1 - \eta^2}{r}\frac{\partial}{\partial \eta}G(r, \xi, \eta)\right] \tag{3.14}$$

ou, após usar a Eq. (3.7),

$$\frac{d}{dr}\widehat{G}(r) + \frac{1}{\xi\eta(r)}\widehat{G}(r) = H(r) \tag{3.15}$$

onde

$$H(r) = \frac{1}{\xi\eta(r)}\left[\int_{-1}^{1}\int_{0}^{\infty}\Psi(\xi', \mu')G(r, \xi', \mu')d\xi' d\mu' + Q(\xi)\right]. \tag{3.16}$$

Resolvendo a Eq. (3.13) obtém-se

$$\eta(r) = \pm\nu(r) \tag{3.17}$$

sendo que

$$\nu(r) = \frac{1}{r}(r^2 - a^2)^{1/2} \tag{3.18}$$

onde a é uma constante arbitrária. Calculando-se o fator integrante, a Eq. (3.15) pode ser reescrita na forma

$$\frac{d}{dr}\left(\widehat{G}(r)\exp\{\pm r\nu(r)/\xi\}\right) = H(r)\exp\{\pm r\nu(r)/\xi\}, \tag{3.19}$$

e, assim, após observada a Eq. (3.11), reescreve-se a Eq. (3.19) como

$$\frac{d}{dr}\Big(G[r,\xi,\pm\nu(r)]\exp\{\pm r\nu(r)/\xi\}\Big) = \pm\frac{1}{\xi\nu(r)}S(r,\xi)\exp\{\pm r\nu(r)/\xi\} \tag{3.20}$$

onde

$$S(r,\xi) = \int_{-1}^{1}\int_{0}^{\infty}\Psi(\xi',\mu')G(r,\xi',\mu')d\xi'd\mu' + Q(\xi). \tag{3.21}$$

Integrando-se a versão de sinal positivo da Eq. (3.20) encontra-se

$$G[r,\xi,\nu(r)] = A[r,\xi,\nu(r)] + \frac{1}{\xi}\int_{a}^{r} S(x,\xi)\exp\{-[r\nu(r) - x\nu(x)]/\xi\}\frac{dx}{\nu(x)}, \tag{3.22}$$

e semelhantemente integrando-se a versão de sinal negativo obtém-se

$$G[r,\xi,-\nu(r)] = G_m[r,\xi,-\nu(r)] + \frac{1}{\xi}\int_{r}^{R} S(x,\xi)\exp\{-[x\nu(x) - r\nu(r)]/\xi\}\frac{dx}{\nu(x)} \tag{3.23}$$

onde a Eq. (3.8) foi usada juntamente com as definições

$$A[r,\xi,\nu(r)] = G(a,\xi,0)\exp\{-r\nu(r)/\xi\} \tag{3.24}$$

e

$$G_m[r,\xi,-\nu(r)] = F[\xi,\nu(R)]\exp\{-[R\nu(R) - r\nu(r)]/\xi\}. \tag{3.25}$$

Voltando a usar a Eq. (3.17) e $\eta(r) = \mu$, pode-se reescrever as Eqs. (3.22) e (3.23) como

$$G(r,\xi,\mu) = A(r,\xi,\mu) + \frac{1}{\xi}\int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^{r} S(x,\xi)\exp\{-[r\mu - x\mu_0(x,r,\mu)]/\xi\}\frac{dx}{\mu_0(x,r,\mu)} \tag{3.26}$$

e

$$G(r,\xi,-\mu) = G_m(r,\xi,-\mu) + \frac{1}{\xi}\int_{r}^{R} S(x,\xi)\exp\{-[x\mu_0(x,r,\mu) - r\mu]/\xi\}\frac{dx}{\mu_0(x,r,\mu)} \tag{3.27}$$

para $\mu \in [0,1]$ onde

$$a = r(1-\mu^2)^{1/2}, \tag{3.28}$$

$$A(r,\xi,\mu) = G[r(1-\mu^2)^{1/2},\xi,0]\exp\{-r\mu/\xi\}, \tag{3.29}$$

$$G_m(r,\xi,-\mu) = F[\xi,\mu_0(R,r,\mu)]\exp\{-[R\mu_0(R,r,\mu) - r\mu]/\xi\} \tag{3.30}$$

e ainda

$$\mu_0(x,r,\mu) = \frac{1}{x}(x^2 - r^2 + r^2\mu^2)^{1/2}. \tag{3.31}$$

Fazendo $\mu = 0$ na Eq. (3.27) encontra-se

$$G(r,\xi,0) = G_m(r,\xi,0) + \frac{1}{\xi}\int_r^R S(x,\xi)\exp\{-[x\mu_0(x,r,0)]/\xi\}\frac{dx}{\mu_0(x,r,0)}. \tag{3.32}$$

Substituindo r na Eq. (3.32) por $r(1-\mu)^{1/2}$ e usando a Eq. (3.30), pode-se reescrever a Eq. (3.29) como

$$A(r,\xi,\mu) = G_p(r,\xi,\mu) + \frac{1}{\xi}\int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^R S(x,\xi)\exp\{-[x\mu_0(x,r,\mu) + r\mu]/\xi\}\frac{dx}{\mu_0(x,r,\mu)} \tag{3.33}$$

onde

$$G_p(r,\xi,\mu) = F[\xi,\mu_0(R,r,\mu)]\exp\{-[R\mu_0(R,r,\mu) + r\mu]/\xi\}. \tag{3.34}$$

Finalmente, usando a Eq. (3.33), as Eqs. (3.26) e (3.27) podem ser reescritas como

$$G(r,\xi,\mu) = B(r,\xi,\mu) + (\pounds_p^1 S)(r,\xi,\mu) + (\pounds_p^2 S)(r,\xi,\mu) \tag{3.35}$$

e

$$G(r,\xi,-\mu) = B(r,\xi,-\mu) + (\pounds_m S)(r,\xi,-\mu) \tag{3.36}$$

para $\mu \in [0,1]$. Aqui

$$(\pounds_p^1 S)(r,\xi,\mu) = \frac{1}{\xi}\int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^r S(x,\xi)\exp\{-[r\mu - x\mu_0(x,r,\mu)]/\xi\}\frac{dx}{\mu_0(x,r,\mu)}, \tag{3.37}$$

$$(\pounds_p^2 S)(r,\xi,\mu) = \frac{1}{\xi}\int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^R S(x,\xi)\exp\{-[x\mu_0(x,r,\mu) + r\mu]/\xi\}\frac{dx}{\mu_0(x,r,\mu)}, \tag{3.38}$$

$$(\pounds_m S)(r,\xi,-\mu) = \frac{1}{\xi}\int_r^R S(x,\xi)\exp\{-[x\mu_0(x,r,\mu) - r\mu]/\xi\}\frac{dx}{\mu_0(x,r,\mu)} \tag{3.39}$$

e os termos conhecidos nas Eqs. (3.35) e (3.36) são dados por

$$B(r, \xi, \mu) = F[\xi, \mu_0(R, r, \mu)]\exp\{-[R\mu_0(R, r, \mu) + r\mu]/\xi\}. \tag{3.40}$$

Introduzindo novas variáveis de integração nas Eqs. (3.37), (3.38) e (3.39), ou seja

$$s = [r\mu - x\mu_0(x, r, \mu)]/\xi \tag{3.41}$$

na Eq. (3.37),

$$s = [r\mu + x\mu_0(x, r, \mu)]/\xi \tag{3.42}$$

na Eq. (3.38), e

$$s = [x\mu_0(x, r, \mu) - r\mu]/\xi \tag{3.43}$$

na Eq. (3.39), pode-se reescrever as Eqs. (3.35) e (3.36) como

$$G(r, \xi, \mu) = B(r, \xi, \mu) + \int_0^{s_0(r,\xi,\mu)} S[(r^2 + s^2\xi^2 - 2rs\xi\mu)^{1/2}, \xi]e^{-s}ds \tag{3.44}$$

e

$$G(r, \xi, -\mu) = B(r, \xi, -\mu) + \int_0^{s_0(r,\xi,-\mu)} S[(r^2 + s^2\xi^2 + 2rs\xi\mu)^{1/2}, \xi]e^{-s}ds \tag{3.45}$$

para $\mu \in [0, 1]$. Aqui

$$s_0(r, \xi, \mu) = [(R^2 - r^2 + r^2\mu^2)^{1/2} + r\mu]/\xi. \tag{3.46}$$

Buscando obter uma equação integral para

$$G(r) = \int_{-1}^{1}\int_0^{\infty} \Psi(\xi, \mu)G(r, \xi, \mu)d\xi d\mu \tag{3.47}$$

multiplica-se então as Eqs. (3.35) e (3.36) por $\Psi(\xi, \mu)$ e integra-se com relação a todo ξ e μ. Neste processo de combinar e simplificar as equações resultantes, primeiramente são encontradas três integrais a serem consideradas:

$$U(r, \xi) = \frac{1}{\xi}\int_0^1 \int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^{r} U(r, \xi, x, \mu)dxd\mu, \tag{3.48}$$

$$V(r,\xi) = \frac{1}{\xi}\int_0^1 \int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^R V(r,\xi,x,\mu)dxd\mu \tag{3.49}$$

e

$$W(r,\xi) = \frac{1}{\xi}\int_0^1 \int_r^R W(r,\xi,x,\mu)dxd\mu \tag{3.50}$$

onde

$$U(r,\xi,x,\mu) = S(x,\xi)\frac{\exp\{-[r\mu - x\mu_0(x,r,\mu)]/\xi\}}{\mu_0(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}}, \tag{3.51}$$

$$V(r,\xi,x,\mu) = S(x,\xi)\frac{\exp\{-[r\mu + x\mu_0(x,r,\mu)]/\xi\}}{\mu_0(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}} \tag{3.52}$$

e

$$W(r,\xi,x,\mu) = S(x,\xi)\frac{\exp\{-[x\mu_0(x,r,\mu) - r\mu]/\xi\}}{\mu_0(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}}. \tag{3.53}$$

Trocando a ordem de integração nas Eqs. (3.48) a (3.50), encontra-se

$$\xi U(r,\xi) = \int_0^r \int_{(1-x^2/r^2)^{1/2}}^1 U(r,\xi,x,\mu)d\mu dx, \tag{3.54}$$

$$\xi V(r,\xi) = \int_0^r \int_{(1-x^2/r^2)^{1/2}}^1 V(r,\xi,x,\mu)d\mu dx + \int_r^R \int_0^1 V(r,\xi,x,\mu)d\mu dx \tag{3.55}$$

e

$$\xi W(r,\xi) = \int_r^R \int_0^1 W(r,\xi,x,\mu)d\mu dx. \tag{3.56}$$

Definindo $X(r,\xi)$ como sendo $W(r,\xi)$ mais o segundo termo da Eq. (3.55), escreve-se

$$\xi X(r,\xi) = \int_r^R \int_{-1}^1 W(r,\xi,x,\mu)d\mu dx. \tag{3.57}$$

Trocando agora a variável μ na Eq. (3.57) com o uso da transformação

$$x\mu_0(x,r,\mu) - r\mu = p(x,r,\alpha) \tag{3.58}$$

onde

$$p(x, r, \alpha) = (x^2 + r^2 - 2xr\alpha)^{1/2}, \tag{3.59}$$

obtém-se [veja Anexo B]

$$\xi X(r, \xi) = \int_r^R xS(x, \xi) \int_{-1}^1 \frac{\exp\{-p(x, r, \alpha)/\xi\}}{p(x, r, \alpha)(1 - \alpha^2)^{1/2}} d\alpha dx. \tag{3.60}$$

Prosseguindo, troca-se μ por $-\mu$ no primeiro termo da Eq. (3.55), e, então, na expressão resultante, troca-se novamente a variável μ usando a transformação dada pela Eq. (3.58). Feitas estas alterações finalmente troca-se a variável μ da Eq. (3.54) usando a transformação

$$r\mu - x\mu_0(x, r, \mu) = p(x, r, \alpha) \tag{3.61}$$

e adiciona-se o resultado da versão transformada do primeiro termo da Eq. (3.55) obtendo assim

$$\xi Y(r, \xi) = \int_0^r xS(x, \xi) \int_{-1}^1 \frac{\exp\{-p(x, r, \alpha)/\xi\}}{p(x, r, \alpha)(1 - \alpha^2)^{1/2}} d\alpha dx. \tag{3.62}$$

Continuando com o desenvolvimento de uma equação integral para $G(r)$, usam-se agora as Eqs. (3.60) e (3.62) para reescrever a Eq. (3.47) como

$$G(r) = B(r) + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-\xi^2} \int_0^R xS(x, \xi) \int_{-1}^1 \frac{\exp\{-p(x, r, \mu)/\xi\}}{p(x, r, \mu)(1 - \mu^2)^{1/2}} d\mu dx d\xi. \tag{3.63}$$

Aqui

$$B(r) = \int_{-1}^1 \int_0^\infty \Psi(\xi, \mu) F[\xi, \mu_0(R, r, \mu)] \exp\{-s_0(r, \xi, \mu)\} d\xi d\mu \tag{3.64}$$

sendo que ainda foram usadas as Eqs. (3.31), (3.40) e (3.46).

Através de algumas identidades das funções de Bessel [Abramowitz e Stegun, 1964] pode-se encontrar uma forma mais conveniente de expressar a Eq. (3.63). Para isso, primeiramente nota-se em termos das funções de Bessel de segunda ordem modificadas

$$K_{1/2}(x) = \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} e^{-x} \tag{3.65}$$

e

$$K_{1/2}(x) = \left(\frac{2x}{\pi}\right)^{1/2} \int_1^\infty yK_0(yx)\frac{dy}{(y^2-1)^{1/2}}. \tag{3.66}$$

Usando então estas duas equações, pode-se reescrever a Eq. (3.63) como

$$G(r) = B(r) + \frac{4}{\pi^2}\int_0^\infty \frac{e^{-\xi^2}}{\xi}\int_0^R xS(x,\xi)\int_{-1}^1\int_1^\infty \frac{yK_0[yp(x,r,\mu)/\xi]}{(y^2-1)^{1/2}(1-\mu^2)^{1/2}}dyd\mu dxd\xi. \tag{3.67}$$

Introduzindo uma nova variável $\tau = \xi/y$, reescreve-se a Eq. (3.67) como

$$G(r) = B(r) + \frac{4}{\pi^2}\int_0^\infty \xi e^{-\xi^2}\int_0^R xS(x,\xi)\int_0^\xi \frac{1}{\tau^2(\xi^2-\tau^2)^{1/2}}\int_{-1}^1 \frac{K_0[p(x,r,\mu)/\tau]}{(1-\mu^2)^{1/2}}d\mu d\tau dxd\xi. \tag{3.68}$$

Na Ref. [Abramowitz e Stegun, 1964] encontra-se o teorema da adição escrito como

$$K_0[(x^2+r^2-2xr\cos\alpha)^{1/2}/\tau] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n(x/\tau, r/\tau)e^{in\alpha} \tag{3.69}$$

onde

$$F_n(x/\tau, r/\tau) = \begin{cases} I_n(x/\tau)K_n(r/\tau), & x < r, \\ K_n(x/\tau)I_n(r/\tau), & x > r, \end{cases} \tag{3.70}$$

e $I_n(x)$ e $K_n(x)$ são as funções de Bessel modificadas de primeiro e segundo tipo. Então, integrando a Eq. (3.69), obtém-se

$$\int_0^{2\pi} K_0[(x^2+r^2-2xr\cos\alpha)^{1/2}/\tau]d\alpha = 2\pi F_0(x/\tau, r/\tau) \tag{3.71}$$

ou

$$\int_{-1}^1 \frac{K_0[p(x,r,\mu)/\tau]}{(1-\mu^2)^{1/2}}d\mu = \pi F_0(x/\tau, r/\tau). \tag{3.72}$$

Usando a Eq. (3.72), pode-se reescrever a Eq. (3.68) como

$$G(r) = B(r) + \frac{4}{\pi}\int_0^\infty \xi e^{-\xi^2}\int_0^R xS(x,\xi)\int_0^\xi \frac{F_0(x/\tau, r/\tau)}{\tau^2(\xi^2-\tau^2)^{1/2}}d\tau dxd\xi. \tag{3.73}$$

Analisando a Eq. (3.21), tem-se que

$$S(x,\xi) = G(x) + Q(\xi), \tag{3.74}$$

e, assim, trocando algumas ordens de integração pode-se escrever a Eq. (3.73) como

$$G(r) = B(r) + C(r) + \frac{4}{\pi}\int_0^R xG(x)\int_0^\infty \frac{F_0(x/\tau, r/\tau)}{\tau^2}\int_r^\infty \frac{\xi e^{-\xi^2}}{(\xi^2-\tau^2)^{1/2}}d\xi d\tau dx \tag{3.75}$$

onde o termo conhecido que resulta do termo não homogêneo da Eq. (3.2) é

$$C(r) = \frac{4}{\pi}\int_0^R x\int_0^\infty \frac{F_0(x/\tau, r/\tau)}{\tau^2}\int_r^\infty \frac{\xi Q(\xi) e^{-\xi^2}}{(\xi^2-\tau^2)^{1/2}}d\xi d\tau dx. \tag{3.76}$$

Agora, pode-se avaliar a integral com relação a ξ na Eq. (3.75) para obter, assim, a equação integral desejada para $G(r)$, ou seja

$$G(r) = B(r) + C(r) + \int_0^R xG(x)K(x \to r)dx \tag{3.77}$$

onde o núcleo da equação integral é

$$K(x \to r) = \frac{2}{\pi^{1/2}}\int_0^\infty e^{-\tau^2}F_0(x/\tau, r/\tau)\frac{d\tau}{\tau^2} \tag{3.78}$$

e os dois termos não homogêneos $B(r)$ e $C(r)$ são dados pelas Eqs. (3.64) e (3.76).

3.2 Fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico

Tendo obtido para o caso geral a equação integral para $G(r)$, propõe-se, agora, trabalhar em dois casos especiais conhecidos na literatura como fluxo de Poiseuille, que descreve o movimento de um gás em um tubo devido à influência de um gradiente de pressão, e “creep” térmico, que retrata fisicamente um efeito de superfície que surge quando um gradiente de temperatura faz com que um gás se movimente em relação a uma parede fixa. Assim, seja [Williams, 1971]

$$Q(\xi) = \frac{1}{2}[k_1 - k_2(\xi^2 - 1)] \tag{3.79}$$

o termo de fonte não homogêneo da Eq. (3.2) onde k_1 e k_2 são constantes que, alternadamente, podem assumir os valores 0 e 1, dependendo da aplicação desejada (ou fluxo de Poiseuille ou “creep” térmico, como será especificado posteriormente). Substituindo então a

Eq. (3.79) na Eq. (3.76) e usando a indentidade

$$x[K_0(x)I_1(x) + I_0(x)K_1(x)] = 1, \tag{3.80}$$

encontra-se

$$C(r) = \frac{k_1}{2} - \frac{R}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} K_1(R/\tau) I_0(r/\tau)[k_1 - k_2(\tau^2 - \frac{1}{2})] \frac{d\tau}{\tau}. \tag{3.81}$$

Substituindo

$$G(r) = \frac{1}{\pi^{1/2}} Z(r) - \frac{1}{4}(2k_1 + k_2) \tag{3.82}$$

na Eq. (3.77) e usando a Eq. (3.81), obtém-se

$$Z(r) = \int_0^R x Z(x) K(x \to r) dx + S(r) \tag{3.83}$$

onde o termo conhecido é

$$S(r) = \pi^{1/2} B(r) + \frac{\pi^{1/2}}{2} k_1 + k_2 R \int_0^\infty \tau e^{-\tau^2} K_1(R/\tau) I_0(r/\tau) d\tau. \tag{3.84}$$

Com base nestas formulações gerais a forma integral associada ao problema do fluxo de Poiseuille pode ser obtida tomando-se $B(r) = 0$, $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$, e, assim, pelas Eqs. (3.82), (3.83) e (3.84) tem-se

$$G_P(r) = \frac{1}{\pi^{1/2}} Z_P(r) - \frac{1}{2}, \tag{3.85}$$

$$Z_P(r) = \int_0^R x Z_P(x) K(x \to r) dx + S_P(r) \tag{3.86}$$

e

$$S_P(r) = \frac{1}{2} \pi^{1/2}. \tag{3.87}$$

De forma semelhante, para que seja obtida a forma integral associada ao problema "creep" térmico, toma-se os valores $B(r) = 0$, $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$ e pelas Eqs. (3.82), (3.83) e (3.84) encontra-se

$$G_T(r) = \frac{1}{\pi^{1/2}} Z_T(r) - \frac{1}{4}, \tag{3.88}$$

$$Z_T(r) = \int_0^R x Z_T(x) K(x \to r) dx + S_T(r) \tag{3.89}$$

e

$$S_T(r) = R \int_0^\infty \tau e^{-\tau^2} K_1(R/\tau) I_0(r/\tau) d\tau. \tag{3.90}$$

As Eqs. (3.85) e (3.88) são exatamente as mesmas equações abordadas na Ref. [Siewert, 2000], sendo que, a partir delas e das transformações de Mitsis [Mitsis, 1963] e de Ferziger [Ferziger, 1967], foram originados os problemas auxiliares ("pseudo" problemas) solucionados no referido trabalho e na Ref. [Camargo et al., 2000] através do método de ordenadas discretas, o que será brevemente enfatizado na próxima seção.

3.2.1 Reformulação dos Problemas Fluxo de Poiseuille e "Creep" Térmico

Com base nas Eqs. integrais (3.86) e (3.89) e nas Refs. [Valougeorgis e Thomas Jr., 1986] e [Loyalka, 1975], definem-se quantidades de interesse físico tais como perfil de velocidade e taxa de fluxo, respectivamente, na forma

$$q_P(r) = \pi^{-1/2} Z_P(r) - \frac{1}{2} \tag{3.91}$$

e

$$Q_P = \frac{4}{R^3} \int_0^R q_P(r) r dr \tag{3.92}$$

para o problema do fluxo de Poiseuille e ainda

$$q_T(r) = \pi^{-1/2} Z_T(r) - \frac{1}{4} \tag{3.93}$$

e

$$Q_T = \frac{4}{R^3} \int_0^R q_T(r) r dr \tag{3.94}$$

para o problema “creep” térmico.

Buscando avaliar estas expressões, na Ref. [Siewert, 2000], o problema definido pela Eq. (3.83) foi reformulado em termos de um “pseudo” problema originado inicialmente pela seguinte transformação proposta por Ferziger [Ferziger, 1967]

$$\Phi(r,\xi) = \xi^{-2}\Big[K_0(r/\xi)\int_0^r xZ(x)I_0(x/\xi)dx + I_0(r/\xi)\int_r^R xZ(x)K_0(x/\xi)dx\Big]. \tag{3.95}$$

Derivando-se duas vezes esta expressão e usando a Eq. (3.83), pode-se concluir que $\Phi(r,\xi)$ satisfaz o problema

$$\xi^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\Phi(r,\xi) + \frac{\xi^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\Phi(r,\xi) - \Phi(r,\xi) + 2\int_0^\infty \Psi(u)\Phi(r,u)du = -S(r), \tag{3.96}$$

para $\xi \in [0,\infty)$, e que

$$Z(r) = 2\int_0^\infty \Psi(\xi)\Phi(r,\xi)d\xi + S(r) \tag{3.97}$$

onde

$$\Psi(u) = \pi^{-1/2}e^{-u^2}. \tag{3.98}$$

Ainda, da definição de $\Phi(r,\xi)$ dada pela Eq. (3.95) deduz-se uma condição de contorno sujeita à qual a Eq. (3.96) deve ser resolvida, ou seja,

$$\Phi(R,\xi) + \xi\Gamma(\xi)\frac{\partial}{\partial r}\Phi(r,\xi)\big|_{r=R} = 0 \tag{3.99}$$

para $\xi \in [0,\infty)$ onde

$$\Gamma(\xi) = \frac{K_0(R/\xi)}{K_1(R/\xi)}. \tag{3.100}$$

Neste ponto, segundo a Ref. [Siewert, 2000], pode-se obter uma versão homogênea para a Eq. (3.96) usando a seguinte solução particular reportada por Valougeorgis e Thomas Jr. [Valougeorgis e Thomas Jr., 1986]

$$G_P(r,\xi) = -\frac{1}{4}\pi^{-1/2}(r^2 - R^2 + 4\xi^2) \tag{3.101}$$

para o problema do fluxo de Poiseuille e

$$G_T(r,\xi) = -\frac{1}{2}\pi^{1/2}R\xi K_1(R/\xi)I_0(r/\xi) \tag{3.102}$$

para o problema “creep” térmico. Assim, substituindo a decomposição geral

$$\Phi(r,\xi) = Y(r,\xi) + G(r,\xi) \tag{3.103}$$

nas Eqs. (3.96) e (3.99) obtém-se

$$\xi^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}Y(r,\xi) + \frac{\xi^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}Y(r,\xi) - Y(r,\xi) + 2\int_0^\infty \Psi(u)Y(r,u)du = 0 \tag{3.104}$$

para $\xi \in [0,\infty)$, com condição de contorno

$$Y(R,\xi) + \xi\Gamma(\xi)\frac{\partial}{\partial r}Y(r,\xi)\Big|_{r=R} = F(\xi) \tag{3.105}$$

para $\xi \in [0,\infty)$ onde

$$F_P(\xi) = \frac{1}{2}\pi^{1/2}\xi[2\xi + R\Gamma(\xi)] \tag{3.106}$$

para o problema do fluxo de Poiseuille e

$$F_T(\xi) = \frac{1}{2}\pi^{1/2}\xi^2 \tag{3.107}$$

para o problema “creep” térmico.

Usando agora as Eqs. (3.97), (3.98), (3.101) e (3.103) na Eq. (3.91), pode-se expressar o perfil de velocidade em termos de $Y(r,\xi)$ na forma

$$q_P(r) = Y_P(r) - \frac{1}{4}(r^2 - R^2 + 2), \tag{3.108}$$

e usando a Eq. (3.92), pode-se expressar a taxa de fluxo como

$$Q_P = \frac{4}{R^3}\int_0^R Y_P(r)rdr + \frac{1}{4R}(R^2 - 4) \tag{3.109}$$

onde

$$Y_P(r) = 2\pi^{-1/2}\int_0^\infty \Psi(\xi)Y_P(r,\xi)d\xi. \tag{3.110}$$

De forma semelhante, pode-se usar as Eqs. (3.97), (3.98), (3.102) e (3.103) na Eq. (3.93) para obter

$$q_T(r) = Y_P(r) - \frac{1}{4} \tag{3.111}$$

e, conseqüentemente,

$$Q_T = \frac{4}{R^3}\int_0^R Y_T(r) r dr - \frac{1}{2R} \tag{3.112}$$

onde

$$Y_T(r) = 2\pi^{-1/2}\int_0^\infty \Psi(\xi) Y_T(r,\xi) d\xi. \tag{3.113}$$

A partir destas expressões para as quantidades de interesse físico obtidas em função de $Y(r,\xi)$ para ambos os problemas fluxo de Poiseuille e "creep" térmico, pode-se acompanhar na Ref. [Siewert, 2000] a obtenção detalhada da seguinte solução em ordenadas discretas para o "pseudo" problema geral dado pelas Eqs. (3.104) e (3.105)

$$Y(r,\xi_i) = A + \sum_{j=1}^{N-1} A_j \phi(\nu_j,\xi_i) \widehat{I}_0(r/\nu_j) e^{-(R-r)/\nu_j} \tag{3.114}$$

sendo que as constantes A e A_j podem ser determinadas a partir da avaliação da condição de contorno dada pela Eq. (3.105) nos pontos de quadratura ξ_i. As componentes independentes da parte espacial $\phi(\nu_j,\xi_i)$ podem ser obtidas pela expressão

$$\phi(\nu_j,\xi_i) = \frac{\nu_j^2}{\nu_j^2 - \xi_i^2} \tag{3.115}$$

e as constantes de separação ν_j podem ser calculadas através da resolução de um problema especial de autovalores (que será tratado no próximo capítulo). Assim, em função da solução dada pela Eq. (3.114), pode-se encontrar [Siewert, 2000]

$$q_P(r) = \pi^{-1/2}\big[A + \sum_{j=1}^{N-1} A_j \widehat{I}_0(r/\nu_j) e^{-(R-r)/\nu_j}\big] - \frac{1}{4}(r^2 - R^2 + 2) \tag{3.116}$$

e

$$Q_P = \frac{2\pi^{-1/2}}{R^2}\big[AR + 2\sum_{j=1}^{N-1} A_j \nu_j \widehat{I}_1(R/\nu_j)\big] + \frac{1}{4R}(R^2 - 4) \tag{3.117}$$

para o problema do fluxo de Poiseuille e

$$q_T(r) = \pi^{-1/2}\big[A + \sum_{j=1}^{N-1} A_j \widehat{I}_0(r/\nu_j) e^{-(R-r)/\nu_j}\big] - \frac{1}{4} \tag{3.118}$$

e

$$Q_T = \frac{2\pi^{-1/2}}{R^2}\big[AR + 2\sum_{j=1}^{N-1} A_j \nu_j \widehat{I}_1(R/\nu_j)\big] - \frac{1}{2R} \tag{3.119}$$

para o problema "creep" térmico.

A título de ilustração, na Tabela 3.1 estão listados alguns valores para os perfis de velocidade $q_P(R)$ e $q_T(R)$ e para as taxas de fluxo Q_P e Q_T obtidos na Ref. [Siewert, 2000] com a aplicação da nova versão do método de ordenadas discretas [Barichello e Siewert, 1999a]. Na Ref. [Camargo et al., 2000] o problema do fluxo de Poiseuille também foi investigado com a aplicação do mesmo método, porém com a utilização de um esquema de quadratura diferente. Como todos os valores de $q_P(R)$ e Q_P encontrados na Ref. [Siewert, 2000] foram confirmados (em todos os dígitos dados) pela Ref. [Camargo et al., 2000], este fato vem a valorizar ainda mais uma das vantagens do uso da reformulação do método de ordenadas discretas, que é a utilização de esquemas de quadratura mais arbitrários.

3.3 Superfícies Refletoras

Os casos especiais discutidos na seção 3.2 são definidos por situações onde o termo não homogêneo na condição de contorno da formulação geral é nulo ($B(r) = 0$). Entretanto, admitindo-se reflexão na superfície do tubo, pode-se ter

$$F(\xi, \mu) = (1 - \alpha)G(R, \xi, \mu), \quad \mu \in [0, 1], \tag{3.120}$$

e, então, a Eq. (3.77) deve ser modificada uma vez que $B(r)$, como dado pela Eq. (3.64), não pode ser considerado um termo conhecido. Continuando o desenvolvimento, encontra-se

Tabela 3.1 – Problemas de Poiseuille e "Creep" Térmico: Velocidades de deslizamento na parede $q_P(R)$ e $q_T(R)$ e as taxas de fluxo Q_P e Q_T

R	$q_P(R)$	$q_T(R)$	Q_P	Q_T
1.0	4.048069(-1)	8.024270(-2)	1.458291	3.217264(-1)
2.0	7.651726(-1)	9.662684(-2)	1.657647	2.271179(-1)
3.0	1.119114	1.026102(-1)	1.879988	1.766334(-1)
4.0	1.471454	1.052977(-1)	2.111623	1.445407(-1)
5.0	1.823461	1.066763(-1)	2.348327	1.222287(-1)
6.0	2.175514	1.074573(-1)	2.588211	1.058073(-1)

pelas Eqs. (3.35) e (3.40), que

$$F(\xi,\mu) = \frac{(1-\alpha)[(\pounds_p^1 S)(R,\xi,\mu) + (\pounds_p^2 S)(R,\xi,\mu)]}{1-(1-\alpha)\exp\{-2R\mu/\xi\}}. \tag{3.121}$$

Fazendo

$$\Delta(x,\xi,\mu) = \frac{1}{\xi} S(x,\xi) \frac{\exp\{-R\mu/\xi\}}{\mu_0(x,R,\mu)} [\exp\{x\mu_0(x,R,\mu)/\xi\} + \exp\{-x\mu_0(x,R,\mu)/\xi\}] \tag{3.122}$$

reescreve-se a Eq. (3.121) como

$$F(\xi,\mu) = \frac{1-\alpha}{1-(1-\alpha)\exp\{-2R\mu/\xi\}} \int_{R(1-\mu^2)^{1/2}}^{R} \Delta(x,\xi,\mu)dx. \tag{3.123}$$

E, assim, a Eq. (3.64) pode ser escrita como

$$B(r) = (1-\alpha) \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_{r(1-\mu^2)^{1/2}}^{R} \Psi(\xi,\mu)\Gamma(x,\xi,r,\mu)\exp\{-2R\mu_0(R,r,\mu)/\xi\} dx d\mu d\xi \tag{3.124}$$

onde

$$\Gamma(x,\xi,r,\mu) = S(r,\xi) \frac{\exp\{-[r\mu + x\mu_0(x,r,\mu)]/\xi\} + \exp\{-[r\mu - x\mu_0(x,r,\mu)]/\xi\}}{\xi\mu_0(x,r,\mu)[1-(1-\alpha)\exp\{-2R\mu_0(R,r,\mu)/\xi\}]}. \tag{3.125}$$

Trocando a ordem de integração da Eq. (3.124) e usando as transformações dadas pelas

Eqs. (3.59) e (3.61), expressa-se o termo $B(r)$ da Eq. (3.77) como

$$B(r) = \frac{2}{\pi}\int_0^R \int_0^\infty \int_{-1}^1 xS(\xi,\mu)\frac{\exp\{-\xi^2 - p(x,r,\mu)/\xi\}}{p(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}}T(x,r,\mu,\xi)d\mu d\xi dx \tag{3.126}$$

onde

$$T(x,r,\mu,\xi) = \frac{2(1-\alpha)\exp\{-2R\mu_0[R,r,\beta(x,r,\mu)]/\xi\}}{1-(1-\alpha)\exp\{-2R\mu_0[R,r,\beta(x,r,\mu)]/\xi\}} \tag{3.127}$$

e

$$\beta(x,r,\mu) = \frac{r-\mu x}{p(x,r,\mu)}. \tag{3.128}$$

Pode-se, então, a partir de agora, resumir a formulação integral do problema considerado para o caso $Q(\xi)$ geral juntamente com a condição de superfície refletora dada pela Eq. (3.120). Assim, para este caso, escreve-se a Eq. (3.77) como

$$G(r) = C(r) + C_s(r) + \int_0^R xG(x)[K(x\to r) + K_s(x\to r)]dx \tag{3.129}$$

onde foram usadas as Eqs. (3.126) e (3.74), e onde

$$K_s(x\to r) = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \int_{-1}^1 \exp\{-\xi^2 - p(x,r,\mu)/\xi\}\frac{T(x,r,\mu,\xi)}{p(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}}d\mu d\xi. \tag{3.130}$$

Ainda, o primeiro dos dois termos não homogêneos da Eq. (3.129) é dado pela Eq. (3.76) e

$$C_s(r) = \frac{2}{\pi}\int_0^R \int_0^\infty \int_{-1}^1 xQ(\xi)\frac{\exp\{-\xi^2 - p(x,r,\mu)/\xi\}}{p(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}}T(x,r,\mu,\xi)d\mu d\xi dx, \tag{3.131}$$

sendo que o subscrito adicionado aos dois fatores da Eq. (3.129) é para lembrar que estes dois termos definem os efeitos da reflexão especular.

Para resumir os aspectos desenvolvidos neste capítulo, destaca-se, a princípio, a Eq. (3.77) e conseqüentemente as Eqs. (3.64) e (3.76), que revelam o resultado básico desta proposta. Por outro lado, tem-se a Eq. (3.129) que, juntamente com as Eqs. (3.76), (3.78), (3.130) e (3.131), fornecem resultados gerais para o caso de reflexão especular. Finalmente destacam-se as Eqs. (3.86) e (3.89) que proporcionam resultados clássicos para os casos do fluxo de Poiseuille e "creep" térmico em um tubo cilíndrico.

Nota-se que, no tratamento de interações gás-superfície segundo o modelo Cercignani-

Lampis [Sharipov, 2002; Cercignani, 1969], deve ser escrita uma formulação semelhante ao caso acima descrito (superfícies refletoras), uma vez que o termo $B(r)$ também será desconhecido (dependente de $G(r)$).

CAPÍTULO 4

Transferência Radiativa em Geometria Cilíndrica

Buscando-se aplicar a nova versão do método de ordenadas discretas [Barichello e Siewert, 1999a] em problemas de transferência radiativa em geometria cilíndrica, considera-se um cilindro sólido de comprimento infinito, homogêneo, simetria em relação ao eixo do cilindro (simetria cilíndrica), espalhamento isotrópico e sem dependência espectral (meio cinza), cujas coordenadas estão especificadas na Figura 4.1. Nessas condições, escreve-se a equação de transferência radiativa na forma do seguinte problema formulado adimensionalmente por Siewert e Thomas Jr. [Siewert e Thomas Jr., 1992]:

$$[(1-\mu^2)^{1/2}(\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\mathrm{sen}\,\phi\frac{\partial}{\partial\phi})+1]I(r,\mu,\phi)=\frac{\varpi}{\pi}\int_0^1\int_0^\pi I(r,\mu',\phi')d\phi' d\mu'+S(r) \quad (4.1)$$

para $r \in (0,R)$, $\mu \in [0,1]$ e $\phi \in (0,\pi)$, onde $S(r)$ é um termo não homogêneo (considerado conhecido), que representa uma fonte interna de energia. A condição de contorno associada à Eq. (4.1) é tal que

$$I(R,\mu,\phi)=T_0+\frac{4\rho}{\pi}\int_0^1\int_0^{\pi/2} I(R,\mu',\phi')(1-\mu'^2)^{1/2}\cos\phi' d\phi' d\mu' \quad (4.2)$$

para $\mu \in [0,1]$ e $\phi \in [\pi/2,\pi]$.

Figura 4.1 – Modelo físico e coordenadas

Em relação às variáveis básicas, tem-se que $r \in [0,R]$ é a variável espacial radial (em unidades adimensionais) e que R é o raio do cilindro. Ainda, $\mu = \cos\theta$ e ϕ são as duas variáveis angulares que definem a direção de propagação dos fótons, e em termos dos parâmetros físicos usados aqui, destaca-se que ϖ é o albedo de espalhamento simples, ρ é o coeficiente de reflexão difusa da superfície e T_0 é uma constante.

Continuando, nota-se que a definição do fluxo de calor radiativo

$$q_r(r) = \frac{1}{\pi}\int_0^1\int_0^\pi I(r,\mu,\phi)(1-\mu^2)^{1/2}\cos\phi d\phi d\mu \tag{4.3}$$

é dada em termos da solução da Eq. (4.1).

4.1 Uma Reformulação

Como o lado direito da Eq. (4.2) está definido em termos da quantidade desconhecida $I(R,\mu,\phi)$, propõe-se dividir o problema em dois problemas mais simples, como na Ref. [Siewert e Thomas Jr., 1992], escrevendo

$$I(r,\mu,\phi) = I_s(r,\mu,\phi) + \Lambda I_b(r,\mu,\phi) \tag{4.4}$$

onde $I_b(r,\mu,\phi)$ é solução do problema, ao qual se associam os efeitos da condição de contorno, definido por

$$[(1-\mu^2)^{1/2}(\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\mathrm{sen}\,\phi\frac{\partial}{\partial\phi}) + 1]I_b(r,\mu,\phi) = \frac{\varpi}{\pi}\int_0^1\int_0^\pi I_b(r,\mu^{'},\phi^{'})d\phi^{'}d\mu^{'}, \tag{4.5}$$

para $r \in (0,R)$, $\mu \in [0,1]$ e $\phi \in (0,\pi)$, onde

$$I_b(R,\mu,\phi) = 1, \quad \mu \in [0,1] \quad \text{e} \quad \phi \in [\pi/2,\pi]. \tag{4.6}$$

Busca-se também determinar $I_s(r,\mu,\phi)$, que leva em conta os efeitos do termo de fonte, definido por

$$[(1-\mu^2)^{1/2}(\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\mathrm{sen}\,\phi\frac{\partial}{\partial\phi}) + 1]I_s(r,\mu,\phi) = \frac{\varpi}{\pi}\int_0^1\int_0^\pi I_s(r,\mu^{'},\phi^{'})d\phi^{'}d\mu^{'} + S(r), \tag{4.7}$$

para $r \in (0,R)$, $\mu \in [0,1]$ e $\phi \in (0,\pi)$, onde

$$I_s(R,\mu,\phi) = 0, \quad \mu \in [0,1] \quad \text{e} \quad \phi \in [\pi/2,\pi]. \tag{4.8}$$

Pela reformulação dada pela Eq. (4.4), segue-se que a constante Λ é tal que

$$\Lambda = (1 - \rho A)^{-1}[T_0 + 4\rho\, q_s(R)] \tag{4.9}$$

onde

$$A = \frac{4}{\pi}\int_0^1 \int_0^{\pi/2} I_b(R,\mu,\phi)(1-\mu^2)^{1/2}\cos\phi\, d\phi\, d\mu \tag{4.10}$$

ou, de outra forma [Siewert e Thomas Jr., 1992]

$$A = 1 + 4q_b(R) \tag{4.11}$$

sendo que as quantidades $q_b(r)$ e $q_s(r)$, dadas respectivamente por

$$q_b(r) = \frac{1}{\pi}\int_0^1 \int_0^{\pi} I_b(r,\mu,\phi)(1-\mu^2)^{1/2}\cos\phi\, d\phi\, d\mu \tag{4.12}$$

e

$$q_s(r) = \frac{1}{\pi}\int_0^1 \int_0^{\pi} I_s(r,\mu,\phi)(1-\mu^2)^{1/2}\cos\phi\, d\phi\, d\mu, \tag{4.13}$$

são definidas quando a Eq. (4.4) é inserida na Eq. (4.3). Com esta notação o fluxo de calor radiativo dado pela Eq. (4.3) passa a ser escrito na forma

$$q_r(r) = q_s(r) + \Lambda q_b(r). \tag{4.14}$$

4.2 Problemas Auxiliares

Tendo reformulado o problema original com a decomposição em problemas básicos mais simples, diferentemente de outras abordagens [Thynell e Özışık, 1987] que buscam soluções de equações integrais associadas às quantidades $q_b(r)$ e $q_s(r)$, faz-se aqui uso de algumas transformações propostas por Mitsis [Mitsis, 1963] e estendidas por Siewert e Thomas Jr. na Ref. [Siewert e Thomas Jr., 1984] que permitem expressar as soluções dos problemas I_b e I_s em termos de dois problemas auxiliares ("pseudo" problemas). A princípio, pela

Eq. (4.5), pode-se deduzir que

$$q_b(r) = -\frac{1}{r}(1-\varpi)\int_0^r xQ_b(x)dx \tag{4.15}$$

onde

$$Q_b(r) = \frac{1}{\pi}\int_0^1\int_0^\pi I_b(r,\mu,\phi)d\phi d\mu, \tag{4.16}$$

e, portanto, $Q_b(r)$ é um resultado básico necessário à determinação do fluxo de calor radiativo dado pela Eq. (4.14). Como mencionado anteriormente, neste momento propõe-se usar os resultados da Ref. [Siewert e Thomas Jr., 1984], onde (a exemplo do capítulo anterior) algumas transformações associam a equação integral aos chamados "pseudo" problemas, ou seja, pelo referido trabalho a equação integral dada pela Eq. (4.16) pode ser expressa como

$$Q_b(r) = \int_0^1 F(r,\mu)d\mu \tag{4.17}$$

onde $F(r,\mu)$ satisfaz

$$[\mu^2(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r})-1]F(r,\mu)+\varpi\int_0^1 F(r,\mu^{'})d\mu^{'}=0, \tag{4.18}$$

para $r \in (0,R)$ e $\mu \in [0,1]$, com

$$F(R,\mu)+\gamma(\mu)\frac{\partial}{\partial r}F(r,\mu)\Big|_{r=R}=1, \quad \mu\in[0,1]. \tag{4.19}$$

Aqui

$$\gamma(\mu)=\mu\frac{K_0(R/\mu)}{K_1(R/\mu)} \tag{4.20}$$

e $K_0(z)$ e $K_1(z)$ são as funções de Bessel modificadas. Por outro lado, retornando agora para o problema I_s, encontra-se a partir da Eq. (4.7) que

$$q_s(r)=\frac{1}{r}\int_0^r x[S(x)-(1-\varpi)Q_s(x)]dx \tag{4.21}$$

onde

$$Q_s(r) = \frac{1}{\pi}\int_0^1\int_0^\pi I_s(r,\mu,\phi)d\phi d\mu. \tag{4.22}$$

Seguindo ainda a Ref. [Siewert e Thomas Jr., 1984], nota-se que $Q_s(r)$ é tal que

$$Q_s(r) = \int_0^1 \Psi(r,\mu)d\mu \tag{4.23}$$

onde $\Psi(r,\mu)$ é definido por

$$[\mu^2(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}) - 1]\Psi(r,\mu) + \varpi\int_0^1 \Psi(r,\mu^{'})d\mu^{'} + S(r) = 0, \tag{4.24}$$

para $r \in (0,R)$ e $\mu \in [0,1]$, com

$$\Psi(R,\mu) + \gamma(\mu)\frac{\partial}{\partial r}\Psi(r,\mu)\Big|_{r=R} = 0, \quad \mu \in [0,1]. \tag{4.25}$$

Assim, propõe-se, a partir de agora, o uso do método de ordenadas discretas analítico para solucionar os "pseudo" problemas definidos pelas Eqs. (4.18) e (4.19), (4.24) e (4.25).

4.3 O Problema I_b

Para obter uma solução em ordenadas discretas para o problema I_b, relacionado agora com as Eqs. (4.18) e (4.19), aproxima-se o termo integral da Eq. (4.18) por uma fórmula de quadratura e escreve-se a equação em ordenadas discretas como

$$[\mu_i^2(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}) - 1]F(r,\mu_i) + \varpi\sum_{k=1}^{N}\omega_k F(r,\mu_k) = 0 \tag{4.26}$$

para $i = 1, 2, ..., N$. Na Eq. (4.26) considera-se que os N pontos de quadratura μ_k e que os N pesos ω_k estão definidos no intervalo de integração $[0,1]$. Procurando soluções para a Eq. (4.26) em termos das funções de Bessel (limitadas quando $r \to 0$), substituam-se as soluções elementares

$$F(r,\mu_i) = \phi(\nu,\mu_i)I_0(r/\nu) \tag{4.27}$$

na Eq. (4.26) de onde se obtém

$$(\nu^2 - \mu_i^2)\phi(\nu,\mu_i) = \varpi\nu^2\sum_{k=1}^{N}\omega_k\phi(\nu,\mu_k) \tag{4.28}$$

para $i = 1, 2, ..., N$. Fazendo com que cada $\phi(\nu,\mu_k)$ para $k = 1, 2, ..., N$ seja uma componente do vetor $\mathbf{\Phi}(\nu)$, pode-se, então, reescrever a Eq. (4.28) como

$$(\mathbf{I} - \lambda\mathbf{M^2})\mathbf{\Phi}(\nu) = \varpi\mathbf{W}\mathbf{\Phi}(\nu) \tag{4.29}$$

onde $\lambda = 1/\nu^2$, $\mathbf{I}$ é a matriz identidade $N \times N$, os elementos da matriz $\mathbf{W}$ de ordem $N \times N$ são tais que

$$(\mathbf{W})_{i,j} = \omega_j \tag{4.30}$$

e ainda

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\mu_1, \mu_2, ..., \mu_N\}. \tag{4.31}$$

Nota-se que o problema de autovalores definido pela Eq. (4.29) é essencialmente aquele que foi encontrado nas Refs. [Barichello e Siewert, 1999a] e [Barichello et al., 2001] na solução em ordenadas discretas de um problema semelhante em geometria plana e, assim, como naqueles trabalhos, pode-se escrever a Eq. (4.29) na forma especial [Meyer, 2000]

$$(\mathbf{D} - \varpi\mathbf{z}\mathbf{z}^T)\mathbf{X} = \lambda\mathbf{X} \tag{4.32}$$

onde

$$\mathbf{D} = \text{diag}\{\mu_1^{-2}, \mu_2^{-2}, ..., \mu_N^{-2}\} \tag{4.33}$$

e

$$\mathbf{z} = [{\omega_1}^{1/2}{\mu_1}^{-1} \;\; {\omega_2}^{1/2}{\mu_2}^{-1} \;\; ... \;\; {\omega_N}^{1/2}{\mu_N}^{-1}\;]^T. \tag{4.34}$$

Aqui está-se usando o superescrito T para denotar a operação transposta. Continuando, tem-se que o problema de autovalores definido pela Eq. (4.32) possui a forma encontrada no método “divide and conquer” [Golub e Van Loan, 1989] usado para calcular autovalores de matrizes tridiagonais. Ainda, vê-se que pela Eq. (4.34) que, devido à forma com que o problema de autovalores foi formulado, deve-se excluir o zero do conjunto de pontos de quadratura.

Considerando que tenham sido encontrados os autovalores e autovetores, λ_j e $\mathbf{X}_j$, pela Eq. (4.32) e fazendo

$$\nu_j = \lambda_j^{-1/2} \tag{4.35}$$

e

$$\mathbf{\Phi}(\nu_j) = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{X}_j, \tag{4.36}$$

onde

$$\mathbf{S} = \mathrm{diag}\{\omega_1^{1/2}\mu_1, \omega_2^{1/2}\mu_2, ..., \omega_N^{1/2}\mu_N\}, \tag{4.37}$$

escreve-se a solução em ordenadas discretas para o problema definido pelas Eqs.(4.18) e (4.19) como

$$F(r, \mu_i) = \sum_{j=1}^{N} A_j \phi(\nu_j, \mu_i) \widehat{I}_0(r/\nu_j) e^{-(R-r)/\nu_j} \ . \tag{4.38}$$

Aqui os A_j são constantes a serem determinadas pela condição de contorno

$$F(R, \mu_i) + \Upsilon(\mu_i) \frac{\partial}{\partial r} F(r, \mu_i)\Big|_{r=R} = 1, \tag{4.39}$$

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

$$\Upsilon(\mu) = \mu \frac{\widehat{K}_0(R/\mu)}{\widehat{K}_1(R/\mu)}. \tag{4.40}$$

Por razões computacionais está-se usando aqui

$$\widehat{I}_n(z) = I_n(z) e^{-z} \quad \text{e} \quad \widehat{K}_n(z) = K_n(z) e^{z}. \tag{4.41}$$

Os vetores $\mathbf{\Phi}(\nu_j)$, e, por conseqüência, seus componentes $\phi(\nu_j, \mu_i)$, são avaliados pela Eq. (4.36) enquanto que os autovetores $\mathbf{X}_j$ são definidos pela Eq. (4.32). Por outro lado, pode-se também usar somente os autovalores definidos pela Eq. (4.32), juntamente com a Eq. (4.35), e então usar a expressão analítica

$$\phi(\nu_j, \mu_i) = \frac{\varpi \nu_j^2}{\nu_j^2 - \mu_i^2} K(\nu_j) \tag{4.42}$$

onde

$$K(\nu_j) = \sum_{i=1}^{N} \omega_i \phi(\nu_j, \mu_i). \tag{4.43}$$

Usando a Eq. (4.38) na versão em ordenadas discretas da Eq. (4.17), obtém-se, após impor a normalização (arbitrária)

$$K(\nu_j) = 1, \tag{4.44}$$

$$Q_b(r) = \sum_{j=1}^{N} A_j K(\nu_j) \widehat{I}_0(r/\nu_j) e^{-(R-r)/\nu_j} \tag{4.45}$$

e substituindo este resultado na Eq. (4.15) tem-se

$$q_b(r) = -(1-\varpi) \sum_{j=1}^{N} \nu_j A_j K(\nu_j) \widehat{I}_1(r/\nu_j) e^{-(R-r)/\nu_j}. \tag{4.46}$$

Assim, a solução do problema I_b ("boundary condition") fica completamente estabelecida.

4.4 Uma Solução Particular

Analisando a Eq. (4.24), observa-se que há um termo de fonte, e, portanto, para definir uma solução em ordenadas discretas para o problema I_s, definido pelas Eqs. (4.24) e (4.25), deve-se desenvolver uma solução particular [Barichello et al., 2002b] que possa ser usada juntamente com as soluções elementares anteriormente empregadas na solução do problema I_b. Assim, considerando inicialmente a versão em ordenadas discretas da Eq. (4.24) escrita como

$$[\mu_i^2 (\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}) - 1]\Psi(r, \mu_i) + \varpi \sum_{k=1}^{N} \omega_k \Psi(r, \mu_k) + S(r) = 0 \tag{4.47}$$

para $i = 1, 2, ..., N$ e, admitindo que o termo de fonte é conhecido, expressa-se através do método de variação de parâmetros uma solução particular na forma

$$\Psi_p(r, \mu_i) = \sum_{j=1}^{N} C_j \phi(\nu_j, \mu_i)[V(r, \nu_j)\widehat{I}_0(r/\nu_j) + U(r, \nu_j)\widehat{K}_0(r/\nu_j)] \tag{4.48}$$

onde

$$U(r,\nu_j) = \int_0^r xS(x)\widehat{I}_0(x/\nu_j)e^{-(r-x)/\nu_j}dx \tag{4.49}$$

e

$$V(r,\nu_j) = \int_r^R xS(x)\widehat{K}_0(x/\nu_j)e^{-(x-r)/\nu_j}dx, \tag{4.50}$$

sendo que as constantes C_j devem ser determinadas através da substituição da Eq. (4.48) na Eq. (4.47) de onde se obtém

$$\mu_i^2 \sum_{j=1}^{N} C_j\phi(\nu_j,\mu_i) = 1, \quad i = 1,2,...,N \tag{4.51}$$

que constitui um sistema linear de equações algébricas que deve ser satisfeito pelos coeficientes C_j. Pode-se, ainda, usar propriedades das soluções elementares $\phi(\nu_j,\mu_i)$ para solucionar este sistema (com a suposição implícita de que a solução do sistema existe). Primeiramente, usando a Eq. (4.42) escreve-se a Eq. (4.28) como

$$(1-\mu_i^2/\nu_j^2)\phi(\nu_j,\mu_i) = \varpi K(\nu_j). \tag{4.52}$$

Multiplicando agora a Eq. (4.52) por $\omega_i\phi(\nu_k,\mu_i)$ e somando com relação a i obtém-se

$$\sum_{i=1}^{N}\omega_i\phi(\nu_j,\mu_i)\phi(\nu_k,\mu_i) - \frac{1}{\nu_j^2}\sum_{i=1}^{N}\omega_i\mu_i^2\phi(\nu_j,\mu_i)\phi(\nu_k,\mu_i) = \varpi K(\nu_j)K(\nu_k). \tag{4.53}$$

Trocando j por k na Eq. (4.53) encontra-se

$$\sum_{i=1}^{N}\omega_i\phi(\nu_k,\mu_i)\phi(\nu_j,\mu_i) - \frac{1}{\nu_k^2}\sum_{i=1}^{N}\omega_i\mu_i^2\phi(\nu_k,\mu_i)\phi(\nu_j,\mu_i) = \varpi K(\nu_k)K(\nu_j). \tag{4.54}$$

Agora, subtraindo a Eq. (4.53) da Eq. (4.54) deduz-se que

$$\sum_{i=1}^{N}\omega_i\mu_i^2\phi(\nu_j,\mu_i)\phi(\nu_k,\mu_i) = N(\nu_j)\delta_{j,k} \tag{4.55}$$

onde

$$N(\nu_j) = \sum_{i=1}^{N} \omega_i \mu_i^2 [\phi(\nu_j, \mu_i)]^2. \tag{4.56}$$

Multiplicando ainda a Eq. (4.51) por $\omega_i \phi(\nu_k, \mu_i)$ e somando com relação a i, obtém-se, após observar a Eq. (4.55),

$$C_j = K(\nu_j)/N(\nu_j) \tag{4.57}$$

e assim a solução particular torna-se totalmente estabelecida.

Tendo estabelecido a solução particular requerida, escreve-se, então, a solução para Eq. (4.24) como

$$\Psi(r, \mu_i) = \sum_{j=1}^{N} B_j \phi(\nu_j, \mu_i) \widehat{I}_0(r/\nu_j) e^{-(R-r)/\nu_j} + \Psi_p(r, \mu_i). \tag{4.58}$$

Para encontrar as constantes B_j, substitui-se a Eq. (4.58) na versão em ordenadas discretas da condição de contorno dada pela Eq. (4.25) e assim

$$\sum_{j=1}^{N} B_j \phi(\nu_j, \mu_i) [\widehat{I}_0(R/\nu_j) + (1/\nu_j) \Upsilon(\mu_i) \widehat{I}_1(R/\nu_j)] = R(\mu_i) \tag{4.59}$$

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

$$R(\mu_i) = -\Psi_p(R, \mu_i) - \Upsilon(\mu_i) \frac{\partial}{\partial r} \Psi_p(r, \mu_i) \Big|_{r=R}, \tag{4.60}$$

com $\Upsilon(\mu)$ definido na Eq. (4.40), ou ainda

$$R(\mu_i) = -\sum_{j=1}^{N} C_j \phi(\nu_j, \mu_i) U(R, \nu_j) [\widehat{K}_0(R/\nu_j) - (1/\nu_j) \Upsilon(\mu_i) \widehat{K}_1(R/\nu_j)]. \tag{4.61}$$

Uma vez encontradas as constantes requeridas, avalia-se a versão em ordenadas discretas de

$$Q_s(r) = \int_0^1 \Psi(r, \mu) d\mu \tag{4.62}$$

de onde se obtém, após impor a normalização (arbitrária)

$$K(\nu_j) = 1, \tag{4.63}$$

$$Q_s(r) = \sum_{j=1}^{N}\{B_j\widehat{I}_0(r/\nu_j)e^{-(R-r)/\nu_j} + C_j[V(r,\nu_j)\widehat{I}_0(r/\nu_j) + U(r,\nu_j)\widehat{K}_0(r/\nu_j)]\} \tag{4.64}$$

e, sendo assim, finalmente obtém-se, após usar a Eq. (4.64) e observar as Eqs. (4.51), (4.52) e (4.63), que

$$q_s(r) = -(1-\varpi)\sum_{j=1}^{N}\nu_j[B_j\widehat{I}_1(r/\nu_j)e^{-(R-r)/\nu_j} + C_jT(r,\nu_j)] \tag{4.65}$$

onde

$$T(r,\nu_j) = V(r,\nu_j)\widehat{I}_1(r/\nu_j) - U(r,\nu_j)\widehat{K}_1(r/\nu_j). \tag{4.66}$$

Assim, a solução do problema I_s (“source”) fica completamente estabelecida.

4.4.1 Caso Conservativo

Nesta subseção propõe-se o desenvolvimento de uma solução para o problema I_s, definido pelas Eqs. (4.24) e (4.25), contemplando o caso conservativo ($\varpi = 1$). Sendo que neste caso duas das constantes de separação ν_j tornam-se ilimitadas, algumas modificações são necessárias na solução em ordenadas discretas proposta anteriormente. Assim, uma solução limitada para o problema

$$[\mu_i^2(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}) - 1]\Psi_c(r,\mu_i) + \sum_{k=1}^{N}\omega_k\Psi_c(r,\mu_k) + S(r) = 0, \tag{4.67}$$

para $i = 1, 2, ..., N$, é agora escrita como [Rodrigues e Barichello, 2003]

$$\Psi_c(r,\mu_i) = A_1 + \sum_{j=2}^{N}A_j\phi(\nu_j,\mu_i)\widehat{I}_0(r/\nu_j)e^{-(R-r)/\nu_j} + \Psi_{cp}(r,\mu_i) \tag{4.68}$$

onde $\phi(\nu_j,\mu_i)$, para $j = 2, 3, ..., N$ são definidas como na Eq. (4.42) com $\varpi = 1$, e a Eq. (4.41) pode também ser observada. Assim, a solução particular é agora proposta como [Rodrigues e Barichello, 2003]

$$\Psi_{cp}(r,\mu_i) = C_1[A(r) - B(r)\ln(r/R)] + \sum_{j=2}^{N}C_j\phi(\nu_j,\mu_i)[V(r,\nu_j)\widehat{I}_0(r/\nu_j) + U(r,\nu_j)\widehat{K}_0(r/\nu_j)], \tag{4.69}$$

onde as funções $A(r)$ e $B(r)$ são dadas por

$$A(r) = \int_r^R xS(x)\ln(R/x)dx, \tag{4.70}$$

$$B(r) = \int_0^r xS(x)dx \tag{4.71}$$

e $V(r,\nu_j)$ e $U(r,\nu_j)$ estão definidas nas Eqs. (4.49) e (4.50). Substituindo a Eq. (4.68) na Eq. (4.67), e usando a condição de normalização expressa na Eq. (4.63), encontra-se que as constantes C_j satisfazem o sistema de equações algébricas

$$\mu_i^2[C_1 + \sum_{j=2}^{N} C_j\phi(\nu_j,\mu_i)] = 1, \quad i = 1,2,...,N. \tag{4.72}$$

Ainda, usando as propriedades [Barichello et al., 2002b] das soluções elementares $\phi(\nu_j,\mu_i)$ (como na seção 4.4) juntamente com a Eq. (4.72), pode-se obter as constantes C_j, para $j = 1,2,...,N$ através da expressão

$$C_j = K(\nu_j)/N(\nu_j), \tag{4.73}$$

onde, assim como na (4.63), $K(\nu_j) = 1$,

$$N(\nu_1) = \sum_{i=1}^{N} \omega_i\mu_i^2 \tag{4.74}$$

e

$$N(\nu_j) = \sum_{i=1}^{N} \omega_i\mu_i^2[\phi(\nu_j,\mu_i)]^2, \quad j = 2,...,N. \tag{4.75}$$

4.5 Aplicações

Propõe-se, a partir de agora, a abordagem de duas classes de problemas de transferência radiativa usando a formulação desenvolvida nas seções anteriores para o caso não-conservativo. Primeiramente a formulação será aplicada a problemas lineares que envolvem transferência de calor unicamente na forma radiativa [Rodrigues e Barichello, 2003], como os sugeridos por Thynell e Özışık na Ref. [Thynell e Özışık, 1987] e posteriormente na análise de uma classe de problemas não lineares de transferência de calor pelo modo acoplado de radiação e condução [Barichello et al., 2002b].

4.5.1 Um Problema Linear

Na Ref. [Thynell e Özışık, 1987], Thynell e Özışık ilustram aspectos computacionais da proposta desenvolvida no referido trabalho, que envolve a utilização do método de Galerkin e de esquemas de colocação, considerando para o caso não-conservativo ($\varpi \neq 1$) duas situações diferenciadas que também serão solucionadas aqui para validar a formulação apresentada neste capítulo. Assim, primeiramente é abordado um problema de transferência radiativa em um cilindro sólido, homogêneo, sem fonte interna de energia, mas com incidência de radiação isotrópica de intensidade unitária na fronteira $r = R$, que pode ser formulado na seguinte forma

$$[(1-\mu^2)^{1/2}(\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\text{sen}\,\phi\frac{\partial}{\partial\phi}) + 1]I(r,\mu,\phi) = \frac{\varpi}{\pi}\int_0^1\int_0^\pi I(r,\mu',\phi')d\phi' d\mu', \qquad (4.76)$$

para $r \in (0,R)$, $\mu \in [0,1]$ e $\phi \in (0,\pi)$, onde

$$I(R,\mu,\phi) = 1, \quad \mu \in [0,1] \quad \text{e} \quad \phi \in [\pi/2,\pi] \qquad (4.77)$$

revelando-se idêntico ao problema I_b apresentado anteriormente nas Eqs. (4.5) e (4.6), sendo que os resultados numéricos relevantes (a título de comparação) este problema podem ser obtidos, de acordo com a solução em ordenadas discretas, através da avaliação da expressão $Q_b(r)$ dada pela Eq. (4.45) que corresponde à quantidade $G(r)/4\pi$ da Ref. [Thynell e Özışık, 1987].

O segundo problema abordado na Ref. [Thynell e Özışık, 1987] está relacionado à análise da transferência radiativa também em um cilindro sólido, homogêneo e transparente, mas neste caso sem incidência externa de radiação e com a inclusão de uma fonte interna de energia representada pela expressão [Thynell e Özışık, 1987]

$$S(r) = (1-\varpi)[1-(r/R)^2]. \qquad (4.78)$$

Nessas condições, este problema pode ser formulado pelas seguintes equações

$$[(1-\mu^2)^{1/2}(\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\text{sen}\,\phi\frac{\partial}{\partial\phi})+1]I(r,\mu,\phi)=\frac{\varpi}{\pi}\int_0^1\int_0^\pi I(r,\mu^{'},\phi^{'})d\phi^{'}d\mu^{'}+S(r), \quad (4.79)$$

para $r\in(0,R)$, $\mu\in[0,1]$ e $\phi\in(0,\pi)$, onde

$$I(R,\mu,\phi)=0, \quad \mu\in[0,1] \quad \text{e} \quad \phi\in[\pi/2,\pi], \quad (4.80)$$

que possuem a forma originária do problema I_s dado pelas Eqs. (4.7) e (4.8), admitindo-se $S(r)$ tal como na Eq. (4.78). Assim, os resultados numéricos a serem comparados aos da Ref. [Thynell e Özışık, 1987] com relação a este problema podem ser obtidos a partir da avaliação da Eq. (4.64), referente à quantidade $Q_s(r)$ que corresponde a $G(r)/4\pi$ no trabalho de Thynell e Özışık, bem como pela avaliação do fluxo de calor radiativo dado pela Eq. (4.65) que ao ser multiplicado por 4π corresponde a $q^r(r)$ da Ref. [Thynell e Özışık, 1987].

4.5.1.1 Aspectos Computacionais e Resultados Numéricos

Para obtenção de resultados numéricos dos dois problemas descritos na seção 4.5.1, inicialmente define-se o esquema de quadratura $\{\omega_k,\mu_k\}$ pelo mapeamento linear do esquema de quadratura de Gauss-Legendre sobre o intervalo [0,1], e então usa-se o programa RG da coleção EISPACK [Smith et al., 1976] para encontrar os autovalores e os autovetores definidos pela Eq. (4.32), e, assim, através das Eqs. (4.35) e (4.36) pode-se obter as constantes de separação e as soluções elementares associadas.

Na determinação das constantes $\{A_j\}$ e $\{B_j\}$, podem ser usadas as subrotinas DGECO e DGESL da coleção LINPACK [Dongarra et al., 1979] de forma a resolver os sistemas lineares definidos pelas Eqs. (4.19) e (4.59). Em relação à solução particular, é importante enfatizar a forma de avaliação das Eqs. (4.49) e (4.50): uma vez que a avaliação analítica não é possível, usou-se neste trabalho o esquema de quadratura de Gauss-Legendre mapeado linearmente sobre o intervalo $[0,1]$ para, então, obter resultados numéricos para estas duas expressões. Nos casos onde é necessária a determinação de uma solução particular, como enfatizado na próxima aplicação, uma representação em splines cúbicas de Hermite do termo de fonte $S(r)$ também pode ser usada para avaliar estas integrais.

Nas Tabelas 4.1−4.4 estão os resultados numéricos obtidos neste trabalho para os dois problemas sugeridos na Ref. [Thynell e Özışık, 1987]. De fato, como discutido anteriormente, para resolver os dois casos sugeridos tudo o que se tem a fazer é resolver um de cada vez os dois problemas chamados na seção 4.1 de I_b e I_s. Assim, nas Tabelas 4.1 e 4.2 estão os resultados para o problema dado pelas Eqs. (4.5) e (4.6), enquanto que nas Tabelas 4.3 e 4.4 estão os resultados para o problema dado pelas Eqs. (4.7) e (4.8) considerando a fonte interna de energia representada pela Eq. (4.78). Para gerar os resultados apresentados aqui foi usado, em geral, M=100 na Tabela 4.3 e M=20 na Tabela 4.4, onde M simboliza o número de pontos de quadratura usados na avaliação das Eqs. (4.49) e (4.50). Para os casos $r = 0.0$ na Tabela 4.3 e $r = 0.1R$ na Tabela 4.4 estes valores aumentam (em alguns casos) para $M = 600$ e $M = 120$ respectivamente. Estas escolhas foram feitas para apresentar resultados que acredita-se estarem corretos em seis dígitos (mais ou menos um no último dígito) para todos os valores da variável r. É importante enfatizar ainda que a execução da solução em cada caso, não leva mais do que cinco segundos em um PC com Processador Pentium 233 MHz de 64 MB de memória.

Os resultados apresentados na Tabela 4.1 estão iguais, em todos os dígitos, aos resultados obtidos na Ref. [Siewert e Thomas Jr., 1984] com a aplicação do método F_N, bem como para o caso $R = 10$ apresentado aqui na Tabela 4.2 e não mostrados na Ref. [Rodrigues e Barichello, 2003].

A solução particular [Siewert, 2002a]

$$\Psi_p(r,\mu) = 1 - \frac{1}{R^2}[r^2 + 4\mu^2 + \frac{4}{3}(\frac{\varpi}{1-\varpi})] \tag{4.81}$$

para o problema de Eqs. (4.7) e (4.8) com termo de fonte disponível na Ref. [Thynell e Özışık, 1987] e dado pela Eq. (4.78), foi utilizada para verificar os resultados apresentados aqui e estes concordam plenamente com os resultados obtidos a partir desta solução particular quando as integrais são avaliadas numericamente.

Em comparação com os resultados da Ref. [Thynell e Özışık, 1987], que foram obtidos com o Método de Galerkin ou com esquemas de colocação, tem-se nas Tabelas 4.1, 4.3 e 4.4, em geral, de três a cinco dígitos de concordância, sendo que os resultados mostrados aqui na Tabela 4.2 não estão disponíveis nesse referido trabalho.

Com uma simples inspeção na Tabela 4.3 e na Figura 4.2, que retrata os valores tabelados de $Q_s(r)$ para $R = 0.5$, bem como na Figura 4.3, que retrata os valores tabelados de $Q_s(r)$ para $R = 5$, constata-se que os maiores valores de $Q_s(r)$ ocorrem no centro do cilindro, enquanto que os menores valores ocorrem na fronteira $r = R$. Da Tabela 4.4 e da Figura 4.4, que retrata os valores tabelados de $4\pi q_s(r)$ para $R = 0.5$, bem como da Figura 4.5, que retrata os valores tabelados de $4\pi q_s(r)$ para $R = 2.5$, tem-se que o fluxo de calor atinge valores máximos entre $r = 0.8R$ e $r = 0.9R$.

Tabela 4.1 – Cálculo de $Q_b(r)$ para $N = 14$

R	ϖ	$r = 0.0$	$r = 0.5R$	$r = R$
	0.3	3.64405(–1)	4.16309(–1)	6.94369(–1)
1.0	0.5	4.57065(–1)	5.05927(–1)	7.47538(–1)
	0.9	8.24677(–1)	8.44173(–1)	9.24929(–1)
	0.3	8.10839(–2)	1.35401(–1)	6.03013(–1)
2.5	0.5	1.26607(–1)	1.91983(–1)	6.51043(–1)
	0.9	5.29830(–1)	5.92673(–1)	8.54825(–1)
	0.3	6.67580(–3)	2.74736(–2)	5.72543(–1)
5.0	0.5	1.35349(–2)	4.57241(–2)	6.16681(–1)
	0.9	1.98678(–1)	2.95285(–1)	8.06015(–1)

Tabela 4.2 – Cálculo de $Q_b(r)$ para $R = 10$ e $N = 14$

r/R	$\varpi = 0.3$	$\varpi = 0.5$	$\varpi = 0.7$	$\varpi = 0.9$
0.0	4.60882(–5)	1.38859(–4)	8.01829(–4)	2.01898(–2)
0.1	5.95325(–5)	1.73680(–4)	9.46293(–4)	2.16079(–2)
0.2	1.12121(–4)	3.05085(–4)	1.45897(–3)	2.61624(–2)
0.3	2.53579(–4)	6.37744(–4)	2.62685(–3)	3.48252(–2)
0.4	6.25301(–4)	1.44881(–3)	5.12494(–3)	4.94721(–2)
0.5	1.62250(–3)	3.44884(–3)	1.04520(–2)	7.33358(–2)
0.6	4.37880(–3)	8.48704(–3)	2.19360(–2)	1.11811(–1)
0.7	1.22887(–2)	2.15284(–2)	4.71009(–2)	1.73872(–1)
0.8	3.62559(–2)	5.66444(–2)	1.03616(–1)	2.74762(–1)
0.9	1.16748(–1)	1.58763(–1)	2.37138(–1)	4.42664(–1)
1.0	5.58361(–1)	6.00996(–1)	6.63331(–1)	7.81243(–1)

Tabela 4.3 – Cálculo de $Q_s(r)$ para N=30

R	ϖ	$r = 0.0$	$r = 0.5R$	$r = 0.8R$	$r = 0.9R$	$r = R$
	0.1	3.39449(–1)	2.65595(–1)	1.66782(–1)	1.31524(–1)	1.00082(–1)
0.5	0.5	2.25267(–1)	1.77623(–1)	1.13857(–1)	9.08487(–2)	6.93763(–2)
	0.9	5.61792(–2)	4.47265(–2)	2.93489(–2)	2.37089(–2)	1.81648(–2)
	0.1	5.42506(–1)	4.14499(–1)	2.41931(–1)	1.80164(–1)	1.25430(–1)
1.0	0.5	4.02444(–1)	3.10277(–1)	1.86663(–1)	1.41959(–1)	9.97731(–2)
	0.9	1.22444(–1)	9.57456(–2)	5.98976(–2)	4.66281(–2)	3.30605(–2)
	0.1	8.20227(–1)	6.09376(–1)	3.15050(–1)	2.07262(–1)	1.13007(–1)
2.5	0.5	7.18249(–1)	5.34997(–1)	2.85237(–1)	1.94522(–1)	1.09653(–1)
	0.9	3.44085(–1)	2.59303(–1)	1.46373(–1)	1.04740(–1)	6.10467(–2)
	0.1	9.42498(–1)	6.98476(–1)	3.38159(–1)	1.99111(–1)	7.69871(–2)
5.0	0.5	8.99525(–1)	6.63554(–1)	3.25509(–1)	1.98797(–1)	8.24518(–2)
	0.9	6.34436(–1)	4.65102(–1)	2.38068(–1)	1.55164(–1)	6.97828(–2)

Figura 4.2 – Efeitos do albedo de espalhamento simples em $Q_s(r)$ para $R = 0.5$ e N=30

Figura 4.3 – Efeitos do albedo de espalhamento simples em $Q_s(r)$ para $R = 5$ e N=30

Figura 4.4 – Efeitos do albedo de espalhamento simples em $4\pi q_s(r)$ para $R = 0.5$ e N=22

Figura 4.5 – Efeitos do albedo de espalhamento simples em $4\pi q_s(r)$ para $R = 2.5$ e N=22

Tabela 4.4 – Cálculo de $4\pi q_s(r)$ para N=22

R	ϖ	$r = 0.1R$	$r = 0.5R$	$r = 0.8R$	$r = 0.9R$	$r = R$
	0.1	1.85790(–1)	8.10185(–1)	9.75921(–1)	9.34946(–1)	8.30736(–1)
0.5	0.5	1.21066(–1)	5.29325(–1)	6.45116(–1)	6.24744(–1)	5.66826(–1)
	0.9	2.95015(–2)	1.29535(–1)	1.60328(–1)	1.57261(–1)	1.45959(–1)
	0.1	2.57391(–1)	1.12386	1.33619	1.25692	1.07080
1.0	0.5	1.86764(–1)	8.15878(–1)	9.82800(–1)	9.39596(–1)	8.30567(–1)
	0.9	5.48595(–2)	2.40689(–1)	2.96780(–1)	2.90135(–1)	2.67705(–1)
	0.1	2.53215(–1)	1.14024	1.38209	1.26920	9.75583(–1)
2.5	0.5	2.20352(–1)	9.80396(–1)	1.18361	1.10583	9.11976(–1)
	0.9	1.02526(–1)	4.50886(–1)	5.53020(–1)	5.36025(–1)	4.85935(–1)
	0.1	1.62383(–1)	7.77285(–1)	1.03437	9.61308(–1)	6.57923(–1)
5.0	0.5	1.57525(–1)	7.40586(–1)	9.57461(–1)	8.93526(–1)	6.75078(–1)
	0.9	1.14389(–1)	5.13080(–1)	6.38452(–1)	6.14527(–1)	5.42306(–1)

4.5.2 Um Problema Não Linear Acoplado de Radiação e Condução

Como mencionado no início da seção Aplicações, a segunda proposta de aplicação da nova versão do método de ordenadas discretas [Barichello e Siewert, 1999a] está vinculada (neste trabalho) à resolução de problemas não lineares de transferência de calor pelo modo acoplado radiação-condução em um cilindro sólido, homogêneo, com espalhamento isotrópico, comprimento infinito, simetria cilíndrica e sem dependência espectral, sendo que, para este fim a formulação proposta no início deste capítulo, referente às Eqs. (4.1) e (4.2), deve ser modificada com termos que descrevam o acoplamento radiação-condução [Barichello et al., 2002b], ou seja, neste caso tem-se:

$$T_0 = \varepsilon\Theta_0^4, \tag{4.82}$$

na condição de contorno da Eq. (4.2), e, ainda, representando o termo de fonte da Eq. (4.1)

$$S(r) = (1-\varpi)\Theta^4(r), \tag{4.83}$$

sendo que a distribuição de temperaturas $\Theta(r)$ deve satisfazer a equação de energia

$$r\frac{d^2}{dr^2}\Theta(r) + \frac{d}{dr}\Theta(r) = \frac{1}{N_c}\frac{d}{dr}[rq_r(r)] - rH \tag{4.84}$$

com condições de contorno

$$\Theta(R) = \Theta_0 \quad \text{e} \quad \frac{d}{dr}\Theta(r)\Big|_{r=0} = 0 \tag{4.85}$$

cuja solução pode ser expressa como

$$\Theta(r) = \Theta_0 + \frac{1}{4}(R^2 - r^2)H - \frac{1}{N_c}\int_r^R q_r(x)dx. \tag{4.86}$$

Aqui, ε é a emissividade da superfície,

$$N_c = \frac{k\beta}{4\sigma n^2 T_r^3} \tag{4.87}$$

é o parâmetro de radiação-condução, H é uma constante tal que

$$H = (k\beta^2 T_r)^{-1}h, \tag{4.88}$$

n é o índice de refração, k é a condutividade térmica do meio, σ é a constante de Stefan-Boltzmann, β é o coeficiente de extinção, T_r é a temperatura de referência, h é a constante relacionada com a geração de calor prescrito no meio e Θ_0 é a temperatura prescrita (normalizada) na superfície.

Como o fluxo de calor radiativo

$$q_r(r) = \frac{1}{\pi} \int_0^1 \int_0^\pi I(r, \mu, \phi)(1 - \mu^2)^{1/2} \cos\phi d\phi d\mu, \tag{4.89}$$

observa-se que os dois problemas (radiação e condução) estão realmente acoplados e também que a constante N_c é uma grandeza relacionada com o grau de acoplamento entre os dois modos de transferência de calor.

4.5.2.1 O Problema Acoplado

Introduzindo uma representação em splines (Anexo A) para o termo de fonte da Eq. (4.1), especificado na Eq. (4.83), tem-se

$$(1 - \varpi)\Theta^4(r) = \sum_{k=0}^{K} a_k \Im_k(r/R) \tag{4.90}$$

onde as constantes a_k devem ser determinadas. Assim, admitindo como termo de fonte uma das funções splines $\Im_k(x)$, para $k = 0, 1, ..., K$, pode-se escrever a solução para o problema

$$[\mu_i^2(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}) - 1]\Psi_k(r, \mu_i) + \varpi \sum_{\alpha=1}^{N} \omega_\alpha \Psi_k(r, \mu_\alpha) + \Im_k(r/R) = 0 \tag{4.91}$$

como

$$\Psi_k(r, \mu_i) = \sum_{j=1}^{N} A_{k,j} \phi(\nu_j, \mu_i) \widehat{I}_0(r/\nu_j) e^{-(R-r)/\nu_j} + \Psi_{k,p}(r, \mu_i) \tag{4.92}$$

onde, seguindo o que foi exposto na seção 4.4,

$$\Psi_{k,p}(r, \mu_i) = \sum_{j=1}^{N} C_j \phi(\nu_j, \mu_i)[V_k(r, \nu_j)\widehat{I}_0(r/\nu_j) + U_k(r, \nu_j)\widehat{K}_0(r/\nu_j)] \tag{4.93}$$

com

$$U_k(r,\nu_j) = \int_0^r x\Im_k(x/R)\widehat{I}_0(x/\nu_j)e^{-(r-x)/\nu_j}dx \tag{4.94}$$

e

$$V_k(r,\nu_j) = \int_r^R x\Im_k(x/R)\widehat{K}_0(x/\nu_j)e^{-(x-r)/\nu_j}dx. \tag{4.95}$$

Para encontrar as constantes $A_{k,j}$ substitui-se a Eq. (4.92) na versão em ordenadas discretas da Eq. (4.25) obtendo-se

$$\sum_{j=1}^{N} A_{k,j}\phi(\nu_j,\mu_i)[\widehat{I}_0(R/\nu_j) + (1/\nu_j)\Upsilon(\mu_i)\widehat{I}_1(R/\nu_j)] = R_k(\mu_i) \tag{4.96}$$

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

$$R_k(\mu_i) = -\Psi_{k,p}(R,\mu_i) - \Upsilon(\mu_i)\frac{\partial}{\partial r}\Psi_{k,p}(r,\mu_i)\Big|_{r=R} \tag{4.97}$$

ou

$$R_k(\mu_i) = -\sum_{j=1}^{N} C_j\phi(\nu_j,\mu_i)U_k(R,\nu_j)[\widehat{K}_0(R/\nu_j) - (1/\nu_j)\Upsilon(\mu_i)\widehat{K}_1(R/\nu_j)]. \tag{4.98}$$

Uma vez encontradas as constantes requeridas, avalia-se a versão em ordenadas discretas de

$$Q_{k,s}(r) = \int_0^1 \Psi_k(r,\mu)d\mu \tag{4.99}$$

e encontra-se, depois de impor a normalização (arbitrária)

$$K(\nu_j) = 1, \tag{4.100}$$

$$Q_{k,s}(r) = \sum_{j=1}^{N}\{A_{k,j}\widehat{I}_0(r/\nu_j)e^{-(R-r)/\nu_j} + C_j[V_k(r,\nu_j)\widehat{I}_0(r/\nu_j) + U_k(r,\nu_j)\widehat{K}_0(r/\nu_j)]\}. \tag{4.101}$$

Definindo

$$q_{k,s}(r) = \frac{1}{r}\int_0^r x[\Im_k(x/R) - (1-\varpi)Q_{k,s}(x)]dx, \tag{4.102}$$

obtém-se, após usar a Eq. (4.102) e notar as Eqs. (4.51), (4.52) e (4.100), que

$$q_{k,s}(r) = -(1-\varpi)\sum_{j=1}^{N}\nu_j[A_{k,j}\widehat{I}_1(r/\nu_j)e^{-(R-r)/\nu_j} + C_j S_k(r,\nu_j)] \tag{4.103}$$

onde

$$S_k(r,\nu_j) = V_k(r,\nu_j)\widehat{I}_1(r/\nu_j) - U_k(r,\nu_j)\widehat{K}_1(r/\nu_j), \tag{4.104}$$

podendo-se, então, escrever

$$q_s(r) = \sum_{k=0}^{K} a_k q_{k,s}(r) \tag{4.105}$$

onde $q_{k,s}(r)$ está definida na Eq. (4.103). E, assim, para completar a solução, as constantes $\{a_k\}$ devem ser determinadas. Para encontrar a equação que define estas constantes, pode-se usar as Eqs. (4.90) e (4.105) na Eq. (4.86) e com isto

$$\sum_{k=0}^{K} a_k \Im_k(r/R) = (1-\varpi)[\Gamma(r) + \sum_{k=0}^{K} a_k \Gamma_k(r)]^4 \tag{4.106}$$

onde

$$\Gamma(r) = \Theta_0 + \frac{1}{4}(R^2 - r^2)H + \frac{1}{N_c}L(r)(1-\rho A)^{-1}\varepsilon\Theta_0^4 \tag{4.107}$$

e

$$\Gamma_k(r) = \frac{1}{N_c}[4\rho(1-\rho A)^{-1}L(r)q_{k,s}(R) + L_k(r)]. \tag{4.108}$$

Aqui

$$L(r) = (1-\varpi)\sum_{j=1}^{N}\nu_j^2 A_j[\widehat{I}_0(R/\nu_j) - \widehat{I}_0(r/\nu_j)e^{-(R-r)/\nu_j}] \tag{4.109}$$

e

$$L_k(r) = (1-\varpi)\sum_{j=1}^{N}\nu_j^2\{A_{k,j}[\widehat{I}_0(R/\nu_j) - \widehat{I}_0(r/\nu_j)e^{-(R-r)/\nu_j}] + C_j T_k(r,\nu_j)\} \tag{4.110}$$

com

$$T_k(r,\nu_j) = U_k(R,\nu_j)\widehat{K}_0(R/\nu_j) - U_k(r,\nu_j)\widehat{K}_0(r/\nu_j) - V_k(r,\nu_j)\widehat{I}_0(r/\nu_j). \tag{4.111}$$

Para gerar através da Eq. (4.106) um conjunto de equações discretas, propõe-se seguir os procedimentos tipicamente usados com funções splines: avaliar a Eq. (4.106) e sua derivada (com relação a r) em $r_\alpha = \zeta_\alpha R$ para obter (sendo $K = 2M+1$) o sistema de $K+1$ equações não lineares

$$\sum_{k=0}^{K} a_k \Im_k(\zeta_\alpha) = (1-\varpi)[\Gamma(r_\alpha) + \sum_{k=0}^{K} a_k \Gamma_k(r_\alpha)]^4 \tag{4.112}$$

e

$$\sum_{k=0}^{K} a_k \Im_k^{'}(\zeta_\alpha) = 4R(1-\varpi)[\Gamma(r_\alpha) + \sum_{k=0}^{K} a_k \Gamma_k(r_\alpha)]^3[\Gamma^{'}(r_\alpha) + \sum_{k=0}^{K} a_k \Gamma_k^{'}(r_\alpha)] \tag{4.113}$$

para $\alpha = 0, 1, 2, ..., M$. Das definições dadas no Anexo A pelas Eqs. (A.6), (A.7) e (A.8) nota-se que

$$\Im_{2k}(\zeta_\alpha) = \delta_{\alpha,k} \quad \text{e} \quad \Im_{2k+1}(\zeta_\alpha) = 0 \tag{4.114}$$

e que

$$\Im_{2k}^{'}(\zeta_\alpha) = 0 \quad \text{e} \quad \Im_{2k+1}^{'}(\zeta_\alpha) = \delta_{\alpha,k}, \tag{4.115}$$

para $k, \alpha = 0, 1, 2, ..., M$, onde $\delta_{i,j}$ representa a função delta de Kronecker. Assim, tem-se que as Eqs. (4.112) e (4.113) podem ser reescritas como

$$a_{2\alpha} = (1-\varpi)[\Gamma(r_\alpha) + \sum_{k=0}^{K} a_k \Gamma_k(r_\alpha)]^4 \tag{4.116}$$

e

$$a_{2\alpha+1} = 4R(1-\varpi)[\Gamma(r_\alpha) + \sum_{k=0}^{K} a_k \Gamma_k(r_\alpha)]^3[\Gamma^{'}(r_\alpha) + \sum_{k=0}^{K} a_k \Gamma_k^{'}(r_\alpha)] \tag{4.117}$$

para $\alpha = 0, 1, 2, ..., M$. As Eqs. (4.107) e (4.108) podem ser derivadas para que sejam encontradas as expressões requeridas pela Eq. (4.117), ou seja,

$$\Gamma^{'}(r) = -\frac{1}{2}rH + \frac{1}{N_c}L^{'}(r)(1-\rho A)^{-1}\varepsilon\Theta_0^4 \tag{4.118}$$

e

$$\Gamma_k^{'}(r) = \frac{1}{N_c}[4\rho(1-\rho A)^{-1}L^{'}(r)q_{k,s}(R) + L_k^{'}(r)] \tag{4.119}$$

onde

$$L^{'}(r) = -(1-\varpi)\sum_{j=1}^{N}\nu_j A_j \widehat{I}_1(r/\nu_j)e^{-(R-r)/\nu_j} \tag{4.120}$$

e

$$L_k^{'}(r) = (1-\varpi)\sum_{j=1}^{N}\nu_j\{-A_{k,j}\widehat{I}_1(r/\nu_j)e^{-(R-r)/\nu_j} + C_j\nu_j T_k^{'}(r,\nu_j)\} \tag{4.121}$$

com

$$\nu_j T_k^{'}(r,\nu_j) = U_k(r,\nu_j)\widehat{K}_1(r/\nu_j) - V_k(r,\nu_j)\widehat{I}_1(r/\nu_j). \tag{4.122}$$

Para completar a solução, as constantes $\{a_k\}$ devem ser encontradas mediante a resolução do sistema não linear de equações algébricas definido pelas Eqs. (4.116) e (4.117), sendo que uma aproximação simples (que pode ser eficiente quando o acoplamento radiação-condução não é muito forte) pode ser obtida com o uso de um procedimento iterativo direto para solucionar o referido sistema. Assim, fazendo $N_c \to \infty$ (caso condução dominante) nessas equações obtém-se

$$a_{2\alpha} = (1-\varpi)[\Theta_0 + \frac{1}{4}(R^2 - r_\alpha^2)H]^4 \tag{4.123}$$

e

$$a_{2\alpha+1} = -2R(1-\varpi)[\Theta_0 + \frac{1}{4}(R^2 - r_\alpha^2)H]^3 r_\alpha H \tag{4.124}$$

para $\alpha = 0, 1, ..., M$, que podem ser usadas (como sugestão) no lado direito das Eqs. (4.116) e (4.117) para que possa ser feita a próxima iteração. Entretanto, há casos onde esta iteração simples não converge, e, assim, como um segundo procedimento iterativo, propõe-se o uso do método de Newton. Então, tomando $\mathbf{a}$ como um vetor de $K+1$ componentes $\{a_k\}$ e introduzindo um vetor $\mathbf{F}(\mathbf{a})$, pode-se escrever as Eqs. (4.116) e (4.117) como

$$\mathbf{F}(\mathbf{a}) = \mathbf{0}. \tag{4.125}$$

Assim, a solução iterativa (usando o método de Newton) da Eq. (4.125) pode ser escrita como

$$\mathbf{a}_{j+1} = \mathbf{a}_j - \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{a}_j)\mathbf{F}(\mathbf{a}_j), \quad j = 0, 1, 2, ... \tag{4.126}$$

onde a matriz Jacobiana é

$$\mathbf{J}(\mathbf{a}) = \left[\frac{\partial}{\partial a_0}\mathbf{F}(\mathbf{a}) \;\; \frac{\partial}{\partial a_1}\mathbf{F}(\mathbf{a}) \;\; ... \;\; \frac{\partial}{\partial a_K}\mathbf{F}(\mathbf{a}) \right]. \tag{4.127}$$

Como, segundo observado, a iteração de Newton é necessária principalmente para os casos onde o acoplamento entre os dois modos de transferência de calor é forte, usa-se em vez das Eqs. (4.123) e (4.124),

$$a_{2\alpha} = (1 - \varpi)\Theta_0^4 \tag{4.128}$$

e

$$a_{2\alpha+1} = 0, \tag{4.129}$$

para $\alpha = 0, 1, 2, ..., M$, como valores iniciais quando N_c é pequeno.

4.5.2.1 Resultados Numéricos do Problema Acoplado

Repetindo os procedimentos da aplicação anterior, define-se inicialmente o esquema de quadratura $\{\omega_k, \mu_k\}$ pelo mapeamento linear do esquema de quadratura de Gauss-Legendre no intervalo [0,1]. Então usa-se o programa RG da coleção EISPACK [Smith et al., 1976] para encontrar os autovalores e os autovetores definidos pela Eq. (4.32). E assim, após notar as Eqs. (4.35) e (4.36), calculam-se as constantes de separação e as soluções elementares associadas (que podem ser encontradas de forma numérica ou analítica). Para encontrar as constantes $\{A_j\}$ e $\{A_{k,j}\}$ usam-se as subrotinas DGECO e DGESL da coleção LINPACK

[Dongarra et al., 1979] de forma a resolver os sistemas lineares definidos pelas Eqs. (4.39) e (4.96). Seguindo estes procedimentos, avalia-se todo o necessário para obter as quantidades $\Gamma(r_\alpha)$, $\Gamma_k(r_\alpha)$, $\Gamma^{'}(r_\alpha)$, $\Gamma^{'}_k(r_\alpha)$, e assim resolvem-se as Eqs. (4.116) e (4.117) usando o método recursivo simples ou o método de Newton para que sejam obtidas as constantes $\{a_k\}$. Na implementação da solução proposta são necessárias as avaliações das funções U e V dadas pelas Eqs. (4.94) e (4.95). Para isso, mudam-se algumas variáveis e reescrevem-se estas funções na forma

$$U_k(r,\nu_j) = R^2 E_k(r/R, R/\nu_j) \tag{4.130}$$

e

$$V_k(r,\nu_j) = R^2 G_k(r/R, R/\nu_j) \tag{4.131}$$

onde

$$E_k(x,y) = \int_0^x \tau \Im_k(\tau)\widehat{I}_0(\tau y)e^{-(x-\tau)y}d\tau, \quad x \in [0,1],\ y \geq 0, \tag{4.132}$$

e

$$G_k(x,y) = \int_x^1 \tau \Im_k(\tau)\widehat{K}_0(\tau y)e^{-(\tau-x)y}d\tau, \quad x \in [0,1],\ y > 0. \tag{4.133}$$

Sendo $[\alpha_k, \beta_k]$ o intervalo de definição da função spline $\Im_k(x)$, ou seja,

$$\Im_k(x) = 0, \quad x \notin [\alpha_k, \beta_k], \tag{4.134}$$

pode-se escrever

$$E_k(x,y) = 0, \quad x \leq \alpha_k, \tag{4.135}$$

e

$$E_k(x,y) = \int_{\alpha_k}^{\min\{x,\beta_k\}} \tau \Im_k(\tau)\widehat{I}_0(\tau y)e^{-(x-\tau)y}d\tau, \quad x > \alpha_k. \tag{4.136}$$

De forma semelhante escreve-se

$$G_k(x,y) = 0, \quad x \geq \beta_k, \tag{4.137}$$

e

$$G_k(x,y) = \int_{\max\{x,\alpha_k\}}^{\beta_k} \tau \Im_k(\tau) \widehat{K}_0(\tau y) e^{-(\tau - x)y} d\tau, \quad x < \beta_k. \tag{4.138}$$

Devido à definição das funções splines, neste trabalho foi utilizado um esquema de quadratura de Gauss-Legendre sobre cada subintervalo $[\alpha_k, \beta_k]$ para avaliar as integrais necessárias, obtendo, desta forma, uma boa precisão mesmo com o uso de esquemas de quadraturas de ordem muito baixa.

Finalmente destaca-se que nas implementações feitas pelo método de Newton, o método não foi usado tal como expresso na Eq. (4.126), mas de forma mais eficiente usando

$$\mathbf{a}_{j+1} = \mathbf{a}_j - \mathbf{x}_j \tag{4.139}$$

onde $\mathbf{x}_j$ é a solução do sistema linear

$$\mathbf{J}(\mathbf{a}_j)\mathbf{x}_j = \mathbf{F}(\mathbf{a}_j). \tag{4.140}$$

Uma vez calculadas as constantes $\{a_k\}$, pode-se combinar as Eqs. (4.90) e (4.106) e então calcular a distribuição de temperaturas por

$$\Theta(r) = \Gamma(r) + \sum_{k=0}^{K} a_k \Gamma_k(r) \tag{4.141}$$

onde $\Gamma(r)$ e $\Gamma_k(r)$ são dados pelas Eqs. (4.107) e (4.108). Continuando, pode-se expressar o fluxo de calor radiativo (normalizado) por

$$Q_r(r) = \frac{1}{N_c}[q_s(r) + \Lambda q_b(r)] \tag{4.142}$$

ou então

$$Q_r(r) = \frac{1}{N_c}[\sum_{k=0}^{K} a_k q_{k,s}(r) + \Lambda q_b(r)], \tag{4.143}$$

onde $q_{k,s}(r)$ é dado pelas Eqs. (4.103) e (4.104). Finalmente, uma vez que o fluxo de calor total é

$$Q(r) = \frac{r}{2}H, \tag{4.144}$$

o fluxo de calor condutivo pode ser calculado por

$$Q_c(r) = Q(r) - Q_r(r). \tag{4.145}$$

Para testar a implementação do algoritmo proposto nesta aplicação foram considerados os oito casos listados na Tabela 4.5. Como primeiro passo na avaliação da solução foram solucionados os problemas 1-6, que também haviam sido resolvidos por Siewert e Thomas na Ref. [Siewert e Thomas Jr., 1992] com uso do método P_N. Uma vez que para cinco destes seis problemas encontraram-se exatamente os mesmos resultados numéricos da Ref. [Siewert e Thomas Jr., 1992], estes não foram listados aqui; entretanto, surgiram alguns (poucos) dígitos diferentes em relação ao problema 3, e por este motivo na Tabela 4.6 estão os resultados encontrados neste trabalho referentes a este problema específico. Como mencionado por Siewert e Thomas [Siewert e Thomas Jr., 1992], também notou-se que a iteração simples funciona bem com este problema (assim como a de Newton), mas o mesmo não ocorre (aqui) com os problemas 7 e 8, sendo que para estes dois problemas usou-se a iteração de Newton. Os resultados para os problemas 7 e 8 estão listados na Tabela 4.7 e na Tabela 4.8 respectivamente. Uma vez que o fluxo de calor condutivo é justamente a diferença entre o fluxo de calor total e o radiativo e, sendo que o componente condutivo é pequeno para estes dois casos extremos, foram listados nas Tabelas 4.7 e 4.8 somente a distribuição de temperaturas $\Theta(r)$ e os fluxos de calor total $Q(r)$ e radiativo $Q_r(r)$.

Na resolução dos problemas apresentados, usou-se tipicamente 60 ordenadas discretas, 100 funções splines e 4 pontos de Gauss (para avaliar as funções U e V). Destaca-se ainda que a implementação em FORTRAN, sem esforços especiais, da solução em ordenadas discretas proposta aqui leva em torno de 80 segundos em um computador com processador Pentium 233 MHz com 64 MB de memória.

Tabela 4.5 – Dados físicos para problemas testes

problema	ε	ρ	Θ_0	ϖ	R	N_c	H
1	0.8	0.2	1.0	0.9	1.0	0.05	1.5
2	0.9	0.1	1.0	0.9	0.5	0.05	100
3	0.9	0.1	1.0	0.9	0.05	0.0005	4000
4	0.9	0.1	1.0	0.9	0.5	0.005	40
5	0.9	0.1	1.0	0.9	5.0	0.5	0.4
6	1.0	0.0	1.0	0.9	1.0	0.1	1.0
7	0.8	0.2	1.0	0.9	1.0	0.005	1.5
8	0.8	0.2	1.0	0.9	1.0	0.0005	1.5

Tabela 4.6 – Temperatura e fluxo de calor para o problema 3

r/R	$\Theta(r)$	$Q_c(r)$	$Q_r(r)$	$Q(r)$
0.0	2.04106	0.0	0.0	0.0
0.1	2.03634	1.90641	8.09359	10.0
0.2	2.02159	4.05548	15.9445	20.0
0.3	1.99494	6.71129	23.2887	30.0
0.4	1.95313	10.1762	29.8238	40.0
0.5	1.89126	14.7951	35.2049	50.0
0.6	1.80264	20.9346	39.0654	60.0
0.7	1.67883	28.9189	41.0811	70.0
0.8	1.51008	38.9137	41.0863	80.0
0.9	1.28655	50.7816	39.2184	90.0
1.0	1.0	64.0005	35.9995	100.0

Tabela 4.7 – Temperatura e fluxo de calor para o problema 7

r/R	$\Theta(r)$	$Q_r(r)$	$Q(r)$
0.0	1.02204	0.0	0.0
0.1	1.02202	7.45706(–2)	7.50(–2)
0.2	1.02195	1.49086(–1)	1.50(–1)
0.3	1.02183	2.23451(–1)	2.25(–1)
0.4	1.02163	2.97470(–1)	3.00(–1)
0.5	1.02130	3.70691(–1)	3.75(–1)
0.6	1.02071	4.42059(–1)	4.50(–1)
0.7	1.01957	5.09081(–1)	5.25(–1)
0.8	1.01719	5.65843(–1)	6.00(–1)
0.9	1.01195	5.98335(–1)	6.75(–1)
1.0	1.0	5.73874(–1)	7.50(–1)

Tabela 4.8 – Temperatura e fluxo de calor para o problema 8

r/R	$\Theta(r)$	$Q_r(r)$	$Q(r)$
0.0	1.00233	0.0	0.0
0.1	1.00232	7.49644(–2)	7.50(–2)
0.2	1.00232	1.49928(–1)	1.50(–1)
0.3	1.00231	2.24891(–1)	2.25(–1)
0.4	1.00230	2.99852(–1)	3.00(–1)
0.5	1.00228	3.74810(–1)	3.75(–1)
0.6	1.00226	4.49763(–1)	4.50(–1)
0.7	1.00223	5.24693(–1)	5.25(–1)
0.8	1.00219	5.99405(–1)	6.00(–1)
0.9	1.00203	6.70886(–1)	6.75(–1)
1.0	1.0	6.90959(–1)	7.50(–1)

CAPÍTULO 5

Conclusões

Nesta tese foram abordados, em geometria cilíndrica, dois tópicos de aplicação da equação de Boltzmann em sua forma linearizada: a dinâmica de gases rarefeitos e a transferência radiativa.

Com relação à dinâmica de gases rarefeitos, primeiramente foram desenvolvidas duas formas de avaliar numericamente as chamadas funções de Chapman-Enskog e de Burnett, sendo que para isso foram usadas inicialmente as splines cúbicas de Hermite juntamente com o método da colocação e na segunda proposta, em vista das desvantagens que o método da colocação pode ocasionalmente apresentar em relação à escolha dos pontos de colocação, foram usados os bem conhecidos polinômios de Legendre. Com ambas as propostas foram obtidos os mesmos resultados numéricos e estes concordam com resultados disponíveis na literatura. Vale lembrar ainda que o tratamento numérico dos componentes $k_n(c', c)$ presentes na definição das funções de Chapman-Enskog e de Burnett necessita de cuidados especialmente quando $c' = c$, mas como as referidas funções também fazem parte da composição de diferentes equações modelo (que contrapõem o difícil tratamento da equação linearizada de Boltzmann propriamente dita), este cálculo vem a ser de grande utilidade. Ainda com relação à dinâmica de gases rarefeitos, foi apresentada uma dedução detalhada da equação integral baseada no modelo BGK para descrever o fluxo de um gás rarefeito em um tubo cilíndrico, e a relevância desta dedução está ligada ao fato de que equações integrais como esta são consideradas pontos de partida de formas diferenciadas de se tratar problemas da dinâmica de gases rarefeitos baseados em formulações integrais, ou seja, a partir delas tem-se trabalhado com métodos numéricos ou alternativamente, usando uma transformação proposta por Mitsis, na qual a solução da equação integral passa a ser relacionada aos chamados "pseudo" problemas (exemplificados no Capítulo 2 com a formulação dos problemas fluxo de Poiseuille e "creep" térmico) que a exemplo das Refs. [Barichello et al., 2001] e [Siewert, 2000], foram solucionados de forma eficaz com a aplicação da versão reformulada do método de ordenadas discretas.

Problemas em geometria cilíndrica relacionados à transferência radiativa (já em suas "pseudo" formas) foram tratados com base em uma formulação geral desenvolvida também a partir da versão analítica do método de ordenadas discretas, sendo que duas aplicações foram analisadas: problemas envolvendo somente transferência radiativa (e neste caso também foi tratado o caso conservativo) e problemas não lineares acoplados pelo modo radiação-condução. Contudo, é válido lembrar ainda que esta forma de tratamento associada à formulação integral está restrita aos casos onde é possível a obtenção dos chamados "pseudo" problemas.

E assim, a partir da metodologia desenvolvida pode-se perceber a versatilidade da solução analítica em ordenadas discretas associada à resolução dos "pseudo" problemas, já que sua utilização foi vinculada à resolução de problemas lineares e não-lineares, aplicada a diferentes ramos da teoria de transporte de partículas como no caso dos problemas relacionados à transferência radiativa e dos problemas da dinâmica de gases rarefeitos. Acredita-se que este fato se deve à possibilidade de utilização de esquemas arbitrários de quadratura, bem como ao uso de soluções elementares na forma analítica ou numérica, que permitem tratar, por exemplo, casos de autovalores repetidos. Ainda salienta-se que o problema de autovalores que determina as constantes de separação mostra-se, no contexto desse trabalho, bastante simples e pode ser tratado numericamente de forma mais eficiente que o caso de matrizes tridiagonais simétricas.

Como trabalhos futuros, pretende-se utilizar as funções de Chapman-Enskog e de Burnett no tratamento de equações modelo mais complexas, na dinâmica de gases rarefeitos, ou problemas envolvendo a própria equação linearizada de Boltzmann.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abramowitz, M. and Stegun, I. A., 1964. **"Handbook of Mathematical Functions"**. AMS-55, National Bureau of Standards, Washington, DC.

Anderson Jr., J. D., 1969. "An Engineering Survey of Radiating Shock Layers", **AIAA Journal**, vol. 7, pp. 1665.

Andre, S. and Degiovanni, A., 1995. "A Theoretical Study of the Transient Coupled Conduction and Radiation Heat Transfer in Glass: Phonic diffusivity Measurements by the Flash Technique", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 38, pp. 3401.

Andre, S. and Degiovanni, A., 1998. "A New Way of Solving Transient Radiative-Conductive Heat Transfer Problems", **Jounal of Heat Transfer**, vol. 120, pp. 943.

Anteby, I., Shai, I., and Arbel, A., 2000. "Numerical Calculations for Combined Conduction and Radiation Transient Heat Transfer in a Semitransparent Medium", **Numerical Heat Transfer Part A: Applications**, vol. 37, pp. 359.

Banoczi, J. M. and Kelley, C. T., 1998. "A Fast Multilevel Algorithm for the Solution of Nonlinear Systems of Conductive-Radiative Heat Transfer Equations", **SIAM Journal os Scientific Computing**, vol. 19, pp. 266.

Barichello, L. B., Camargo, M., Rodrigues, P., and Siewert, C. E., 2001. "Unified Solution to Classical Flow Problems Based on the BGK Model", **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 52, pp. 517.

Barichello, L. B., Camargo, M., Rodrigues, P., and Siewert, C. E., 2002a. "An Integral Equation Basic to the BGK Model for Flow in a Cylindrical Tube", **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 53, pp. 769.

Barichello, L. B., Rodrigues, P., and Siewert, C. E., 2002b. "An Analytical Discrete-Ordinates Solution for Dual-Mode Heat Transfer in a Cylinder", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 73, pp. 583.

Barichello, L. B., Rodrigues, P., and Siewert, C. E., 2003. "On Computing the Chapman-Enskog and Burnett Functions". Submetido à publicação.

Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 1999a. "A Discrete-Ordinates Solution for a Non-Grey Model with Complete Frequency Redistribution", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 62, pp. 665.

Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 1999b. "A Discrete-Ordinates Solution for Poiseuille Flow in a Plane Channel", **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 50, pp. 972.

Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 2003. "Some Comments on Modeling the Linearized Boltzmann Equation", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 77, pp. 43.

Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., and Krook, M., 1954. "A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems", **Physical Review**, vol. 94, pp. 511.

Camargo, M., Rodrigues, P., and Barichello, L. B., 2000. "Discrete-Ordinates Solutions to Some Classical Flow Problems in the Rarefied Gas Dynamics", **8TH Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences - ENCIT 2000**. Porto Alegre, RS, Brasil. CD-ROM.

Case, K. M. and Zweifel, P. F., 1967. **"Linear Transport Theory"**. Addison-Wesley Publishing Company, United States of America.

Cercignani, C., 1969. **"Mathematical Methods in Kinetic Theory"**. Plenum Press, New York.

Cercignani, C. and Sernagiotto, F., 1966. "Cylindrical Poiseuille Flow of a Rarefied Gas", **The Physics of Fluids**, vol. 9, pp. 40.

Cercignani, C. and Sernagiotto, F., 1967. “Cylindrical Couette Flow of a Rarefied Gas”, **The Physics of Fluids**, vol. 10, pp. 1200.

Chandrasekhar, S., 1960. **“Radiative Transfer”**. Dover Publications, New York.

Debnath, L., 1997. **“Nonlinear Partial Differential Equations”**. Birkhauser, Boston.

Dongarra, J. J., Bunch, J. R., Moler, C. B., and Stewart, G. W., 1979, **“LINPACK User´s Guide”**. Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM, Philadelphia.

Ferziger, J. H., 1967. “Flow of a Rarefied Gas Through a Cylindrical Tube”, **The Physics of Fluids**, vol. 10, pp. 1448.

Golub, G. H. and Van Loan, C. F., 1989. **“Matrix Computations”**. Jonh Hopkins University Press, Baltimore.

Götz, T., 2002. “Coupling Heat Conduction and Radiative Transfer”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 72, pp. 57.

Hahn, O., Raether, F., ArduiniSchuster, M. C., and Fricke, J., 1997. “Transient Coupled Conductive/Radiative Heat Transfer in Absorbing, Emitting and Scattering Media. Application to Laser-Flash Measurements on Ceramic Materials”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 40, pp. 689.

Hendi, A. A. and Abulwafa, E. M., 2002. “Heat Transfer in a Spherical Turbid Medium with Conduction and Radiation”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 75, pp. 647.

Kelley, C. T., 1996. “Existence and Uniqueness of Solutions of Nonlinear Systems of Conductive-Radiative Heat Transfer Equations”, **Transport Theory and Statistic Physics**, vol. 25, pp. 249.

Klar, A. and Siedow, N., 1998. “Boundary Layers and Domain Decomposition for Radiative Heat Transfer and Diffusion Equations: Applications to Glass Manufacturing Process”, **European Journal of Applied Mathematics**, vol. 9, pp. 351.

Lazard, M., Andre, S., and Maillet, D., 2001. “Transient Coupled Radiative-Conductive Heat Transfer in a Gray Planar Medium with Anisotropic Scattering”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 69, pp. 23.

Lazard, M., Andre, S., Maillet, D., and Degiovanni, A., 2000. “Radiative and Conductive Heat Transfer: A Coupled Model for Parameter Estimation”, **High Temperatures-High Pressures**, vol. 32, pp. 9.

Li, H. Y. and Özışık, M. N., 1991. “Simultaneous Conduction and Radiation in a Two-Dimensional Participating Cylinder with Anisotropic Scattering”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 46, pp. 393.

Lii, C. C. and Özışık, M. N., 1972. “Transient Radiation and Conduction in an Absorbing, Emitting, Scattering Slab with Reflective Boundaries”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 15, pp. 1175.

Liu, L. H., 2002. “Transient Coupled Radiation-Conduction in Infinite Semitransparent Cylinders”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 74, pp. 97.

Liu, L. H. and Tan, H. P., 2001. “Non-Fourier Effects on Transient Coupled Radiative-Conductive Heat Transfer in One-Dimensional Semitransparent Medium Subjected to a Periodic Irradiation”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 71, pp. 11.

Loyalka, S. K., 1975. “Kinetic Theory of Thermal Transpiration and Mechanocaloric Effect II”, **Journal Chemical Physics**, vol. 63, pp. 4054.

Loyalka, S. K. and Hickey, K. A., 1989. “Plane Poiseuille Flow: Near Continuum Results for a Rigid Sphere Gas”, **Physica A**, vol. 160, pp. 395.

Loyalka, S. K., Petrellis, N., and Storvick, T. S., 1975. “Some Numerical Results for the BGK Model: Thermal Creep and Viscous Slip Problems with Arbitrary Accommodation at the Surface”, **The Physics of Fluids**, vol. 18, pp. 1094.

Meyer, C. D., 2000. **“Matrix Analysis and Applied Linear Algebra”**. SIAM, Philadelphia.

Mitsis, G. J., 1963. **“Transport Solutions to the Monoenergetic Critical Problems”**, PhD thesis, Report ANL-6787, Argonne National Laboratory, Chicago.

Modest, M. F., 1993. **“Radiative Heat Transfer”**. McGraw-Hill, New York.

Ohwada, T. and Sone, Y., 1992. “Analysis of Thermal Stress Slip Flow and Negative Thermophoresis Using the Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules”, **European Journal of Mechanics, B/Fluids**, vol. 11, pp. 389.

Özışık, M. N., 1973. **“Radiative Transfer and Interactions with Conduction and Convection”**. Wiley, New York.

Özışık, M. N. and Orlande, H. R. B., 2000. **“Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications”**. Taylor and Francis, New York.

Park, H. M. and Lee, W. J., 2002. “The Solution of Inverse Radiation Problems Using an Efficient Computational Technique”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 73, pp. 41.

Pekeris, C. L. and Alterman, Z., 1957. “Solution of the Boltzmann-Hilbert Integral Equation II. The Coefficients of Viscosity and Heat Conduction”, **Proceedings of the National Academy of Sciences**, vol. 43, pp. 998.

Rodrigues, P., 1998. **“Aspectos Analíticos e Computacionais do Método de Ordenadas Discretas para o Modelo BGK Linearizado”**, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Rodrigues, P. and Barichello, L. B., 2003. “An Integral Equation Approach for Radiative Transfer in a Cylindrical Media”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**. Aceito para publicação.

Ruperti, N. J., Raynaud, M., and Sacadura, J. F., 1996. “A Method for the Solution of the Coupled Inverse Heat Conduction-Radiation Problem”, **Jounal of Heat Transfer**, vol. 118, pp. 10.

Sakami, M., Charette, A., and Le Dez, V., 1996. "Application of the Discrete Ordinates Method to Combined Conductive and Radiative Heat Transfer in a Two-dimensional Complex Geometry", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 56, pp. 517.

Saldanha da Gama, R. M., 1996. "Numerical Simulation of the (Nonlinear) Conduction/Radiation Heat Transfer Process in a Nonconvex and Black Cylindrical Body", **Journal of Computational Physics**, vol. 128, pp. 341.

Schultz, M. N., 1973. **"Spline Analysis"**. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.

Sharipov, F., 1999a. "Non-Isothermal Gas Flow Through Rectangular Microchanels", **Journal of Micromechanics and Microengineering**, vol. 9, pp. 394.

Sharipov, F., 1999b. "Rarefied Gas Through a Long Rectangular Channel", **Journal Vacuum Science and Technology A**, vol. 17, pp. 3062.

Sharipov, F., 2002. "Application of the Cercignani-Lampis Scattering Kernel to Calculations of Rarefied Gas Flow. I. Plane Flow Between Two Parallel Plates", **European Journal of Mechanics, B/Fluids**, vol. 21, pp. 113.

Sharipov, F., 2003. "Application of the Cercignani-Lampis Scattering Kernel to Calculations of Rarefied Gas Flows. III. Poiseuille Flow and Thermal Creep Through a Long Tube", **European Journal of Mechanics, B/Fluids**, vol. 22, pp. 145.

Sharipov, F. and Kalempa, D., 2003. "Velocity Slip and Temperature Jump Coefficients for Gaseous Mixtures. I. Viscous Slip Coefficient", **The Physics of Fluids**, vol. 15, pp. 1800.

Sharipov, F. and Kremer, G. M., 1996. "Linear Couette Flow Between Two Rotating Cylinders", **European Journal of Mechanics, B/Fluids**, vol. 15, pp. 493.

Sharipov, F. and Seleznev, V., 1998. "Data on Interval Rarefied Gas Flows", **Journal of Physical Chemical**, vol. 27, pp. 657.

Siewert, C. E., 1995. “An Improved Iterative Method for Solving a Class of Coupled Conductive-Radiative Heat Transfer Problems”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 54, pp. 599.

Siewert, C. E., 2000. “Poiseuille and Thermal-Creep Flow in a Cylindrical Tube”, **Journal of Computational Physics**, vol. 160, pp. 470.

Siewert, C. E., 2002a. Comunicação pessoal.

Siewert, C. E., 2002b. “On Computing the Chapman-Enskog Functions for Viscosity and Heat Transfer and the Burnett Functions”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 74, pp. 789.

Siewert, C. E., 2003a. “The Linearized Boltzmann Equation: A Concise and Accurate Solution of the Temperature-Jump Problem”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 77, pp. 417.

Siewert, C. E., 2003b. “The Linearized Boltzmann Equation: A Concise and Accurate Solution to Basic Flow Problems”, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 54, pp. 273.

Siewert, C. E. and Sharipov, F., 2002. “Model Equations in Rarefied Gas Dynamics: Viscous-Slip and Thermal-Slip Coefficients”, **The Physics of Fluids**, vol. 14, pp. 4123.

Siewert, C. E. and Thomas Jr., J. R., 1984. “Neutron Transport Calculations in Cylindrical Geometry”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 87, pp. 107.

Siewert, C. E. and Thomas Jr., J. R., 1991a. “A Computational Method for Solving a Class of Coupled Conductive-Radiative Heat Transfer Problems”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 45, pp. 273.

Siewert, C. E. and Thomas Jr., J. R., 1991b. “On Coupled Conductive-Radiative Heat Transfer Problems in a Sphere”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 46, pp. 63.

Siewert, C. E. and Thomas Jr., J. R., 1992. "On Coupled Conductive-Radiative Heat Transfer Problems in a Cylinder", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 48, pp. 227.

Silva Neto, A. J. and Özışık, M. N., 1993. "An Inverse Problem of Estimating Thermal Conductivity, Optical Thickness, and Single Scattering Albedo of a Semi-Transparent Medium", **First International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice**, vol. 1, pp. 267.

Simons, S., 1967. "Poiseuille Gas Flow in the Transition Regime. I. Formulation of the General Theory", **Proceedings of the Royal Society A**, vol. 301, pp. 387.

Smith, B. T., Boyle, J. M., Dongarra, J. J., Garbow, B. S., Ikebe, Y., Klema, V. C., and Moler, C. B., 1976, **"Matrix Eigensystem Routines - EISPACK Guide"**. Springer-Verlag, Berlin.

Spuckler, C. M. and Siegel, R., 1992. "Refractive Index Effects on Radiative Behavior of a Heated Absorbing-Emitting Layer", **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, vol. 6, pp. 596.

Spuckler, C. M. and Siegel, R., 1993. "Refractive Index and Scattering Effects on Radiative Behavior of a Semitranparent Layer", **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, vol. 7, pp. 302.

Tan, H. P., Ruan, L. M., Xia, X. L., Yu, Q. Z., and Tong, T. W., 1999. "Transient Coupled Radiative and Conductive Heat Transfer in an Absorbing, Emitting and Scattering Medium", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 42, pp. 2967.

Thynell, S. T. and Özışık, M. N., 1987. "Radiation Transfer in Absorbing, Emitting, Isotropically Scattering, Homogeneous Cylindrical Media", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 38, pp. 413.

Valougeorgis, D. and Thomas Jr., J. R., 1986. "Exact Numerical Results for Poiseuille and Thermal Creep Flow in a Cylindrical Tube", **The Physics of Fluids**, vol. 29, pp. 423.

Vargas, R. and de Vilhena, M. T., 1999. “A Closed-Form Slution for the One-Dimensional Radiative Conductive Problem by the Decomposition and LTS_N Methods”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 61, pp. 303.

Viskanta, R., 1965. “Heat Transfer by Conduction and Radiation in Absorbing and Scattering Materials”, **Jounal of Heat Transfer**, vol. 87, pp. 143.

Viskanta, R. and Anderson, E. E., 1975. “Heat Transfer in Semi-Transparent Solids”, **Advances in Heat Transfer**, vol. 11, pp. 317.

Wang, P. Y., Cheng, H. E., and Tan, H. P., 2002. “Transient Thermal Analysis of Semitransparent Composite Layer with an Opaque Boundary”, **International Journal of Heat e Mass Transfer**, vol. 45, pp. 425.

Williams, M. M. R., 1971. **“Mathematical Methods in Particle Transport Theory”**. Butterworth, London.

ANEXO A

Funções Splines

Para definir as splines cúbicas de Hermite considera-se primeiramente, de acordo com a Ref. [Schultz, 1973], $M + 1$ nós ζ_α definidos no intervalo $[0, 1]$ descritos na forma

$$\zeta_\alpha = (\alpha/M)^m, \quad \alpha = 0, 1, ..., M \tag{A.1}$$

sendo que neste trabalho está-se usando a distribuição quadrática ($m = 2$). Assim, para expressar uma função $Y(x)$ definida no intervalo $[0, 1]$ em termos das funções splines escreve-se

$$Y(x) = \sum_{\alpha=0}^{K} a_\alpha \mathcal{F}_\alpha(x) \tag{A.2}$$

onde os coeficientes a_α são constantes e $K = 2M + 1$. Sendo que há duas funções splines $\mathcal{F}_\alpha(x)$ associadas a cada nó e que elas estão definidas diferentemente para valores pares e ímpares de α [Barichello et al., 2002b], pode-se então escrever

$$\mathcal{F}_{2\beta}(x) = \psi_\beta(x) \quad \text{e} \quad \mathcal{F}_{2\beta+1}(x) = \varphi_\beta(x) \tag{A.3}$$

para $\beta = 0, 1, ..., M$. Usando as definições

$$f_\alpha(x) = \frac{x - \zeta_{\alpha-1}}{\zeta_\alpha - \zeta_{\alpha-1}} \tag{A.4}$$

e

$$g_\alpha(x) = \frac{\zeta_{\alpha+1} - x}{\zeta_{\alpha+1} - \zeta_\alpha} \tag{A.5}$$

e considerando que as funções splines são nulas fora dos intervalos onde estão definidas, pode-se escrever as funções ψ como

$$\psi_0(x) = g_0^2(x)[3 - 2g_0(x)], \quad x \in [\zeta_0, \zeta_1], \tag{A.6}$$

$$\psi_\alpha(x) = \begin{cases} f_\alpha^2(x)[3 - 2f_\alpha(x)], & x \in [\zeta_{\alpha-1}, \zeta_\alpha], \\ g_\alpha^2(x)[3 - 2g_\alpha(x)], & x \in [\zeta_\alpha, \zeta_{\alpha+1}], \end{cases} \tag{A.7}$$

para $\alpha = 1, 2, ..., M - 1$, e

$$\psi_M(x) = f_M^2(x)[3 - 2f_M(x)], \quad x \in [\zeta_{M-1}, \zeta_M]. \tag{A.8}$$

De forma semelhante as funções φ podem ser reescritas na forma

$$\varphi_0(x) = xg_0^2(x), \quad x \in [\zeta_0, \zeta_1], \tag{A.9}$$

$$\varphi_\alpha(x) = \begin{cases} (x - \zeta_\alpha)f_\alpha^2(x), & x \in [\zeta_{\alpha-1}, \zeta_\alpha], \\ (x - \zeta_\alpha)g_\alpha^2(x), & x \in [\zeta_\alpha, \zeta_{\alpha+1}], \end{cases} \tag{A.10}$$

para $\alpha = 1, 2, ..., M - 1$, e

$$\varphi_M(x) = (x - \zeta_M)f_M^2(x), \quad x \in [\zeta_{M-1}, \zeta_M]. \tag{A.11}$$

Seguindo ainda a definição das splines cúbicas de Hermite [Schultz, 1973] pode-se calcular os coeficientes da Eq. (A.2) usando

$$a_{2\alpha} = Y(x)|_{x=\zeta_\alpha} \tag{A.12}$$

e

$$a_{2\alpha+1}(x) = \frac{d}{dx}Y(x)|_{x=\zeta_\alpha} \tag{A.13}$$

para $\alpha = 0, 1, ..., M$.

ANEXO B

Cálculos Intermediários

Neste anexo são mostrados alguns cálculos intermediários necessários na derivação da equação integral apresentada no Capítulo 3; outros casos seguem derivação análoga.

Assim, sendo que na Eq. (3.57) tem-se

$$\xi X(r,\xi) = \int_r^R \int_{-1}^1 W(r,\xi,x,\mu) d\mu dx, \tag{B.1}$$

a partir da Eq. (3.53) obtém-se

$$\xi X(r,\xi) = \int_r^R \int_{-1}^1 S(x,\xi) \frac{\exp\{-[x\mu_0(x,r,\mu) - r\mu]/\xi\}}{\mu_0(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}} d\mu dx, \tag{B.2}$$

ou então

$$\xi X(r,\xi) = \int_r^R xS(x,\xi) \int_{-1}^1 \frac{\exp\{-[x\mu_0(x,r,\mu) - r\mu]/\xi\}}{x\mu_0(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}} d\mu dx. \tag{B.3}$$

Na Eq. (3.58) tem-se

$$x\mu_0(x,r,\mu) - r\mu = p(x,r,\alpha), \tag{B.4}$$

então, elevando ao quadrado ambos os lados desta equação e substituindo (no primeiro termo) o valor da expressão $\mu_0(x,r,\mu)$ dado pela Eq. (3.31), obtém-se

$$x^2 - r^2 + 2r^2\mu^2 - 2r\mu x\mu_0(x,r,\mu) = [p(x,r,\alpha)]^2 \tag{B.5}$$

que devido à transformação dada pela Eq. (B.4) torna-se

$$x^2 - r^2 + 2r^2\mu^2 - 2r\mu[p(x,r,\alpha) + r\mu] = [p(x,r,\alpha)]^2 \tag{B.6}$$

de onde se obtém

$$\mu = \frac{x^2 - r^2 - [p(x,r,\alpha)]^2}{2rp(x,r,\alpha)} \tag{B.7}$$

que pela Eq. (3.59) pode ser reescrito na forma

$$\mu = \frac{\alpha x - r}{p(x,r,\alpha)}. \tag{B.8}$$

Derivando-se a equação anterior com relação a α, e utilizando ainda a Eq. (3.59), encontra-se

$$\frac{d\mu}{d\alpha} = \frac{x^2(x - \alpha r)}{[p(x,r,\alpha)]^3}. \tag{B.9}$$

Para reescrever a Eq. (B.3), pode-se calcular a expressão $(1-\mu^2)^{1/2}$ utilizando a Eq. (B.8) através da expressão

$$\begin{aligned}
(1-\mu^2)^{1/2} &= \left[1 - \frac{(\alpha^2 x^2 - 2\alpha x r + r^2)}{p^2(x,r,\alpha)}\right]^{1/2} \\
&= \left[\frac{p^2(x,r,\alpha) - (\alpha^2 x^2 - 2\alpha x r + r^2)}{p^2(x,r,\alpha)}\right]^{1/2} \\
&= \left[\frac{x^2 + r^2 - 2xr\alpha - \alpha^2 x^2 + 2\alpha x r - r^2}{[p(x,r,\alpha)]^2}\right]^{1/2} \\
&= \frac{x(1-\alpha^2)^{1/2}}{p(x,r,\alpha)}.
\end{aligned} \tag{B.10}$$

Já a expressão $x\mu_0(x,r,\mu)$, pode ser obtida usando-se a Eq. (3.31) na composição do seguinte cálculo

$$\begin{aligned}
[x\mu_0(x,r,\mu)]^2 &= x^2 - r^2 + r^2\mu^2 \\
&= x^2 - r^2(1-\mu^2) \\
&= x^2 - \frac{r^2 x^2 (1-\alpha^2)}{[p(x,r,\alpha)]^2} \\
&= \frac{x^2\{[p(x,r,\alpha)]^2 - r^2(1-\alpha^2)\}}{[p(x,r,\alpha)]^2} \\
&= \frac{x^2\{x^2 - 2xr\alpha + r^2\alpha^2\}}{[p(x,r,\alpha)]^2} \\
&= \frac{x^2(x - r\alpha)^2}{[p(x,r,\alpha)]^2}
\end{aligned} \tag{B.11}$$

ou seja

$$x\mu_0(x,r,\mu) = \frac{x(x-r\alpha)}{p(x,r,\alpha)}. \tag{B.12}$$

Com os cálculos efetuados anteriormente pode-se obter

$$\frac{1}{x\mu_0(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}}\frac{d\mu}{d\alpha} = \frac{1}{\frac{x(x-r\alpha)}{p(x,r,\alpha)}\frac{x(1-\alpha^2)^{1/2}}{p(x,r,\alpha)}}\frac{x^2(x-\alpha r)}{[p(x,r,\alpha)]^3} \tag{B.13}$$

ou seja

$$\frac{1}{x\mu_0(x,r,\mu)(1-\mu^2)^{1/2}}\frac{d\mu}{d\alpha} = \frac{1}{p(x,r,\alpha)(1-\alpha^2)^{1/2}}. \tag{B.14}$$

E assim, finalmente pode-se reescrever a Eq. (B.3) na forma

$$\xi X(r,\xi) = \int_r^R xS(x,\xi)\int_{-1}^1 \frac{\exp\{-[x\mu_0(x,r,\mu)-r\mu]/\xi\}}{p(x,r,\alpha)(1-\alpha^2)^{1/2}}d\alpha dx, \tag{B.15}$$

ou ainda

$$\xi X(r,\xi) = \int_r^R xS(x,\xi)\int_{-1}^1 \frac{\exp\{-p(x,r,\alpha)/\xi\}}{p(x,r,\alpha)(1-\alpha^2)^{1/2}}d\alpha dx. \tag{B.16}$$