

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

**EFEITOS DE SUPERFÍCIE NA DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS:  
UMA ANÁLISE BASEADA NO NÚCLEO DE ESPALHAMENTO DE  
CERCIGNANI-LAMPIS**

por

Rosenei Felipe Knackfuss

Tese para obtenção do Título de  
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, janeiro de 2005

**EFEITOS DE SUPERFÍCIE NA DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS:  
UMA ANÁLISE BASEADA NO NÚCLEO DE ESPALHAMENTO DE  
CERCIGNANI-LAMPIS**

por

Rosenei Felipe Knackfuss

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<sup>a</sup>. Dra. Liliane Basso Barichello

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Felix Sharipov (DepFís/UFPR-PR)

Prof. Dr. José Vanderlei Prestes de Oliveira (DepMat/UFSM-RS)

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

Prof. Dr. Volnei Borges (PROMEC/UFRGS-RS)

Prof. Dr. Flávio José Lorini  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 25 de janeiro de 2005

Para meus filhos  
*Leonardo e Aline*

“Se puder ver tão longe, é porque gigantes me transportaram em seus ombros”.

*Isaac Newton*

## AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha orientadora, professora Liliane Basso Barichello, por sua enorme dedicação, pelos seus ensinamentos, pela sua competência e entusiasmo na condução deste trabalho de doutorado.

Expresso minha gratidão a todos os membros do Conselho de Ensino Pesquisa e Extensão (CEPE) da Universidade Federal de Santa Maria, em especial a colega e professora Vera Regina Lima Garcia pelo empenho demonstrado junto aos membros do CEPE, permitindo, com isto, o meu afastamento. Agradeço aos membros da Comissão Permanente de Vestibular (COPERVES) representada pelo seu presidente, professor Dario Trevisan, e a Pró-Reitoria de Graduação da Universidade Federal de Santa Maria, pelo entusiasmo e pela luta para que o meu afastamento fosse efetivado. A minha amiga e colega, professora Carmem Andrade, pelo incentivo. Ao meu colega e amigo, professor José Vanderlei Prestes de Oliveira (Pardal) pelo incentivo e ajuda na minha instalação em Porto Alegre. As colegas e amigas, Ana Paula, Luciane, Mariza e Patrícia pelas discussões, estudos, troca de conhecimentos e apoio recebido.

Agradeço também aos meus amigos e colegas, Renato, Andréia e Cláudia pelo apoio e, principalmente, pela amizade sincera. A todos os amigos que conquistei durante esses quatro anos em Porto Alegre, que de uma forma ou de outra colaboraram nesta conquista. Aos professores Siewert e Sharipov pelos esclarecimentos e sugestões durante a realização desse trabalho.

Minha especial gratidão aos meus pais pelo incentivo e oportunidade que me deram para estudar, sempre acreditando nos meus sonhos. Aos meus familiares que sempre torceram por mim. A minha esposa e aos meus filhos, Leonardo e Aline, que sempre me apoiaram durante essa caminhada, entendendo minha ausência e a falta de tempo.

## RESUMO

### EFEITOS DE SUPERFÍCIE NA DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS: UMA ANÁLISE BASEADA NO NÚCLEO DE ESPALHAMENTO DE CERCIGNANI-LAMPIS

Neste trabalho, uma versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) é usada para resolver problemas da dinâmica de gases rarefeitos, enfocando a interação do gás com a superfície, que é modulada pela lei de Cercignani-Lampis, a qual inclui a consideração de dois coeficientes de acomodação. Os problemas para uma espécie (Fluxo de Poiseuille, problema *Creep* Térmico, Fluxo de Couette, problema de Deslizamento Térmico, problema de Deslizamento Viscoso e problema de Salto de Temperatura) são formulados a partir dos modelos BGK e S da equação linearizada de Boltzmann. Para o caso de problemas de mistura binária de gases (problema de Salto de Temperatura, problema de Deslizamento Térmico e problema de Deslizamento Viscoso) é usado o modelo de McCormack. A solução em ordenadas discretas analítica se mostra eficiente e precisa e uma série de resultados é apresentada no sentido de estabelecer uma análise detalhada da influência dos efeitos de superfície para todos os problemas.

Autor: Rosenei Felipe Knackfuss

Orientador: Prof<sup>a</sup>. 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 2005.

## **ABSTRACT**

### **SURFACE EFFECTS IN RAREFIED GAS DYNAMICS: AN ANALYSIS BASED ON THE CERCIGNANI-LAMPIS SCATTERING KERNEL**

In this work, an analytical version of the discrete-ordinates method (the ADO method) is used to develop solutions for a class of problems in the rarefied gas dynamics field. Special attention is given to the gas-surface interaction, which is modelled by the Cercignani-Lampis kernel, that considers two accommodation coefficients. The one-gas species problems (Poiseuille flow problem, Thermal-creep flow problem, Couette flow problem, Thermal-slip problem, Viscous-slip problem and Temperature-jump problem) are formulated with the BGK and S-model equations. For the binary-gas problems (Temperature-jump problem, Thermal-slip problem and Viscous-slip problem) the McCormack model is used. The ADO solution showed to be efficient and accurate and a series of results were presented in order to establish a detailed analysis of the influence of the surface effects for all the problems.

Author: Rosenei Felipe Knackfuss

Orientador: Prof<sup>a</sup>. 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 2005.

## ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTOS DA DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS</b> .....	<b>13</b>
2.1	Equação Linearizada de Boltzmann .....	13
2.2	Livre Caminho Médio .....	16
2.3	Núcleos Sintéticos e Equações Modelo .....	18
2.4	Modelo CES .....	20
2.5	Modelo CLF .....	22
2.6	Modelo BGK e Modelo S .....	24
2.7	Condições de Contorno .....	26
2.8	Grandezas Físicas .....	30
<b>3</b>	<b>FORMULAÇÃO MATEMÁTICA - CASO DE UM GÁS</b> .....	<b>32</b>
3.1	Formulação Geral para os Modelos BGK e S .....	33
3.2	Alguns Problemas Clássicos .....	38
3.2.1	Fluxo de Poiseuille .....	38
3.2.2	Problema <i>Creep</i> Térmico .....	40
3.2.3	Fluxo de Couette .....	41
3.2.4	Problema de Deslizamento Térmico .....	43
3.2.5	Problema de Deslizamento Viscoso .....	44
3.3	Problema de Salto de Temperatura .....	46
<b>4</b>	<b>PROBLEMAS DE MISTURA DE GASES</b> .....	<b>54</b>
4.1	O Modelo de McCormack .....	54
4.2	Condições de Contorno .....	61
4.3	Grandezas Físicas .....	62



4.4	Problema de Salto de Temperatura .....	63
4.5	Problema de Deslizamento Viscoso .....	67
4.6	Problema de Deslizamento Térmico .....	71
<b>5</b>	<b>SOLUÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS - CASO DE UM GÁS .....</b>	<b>73</b>
5.1	O Método de Ordenadas Discretas .....	73
5.2	Soluções Particulares .....	78
5.3	Modelo BGK - Cercignani-Lampis .....	81
5.3.1	Fluxo de Poiseuille e Problema <i>Creep</i> Térmico .....	81
5.3.2	Fluxo de Couette .....	84
5.3.3	Problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso .....	86
5.4	Modelo S - Cercignani-Lampis .....	89
5.4.1	Fluxo de Couette .....	89
5.4.2	Problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso .....	91
5.5	Modelo BGK - Difuso-Especular .....	94
5.5.1	Fluxo de Couette .....	94
5.6	Modelo S - Difuso-Especular .....	95
5.6.1	Fluxo de Couette .....	95
5.7	Problema de Salto de Temperatura .....	96
5.7.1	Problema de Salto de Temperatura - Modelo BGK - Cercignani-Lampis	96
5.7.2	Problema de Salto de Temperatura - Modelo S - Cercignani-Lampis ..	102
5.7.3	Problema de Salto de Temperatura - Modelo S - Difuso-Especular ....	109
<b>6</b>	<b>SOLUÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS - MISTURA DE GASES ..</b>	<b>112</b>
6.1	Modelo de McCormack - Cercignani-Lampis .....	112
6.1.1	Problema de Salto de Temperatura .....	115
6.1.2	Problema de Deslizamento Viscoso .....	128
6.1.3	Problema de Deslizamento Térmico .....	133
<b>7</b>	<b>ASPECTOS COMPUTACIONAIS E RESULTADOS NUMÉRICOS .....</b>	<b>138</b>
7.1	Considerações Gerais .....	138
7.2	Resultados das Soluções em Ordenadas Discretas .....	140

7.2.1	Fluxo de Poiseuille .....	141
7.2.2	Problema <i>Creep</i> Térmico .....	148
7.2.3	Fluxo de Couette .....	153
7.2.4	Problema de Deslizamento Térmico.....	167
7.2.5	Problema de Deslizamento Viscoso .....	169
7.2.6	Problema de Salto de Temperatura .....	173
7.2.7	Problemas de Mistura de Gases .....	189
<b>8</b>	<b>CONCLUSÕES .....</b>	<b>198</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>200</b>

## LISTA DE SÍMBOLOS

### *Letras Romanas*

$A_p$	Coeficiente de deslizamento viscoso
$A_t$	Coeficiente de deslizamento térmico
$\mathbf{c}$	Vetor velocidade adimensional
$C$	Concentração molar
$\mathbf{F}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$	Núcleo de espalhamento sintético
$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}')$	Função de distribuição de partículas
$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$	Maxwelliana local
$h(\mathbf{r}, \mathbf{v})$	Perturbação causada à distribuição Maxwelliana
$I_0(w)$	Função de Bessel modificada
$J(f', f)$	Operador de colisão
$k$	Constante de Boltzmann
$K$	Gradiente de velocidade
$K_i$	Gradiente de temperatura na direção $i$
$Kn$	Número de Knudsen
$\mathbf{K}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$	Núcleo de espalhamento
$l$	Livre caminho médio
$\mathcal{L}$	Operador de colisão linearizado da equação linearizada de Boltzmann
$N$	Ordem de quadratura de Gauss
$N(y)$	Desvio de densidade
$n_0$	Densidade de equilíbrio
$n(\mathbf{r})$	Densidade de partículas
$p$	Perfil de tensão de cisalhamento
$P_{xy}$	Componente do tensor de pressão
$Pr$	Número de Prandtl
$Q$	Taxa de fluxo de calor
$q(y)$	Perfil de fluxo de calor
$\mathbf{r}$	Vetor posição

$R_i$	Gradiente de temperatura na direção $i$
$\mathbf{R}(\mathbf{v}' : \mathbf{v})$	Núcleo de espalhamento de Maxwell
$\mathbf{R}_{CL}(\mathbf{v}' : \mathbf{v})$	Núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis
$S(\mathbf{c})$	Termo de fonte
$T_0$	Temperatura de referência
$T(y)$	Desvio de temperatura
$U$	Taxa de fluxo de partículas
$u(y)$	Perfil de velocidade
$\mathbf{v}$	Vetor velocidade de partículas
$W$	Função frequência de espalhamento diferencial
$w_k$	Pesos da quadratura
$y$	Variável espacial adimensional

*Letras Gregas*

$\alpha$	Coefficiente de acomodação
$\alpha_n$	Coefficiente de acomodação normal
$\alpha_t$	Coefficiente de acomodação tangencial
$\delta$	Delta de Kronecker
$\delta^*$	Função de Dirac
$\eta(c)$	Frequência de colisão das partículas de gás
$\lambda_*$	Condutividade térmica
$\mu_*$	Viscosidade
$\Psi$	Matriz característica
$\psi$	Função característica
$\xi_k$	Pontos de quadratura
$\sigma_0$	Diâmetro de colisão das partículas de gás
$\zeta$	Coefficiente de salto de temperatura
$\zeta_d$	Coefficiente de deslizamento térmico
$\zeta_k$	Coefficiente de deslizamento viscoso

## ÍNDICE DE FIGURAS

3.1	Salto de Temperatura .....	47
7.1	Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade, $\alpha_t = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ .....	159
7.2	Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor, $\alpha_t = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ .....	159
7.3	<i>Creep</i> Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade, $\alpha_t = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ . ....	160
7.4	<i>Creep</i> Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor, $\alpha_t = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ . ....	160
7.5	Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade, $a = 0.5$ e $\alpha_t = 0.5$ . ....	161
7.6	Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade, $a = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ . ....	161
7.7	<i>Creep</i> Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade, $a = 0.5$ , $\alpha_t = 0.5$ . ....	162
7.8	<i>Creep</i> Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade, $a = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ .....	162
7.9	Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor, $a = 0.5$ e $\alpha_t = 0.5$ . ....	163
7.10	Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor, $a = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ .....	163
7.11	<i>Creep</i> Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor, $a = 0.5$ e $\alpha_t = 0.5$ . ....	164

7.12	<i>Creep</i> Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor, $a = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ . . . . .	164
7.13	Fluxo de Couette - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade, $a = 0.5$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	165
7.14	Fluxo de Couette - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade, $a = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ . . . . .	165
7.15	Fluxo de Couette - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor, $a = 0.5$ e $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	166
7.16	Fluxo de Couette - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor, $a = 0.5$ e $\alpha_n = 0.5$ . . . . .	166
7.17	Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Coeficiente de Salto de Temperatura. . . . .	181
7.18	Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Coeficiente de Salto de Temperatura, $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	182
7.19	Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Coeficiente de Salto de Temperatura, $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	182
7.20	Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura, $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	183
7.21	Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis : Desvio de Densidade, $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	184
7.22	Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura, $\alpha_t = 0.5$ , $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	184
7.23	Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Densidade, $\alpha_t = 0.5$ , $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	185
7.24	Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura, $\alpha_t = 0.5$ , $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	185
7.25	Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Densidade, $\alpha_t = 0.5$ , $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	186
7.26	Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura, $\alpha_n = 0.5$ . . . . .	186

7.27 Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-	
Lampis - Desvio de Densidade, $\alpha_n = 0.5$ .....	187
7.28 Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-	
Lampis - Desvio de Temperatura, $\alpha_n = 0.5$ , $\varepsilon = \varepsilon_p$ . ....	187
7.29 Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-	
Lampis - Desvio de Densidade, $\alpha_n = 0.5$ , $\varepsilon = \varepsilon_p$ .....	188
7.30 Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-	
Lampis - Desvio de Temperatura, $\alpha_n = 0.5$ , $\varepsilon = \varepsilon_t$ . ....	188
7.31 Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-	
Lampis - Desvio de Densidade, $\alpha_n = 0.5$ , $\varepsilon = \varepsilon_t$ . ....	189

## ÍNDICE DE TABELAS

7.1	Fluxo de Poiseuille: perfil de velocidade $u_p$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	142
7.2	Fluxo de Poiseuille: perfil de velocidade $u_p$ , $2a = 2$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	143
7.3	Fluxo de Poiseuille: taxa de fluxo de partículas $U_p$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	144
7.4	Fluxo de Poiseuille: perfil de fluxo de calor $q_p$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	145
7.5	Fluxo de Poiseuille: taxa de fluxo de calor $Q_p$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	146
7.6	Fluxo de Poiseuille: perfil de velocidade $u_p$ e perfil de fluxo de calor $q_p$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	147
7.7	<i>Creep</i> Térmico: perfil de velocidade $u_t$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	149
7.8	<i>Creep</i> Térmico: perfil de velocidade $u_t$ , $2a = 2$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	149
7.9	<i>Creep</i> Térmico: taxa de fluxo de partículas $U_t$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	150
7.10	<i>Creep</i> Térmico: perfil de fluxo de calor $q_t$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	151
7.11	<i>Creep</i> Térmico: perfil de fluxo de calor $q_t$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 0.1$ . . . . .	151
7.12	<i>Creep</i> Térmico: perfil de velocidade $u_t$ e perfil de fluxo de calor $q_t$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	152
7.13	Poiseuille e <i>Creep</i> Térmico: comparação de resultados, $\alpha = \alpha_t = 0.5$ e $\alpha_n =$ $0.5$ . . . . .	152
7.14	Fluxo de Couette com $u_w = 1$ : perfil de velocidade $u_c$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	154
7.15	Fluxo de Couette com $u_w = 1$ : perfil de fluxo de calor $q_c$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	154
7.16	Fluxo de Couette com $u_w = 1$ : componente do tensor de pressão $P_{xy}$ , $\alpha_t = 1.0$ . . . . .	155
7.17	Fluxo de Couette com $u_w = 1$ : componente do tensor de pressão $P_{xy}$ , $\alpha_t = 1.0$ . . . . .	155
7.18	Fluxo de Couette com $u_w = 1$ : taxa de fluxo de partículas $U_c$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	156
7.19	Fluxo de Couette com $u_w = 1$ : taxa de fluxo de calor $Q_c$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	156
7.20	Fluxo de Couette com $u_w = 1$ : perfil de velocidade $u_c$ e perfil de fluxo de calor $q_c$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 1.0$ . . . . .	156
7.21	Fluxo de Couette com $u_w = 1$ : perfil de velocidade $u_c$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 1.0$ , $N = 60$ . . . . .	157



7.22	Fluxo de Couette com $u_w = 1$ : perfil de fluxo de calor $q_c$ , $2a = 1$ , $\alpha_t = 1.0$ . . . . .	157
7.23	Problema de Deslizamento Térmico: perfil de velocidade $u_d$ , $\alpha_t = 0.1$ . . . . .	167
7.24	Problema de Deslizamento Térmico: coeficiente de deslizamento térmico $\zeta_d$ . . . . .	168
7.25	Problema de Deslizamento Viscoso: perfil de velocidade $u_k$ , $\alpha_t = 0.1$ . . . . .	169
7.26	Problema de Deslizamento Viscoso: perfil de fluxo de calor $q_k$ , $\alpha_t = 0.1$ . . . . .	170
7.27	Problema de Deslizamento Viscoso: a. Coeficiente de deslizamento viscoso $\zeta_k$ . . . . .	170
7.28	Problema de Deslizamento Viscoso: b. Coeficiente de deslizamento viscoso $\zeta_k$ . . . . .	171
7.29	Problema de Deslizamento Viscoso: coeficiente de deslizamento viscoso $\zeta_k$ , $\alpha_t = 0.5$ , $\alpha_n = 0.5$ , condições de contorno de Cercignani-Lampis. . . . .	171
7.30	Problema de Deslizamento Viscoso: coeficiente de deslizamento viscoso $\zeta_k$ , modelo BGK, condições de contorno de Cercignani-Lampis. . . . .	171
7.31	Problema de Deslizamento Viscoso: coeficiente de deslizamento viscoso $\zeta_k$ , modelo S ( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ), condições de contorno de Cercignani-Lampis. . . . .	172
7.32	Problema de Deslizamento Viscoso: coeficiente de deslizamento viscoso $\zeta_k$ , modelo S ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ), condições de contorno de Cercignani-Lampis. . . . .	172
7.33	Salto de Temperatura: a. Coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ . . . . .	173
7.34	Salto de Temperatura: b. Coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ , $\alpha_t = 0.25$ . . . . .	174
7.35	Salto de Temperatura: c. Coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	174
7.36	Salto de Temperatura: d. Coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ , $\alpha_t = 1.0$ . . . . .	174
7.37	Salto de Temperatura: e. Coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ , Modelo S - CL, $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	174
7.38	Salto de Temperatura: a. Desvio de temperatura $T(y)$ e densidade $N(y)$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	175
7.39	Salto de Temperatura: b. Desvio de temperatura $T(y)$ e densidade $N(y)$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	176
7.40	Salto de Temperatura: c. Desvio de temperatura $T(y)$ e densidade $N(y)$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	177
7.41	Salto de Temperatura: d. Desvio de temperatura $T(y)$ e densidade $N(y)$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	178
7.42	Salto de Temperatura: e. Desvio de temperatura $T(y)$ e densidade $N(y)$ , $\alpha_t = 0.5$ . . . . .	179

7.43 Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ , $\alpha = 0.5$ , condições de contorno difuso-especular. ....	180
7.44 Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ , $\alpha_t = 0.5$ , $\alpha_n = 0.5$ , condições de contorno de Cercignani-Lampis. ....	180
7.45 Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ , modelo BGK, condições de contorno de Cercignani-Lampis. ....	180
7.46 Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ , modelo S ( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ), condições de contorno de Cercignani-Lampis. ....	180
7.47 Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ , modelo S ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ), condições de contorno de Cercignani-Lampis. ....	181
7.48 Coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ para a mistura Ar-Ne, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis. ....	191
7.49 Coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ para a mistura Xe-He, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis. ....	192
7.50 Coeficiente de salto de temperatura $\zeta$ para mistura de gases, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis, ( $C = 0$ ou $C = 1$ ou $m_1 = m_2$ , $d_1 = d_2$ ). ....	192
7.51 Desvio de temperatura $T(y)$ e densidade $N(y)$ para mistura de gases Xe-He, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis, com $C = 0.3$ , $a_{t1} = 0.3$ , $a_{n1} = 0.3$ , $a_{t2} = 0.6$ , $a_{n2} = 0.6$ , $\zeta = 5.525424$ . ....	193
7.52 Problema de Deslizamento Viscoso: perfil de velocidade para cada espécie para o caso $a_{t1} = 1$ , $a_{n1} = 1$ , $a_{t2} = 1$ , $a_{n2} = 1$ e $C = 0.5$ . ....	194
7.53 Problema de Deslizamento Viscoso: perfil de fluxo de calor para cada espécie para o caso $a_{t1} = 1$ , $a_{n1} = 1$ , $a_{t2} = 1$ , $a_{n2} = 1$ e $C = 0.5$ . ....	195
7.54 Coeficiente de deslizamento viscoso $\zeta$ para a mistura Ar-Ne, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis. ....	195
7.55 Problema de Deslizamento Térmico: perfil de velocidade para cada espécie para o caso $a_{t1} = 1$ , $a_{n1} = 1$ , $a_{t2} = 1$ , $a_{n2} = 1$ e $C = 0.5$ . ....	196
7.56 Problema de Deslizamento Térmico: perfil de fluxo de calor para cada espécie para o caso $a_{t1} = 1$ , $a_{n1} = 1$ , $a_{t2} = 1$ , $a_{n2} = 1$ e $C = 0.5$ . ....	196

7.57 Problema de Deslizamento Térmico: Coeficientes de deslizamento térmico  
para o caso  $a_{t1} = 0.3$ ,  $a_{n1} = 0.5$ ,  $a_{t2} = 0.6$  e  $a_{n2} = 0.5$ . . . . . 197

## CAPÍTULO 1

---

### INTRODUÇÃO

O interesse de pesquisadores em fenômenos que envolvem a dinâmica de gases tem aumentado nos últimos anos em função das várias aplicações nesta área, principalmente no fluxo de gases em microcanais. Historicamente, os primeiros resultados analíticos sobre o fluxo de um gás estável ao longo de um canal foi publicado na década de 30. Como um exemplo, Kennard [Kennard, 1938] desenvolveu uma expressão simples para a taxa do fluxo de massa num longo tubo circular e através de um canal de placas paralelas.

Segundo Rostami, Mujumdar e Saniei [Rostami et al., 2002], na última década, o processo de miniaturização de dispositivos tem sido foco de grande interesse na indústria e na pesquisa. As expressões tais como, sistemas microeletromecânico (MEMS), microsistemas tecnológicos (MST) e mecatrônica são usadas nos Estados Unidos, Europa e Japão, respectivamente, para descrever o modelo, desenvolvimento e processo de fabricação destes dispositivos com escalas (dimensões) muito pequenas. Conforme Avelino e Kakaç [Avelino e Kakaç, 2004], o fato da miniaturização dos dispositivos agrava o problema associado com o superaquecimento dos circuitos integrados, requerendo, através de um efetivo modelo térmico, um resfriamento devido a geração de calor. Assim, o desenvolvimento de eficientes técnicas de resfriamento para circuitos integrados é uma importante aplicação contemporânea na transferência de calor em microescala. Ainda, segundo Rostami, Mujumdar e Saniei [Rostami et al., 2002], os grandes países industrializados reconhecem o significado dos MEMS e MST e têm implementado e sustentado programas de pesquisas relacionados a esta tecnologia. Assim, de acordo com Colin, Aubert e Caen [Colin et al., 1998], o desenvolvimento dos microfluidos tornou-se atraente nos últimos quinze anos. Trabalhos científicos de microfluidos eram raros até 1990, destaca-se alguns trabalhos anteriores a esta data, por exemplo,

os trabalhos de Cercignani [Cercignani, 1966], Loyalka e Ferziger [Loyalka e Ferziger, 1968], Loyalka [Loyalka, 1971], Williams [Williams, 1971], Cercignani [Cercignani, 1975], Lo, Loyalka e Storvick [Lo et al., 1984], Cercignani [Cercignani, 1988], Loyalka e Hickey [Loyalka e Hickey, 1989] e Van de Pol e Branebjerg [Pol e Branebjerg, 1990]. Observa-se, no entanto, nos anos posteriores, um crescimento nas publicações, destacando-se, Gravesen, Branebjerg e Jensen [Gravesen et al., 1993] e Shoji e Eshashi [Shoji e Eshashi, 1994] que escreveram dois artigos sobre componentes básicos de microfluidos (microválvulas, microbombas, microsensors de fluxo de massa, microamplificadores,...), bem como para microsistemas mais complexos (sistema de análise de química integrada).

Em 1991, o número de companhias e institutos que trabalhavam na tecnologia dos sistemas microeletromecânico (MEMS) era em torno de trezentos [Rostami et al., 2002]. Em 1995, devido as universidades e institutos de pesquisas terem trabalhado em atividades relacionadas aos MEMS e MST [Fatikow e Rembold, 1997], este número cresceu rapidamente para oito mil.

Os microsistemas são, atualmente, usados em diversas áreas [Rostami et al., 2002]. As áreas de aplicação incluem medicina, biotecnologia, aviação, telecomunicação, metrologia, utensílios domésticos, tecnologia de computadores, tecnologia de segurança, robótica, engenharia automotiva, preservação ambiental. Dispositivos como *drive heads*, cabeçotes de impressoras, marcapassos do coração, sensores de pressão e químico, sistema de distribuição de remédios, imagem de infravermelho, micromotores, microcanal de reatores, microbombas e turbinas são alguns dos microdispositivos comercialmente usados ou que serão usados num futuro próximo.

A maior parte dos microsistemas incluem, inevitavelmente, fluxos de fluido. Quando se trabalha com fluxos em micro ou menores configurações, muitos fenômenos são observados [Ho e Tai, 1998], tais como, por exemplo, o fator de fricção e a viscosidade aparente dos fluidos (gases e líquidos) em microcanais [Pfahler et al., 1990; Pfahler et al., 1991]. Os fluxos em macro e microsistemas não são absolutamente os mesmos. Segundo Zohar, Lee, Lee, Jiang e Tong [Zohar et al., 2002], os efeitos de superfície têm um papel mais importante nos fluxos de gases e líquidos em microsistemas do que nos fluxos em macrosistemas e, ainda, há muita dificuldade no entendimento destes efeitos. Em microescala, deve-se considerar a eletrocinética [Hunter, 1981] e efeito mecânico polar [Stokes, 1984] em fluxos de líquidos,

enquanto que a rarefação torna-se importante em fluxos de gases. A simulação numérica de todos estes fluxos não pode ser modelada pela equação de Navier-Stokes devido a pequena escala do comprimento característico nos MEMS que deve ser relacionada com o livre caminho médio  $l$  das moléculas do gás. Por esta razão, o fluxo não pode ser modelado, baseado na hipótese do contínuo e, desta maneira, efeitos microscópicos devem ser levados em conta. Então, a equação de Boltzmann deve ser considerada [Cercignani, 1988; Cercignani, 1990; Cercignani, 2000] para entender e calcular o fluxo de gás rarefeito nestes dispositivos.

O comportamento de um gás, isto é, o perfil de velocidade, perfil de fluxo de calor, desvio de temperatura, desvio de densidade, dependem das propriedades do gás através das leis de forças interatômicas e também interações gás-superfície na parede.

Em geral, a resolução dos problemas de dinâmica de gases é baseada no estado de rarefação do gás [Williams, 1971], [Sharipov e Seleznev, 1998]. Este estado pode ser classificado pelo valor do número de Knudsen ( $Kn$ ), definido como a razão entre o livre caminho médio  $l$  (média da distância percorrida por uma molécula entre as colisões) e algum comprimento característico  $a_*$  (por exemplo, a largura de um canal) [Schaaf e Chambre, 1961].

$$Kn = \frac{l}{a_*}. \quad (1.1)$$

Se o número de Knudsen é muito pequeno ( $Kn \leq 10^{-2}$ ), então o livre caminho médio é pequeno, e assim, o fluxo do gás pode ser considerado como meio contínuo e as equações clássicas da hidrodinâmica, equações de Navier-Stokes, podem ser aplicadas no escoamento do gás (regime hidrodinâmico). Quando o número de Knudsen é muito grande ( $Kn \geq 10$ ), as colisões das moléculas do gás com o contorno ocorrem mais frequentemente do que as colisões entre as moléculas e pode-se considerar o movimento das moléculas independentes umas das outras (regime molecular livre). Quando o número de Knudsen tem um valor intermediário ( $10^{-2} < Kn < 10$ ), não considera-se o gás como um meio contínuo e nem desconsidera-se as colisões intermoleculares. Este é o chamado regime de transição. Assim, quando o gás está no regime de transição, as equações de Navier-Stokes não podem ser usadas, necessitando-se, então, de outras formulações baseadas na equação de Boltzmann ou equações cinéticas (modelos).

O fluxo de um gás rarefeito foi intensificadamente estudado no início dos anos 60 para

resolver a equação de Boltzmann usando métodos semi-analíticos ou puramente numéricos [Cercignani et al., 1994]. Entretanto, há dificuldades em aplicar a equação de Boltzmann na descrição dos problemas de fluxos, por exemplo, mesmo para fluxos em canais, soluções analíticas são obtidas considerando algumas restrições [Chu e Zohar, 2000]. Modelos numéricos usando o Método Direto de Simulação de Monte Carlo (DSMC) investigando os fluxos relacionados com sistemas microeletromecânico (MEMS) foram tratados por Piekos e Breuer [Piekos e k. S. Breuer, 1996]. Harley, Huang, Bau e Zemel [Harley et al., 1995] desenvolveram experimentos e investigações teóricas do fluxo subsônicos compressíveis dos gases nitrogênio, hélio e argônio em microcanais longos. Beskok, Karniadakis e Trimmer [Beskok et al., 1996] desenvolveram o código de elemento espectral  $\mu Flow$  com objetivo de analisar a rarefação, a compressibilidade, efeitos da viscosidade térmica e *thermal creep* em um fluxo constante de gases. Arkilic, Schimdt e Breuer [Arkilic et al., 1994] desenvolveram um modelo 2-D para fluxo de gás rarefeito em microcanais para resolver a equação de Navier-Stokes sujeita a condições de contorno para a velocidade de deslizamento; Arkilic, Schimdt e Breuer [Arkilic et al., 1997] estenderam seu trabalho incorporando o método de perturbação e expansão dentro das Equações de Navier-Stokes, para demonstrar a relativa contribuição da compressibilidade e efeitos de rarefação, ainda, Arkilic, Schimdt e Breuer [Arkilic et al., 2001] trataram o fluxo de massa e o coeficiente do momento tangencial em microcanais.

Ainda, pode-se destacar os seguintes trabalhos desenvolvidos na área de dinâmica de gases:

- Beskok e Karniadakis [Beskok e Karniadakis, 1994]: desenvolveram um método para simular o fluxo de deslizamento de gases dependente do tempo em microgeometrias complexas encontradas em microdispositivos tais como microvasos e microválvulas.

- Shih, Ho, Liu e Tai [Shih et al., 1996]: conduziram experimentos usando microcanais para medir fluxo de massa e distribuição de pressão axial para os gases hélio e nitrogênio.

- Gou e Wu [Gou e Wu, 1997]: estudaram o efeito da compressibilidade do gás no fator de fricção e o número de Nusselt em microtubos.

- Barron, Wang, Warrington e Ameal [Barron et al., 1997]: em transferência de calor, desenvolveram uma técnica para avaliar os autovalores do problema de Graetz estendido para escorregamento-fluxo em um microtubo.

Especificamente, em dinâmica de gases rarefeitos, destaca-se aplicações em microcanais tais como:

- Ebert e Sparrow [Ebert e Sparrow, 1965] modelaram o fluxo constante de um gás em um canal retangular com condições de deslizamento na parede, mas sem comparações experimentais.

- Thompson e Owens [Thompson e Owens, 1975] apresentaram uma pesquisa do fluxo de rarefação interna, concentrando-se na determinação analítica da taxa de fluxo através de um tubo circular infinito.

- Tison [Tison, 1993] mediu o fluxo do gás através de tubos de aço em torno de  $1\mu m$  de diâmetro, para grandes valores do número de Knudsen que alcançou valores acima de 200.

- Stefanov e Cercignani [Stefanov e Cercignani, 1994] trouxeram em evidência a transição para turbulência para um fluxo de gás monoatômico rarefeito.

- Sone, Wanigughi e Aoki [Sone et al., 1996] estudaram o comportamento de um fluxo constante em um caminho de um gás rarefeito induzido por uma distribuição periódica de temperatura ao longo de um canal sem aplicar um gradiente de pressão.

- Sugiyama, Sawada, Nakamori [Sugiyama et al., 1996] estudaram experimentalmente e teoricamente os efeitos da superfície rugosa na passagem de um gás rarefeito entre duas placas revestidas de metal.

- Sharipov [Sharipov, 1999a] encontrou a taxa de fluxo de massa para um gás rarefeito através de um longo canal retangular causada por diferença de pressão e temperatura e, também, avaliou [Sharipov, 1999b] a taxa de fluxo de massa de um gás rarefeito através de um longo canal de secção retangular.

- Vasudevaiah e Balamurugan [Vasudevaiah e Balamurugan, 2001] desenvolveram uma investigação teórica da transferência de calor convectiva em um microcanal com respeito ao fluxo de gás rarefeito.

Pesquisas experimentais sobre fluxo em microcanais não lisos e uniformes [Lee et al., 2001] ou em microcanais lisos porém não uniformes [Lee et al., 2002a; Lee et al., 2002b] são pouco encontradas. Entretanto, fluxo através de um canal liso e uniforme é o mais simples e a configuração mais fundamental em sistemas de microfluidos. Conseqüentemente, fluxos em microcanais lisos estão sendo estudados teoricamente e experimentalmente. Sreekanth



[Sreekanth, 1968] estudou o fluxo de gases sob influência de grande gradiente de pressão e número de Knudsen alto. Choi, Barron e Warrington [Choi et al., 1991] mediram o fator de fricção da superfície interna da parede rugosa e o coeficiente de transferência de calor convectivo para fluxo do gás nitrogênio em microtubos para os regimes de fluxo laminar e turbulento, o valor encontrado foi abaixo do previsto teoricamente. Wu e Little [Wu e Little, 1983] apresentaram um fator de fricção maior do que a previsível pela correlação estabelecida, atribuindo-se os resultados anômalos pelo alto grau de rugosidade nas superfícies dos canais. Harley, Huang, Bau e Zemel [Harley et al., 1995] investigaram fluxos de gases compressíveis (nitrogênio, hélio e argônio) em microcanais longos. Wu, Mai, Zohar, Tai e Ho [Wu et al., 1998] concluíram que a secção transversal do microcanal pode ser ampliada sob alta pressão, resultando altas taxas de fluxo.

Todos os resultados experimentais apresentados foram baseados somente em medidas de taxa de fluxo. Isto não é surpreendente desde que propriedades das medidas de fluxo em microconfigurações é uma tarefa desafiadora [Ho e Tai, 1998]. A necessidade de informações mais detalhadas em microfluxo é reconhecida pela comunidade científica. Liu, Tal, Pong e Ho [Liu et al., 1993; Pong et al., 1994] integraram sensores de pressão para medir a distribuição de pressão não-linear ao longo de um microcanal. Meinhart, Wereley e Santiago [Meinhart et al., 1999] usaram velocidade de imagem de partículas para mapear o campo de velocidade em fluxos líquidos através de microcanais. Shih, Ho, Liu e Tai [Shih et al., 1996] conduziram experimentos usando microcanais para medir fluxo de massa e distribuição de pressão axial para os gases hélio e nitrogênio.

Em outras aplicações envolvendo a dinâmica de gases rarefeitos, pode-se citar: Ohwada e Sone [Ohwada e Sone, 1992] tratam de sistemas microeletromecânico, estudos em aerodinâmica [Anderson, 1969; Kogan, 1992; Fan et al., 2001], estudos em equipamentos de vácuo [Dushman, 1962; Roth, 1976; Wutz et al., 1989] e o estudo em mecânica de aerossóis [Williams e Loyalka, 1992; Willet et al., 1999; Podgórk, 1999].

Além disso, sob o ponto de vista teórico, o estudo de problemas básicos que modelam escoamentos internos de gases em um canal plano finito (Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico, Fluxo de Couette), segundo Siewert [Siewert, 2002c], é importante para a definição de novos modelos matemáticos e novos métodos computacionais visando-se acompanhar as novas ferramentas computacionais e as crescentes pesquisas, bem como, obter-se resultados

satisfatórios em tempo real para a vinculação em problemas mais complexos e para propiciar a comparação com resultados experimentais. Assim, observa-se que o estudo nessa área é inesgotável.

Em se tratando da equação de Boltzmann, sabe-se que ela foi introduzida no século XIX por Ludwig Boltzmann em seus estudos pioneiros da teoria cinética dos gases [Boltzmann, 1872]. Mais tarde, no século XX, uma versão linear da equação de Boltzmann foi utilizada na Astrofísica para estudar o fenômeno de transferência radiativa em meios estelares. A chamada equação de transporte de partículas pode ser expressa através de três formas [Garcia, 2002], a forma integro-diferencial, a forma integral e a forma integral de superfície [Sanchez e McCormick, 1982]. Em se tratando da equação de transporte integro-diferencial pode-se dizer que ela fornece uma descrição quantitativa da distribuição espacial, direcional, energética e temporal de partículas em meios materiais.

Ao longo dos anos, muitos estudos relacionados ao tratamento da equação de Boltzmann propriamente dita têm sido feitos [Loyalka e Hickey, 1989; Sone et al., 1989; Sone et al., 1990; Siewert, 2003a; Siewert, 2003b]. Devido a dificuldade no tratamento da equação de Boltzmann, principalmente, no termo integral de colisão que aparece nesta equação, apresenta-se, para suavizar esse aspecto, equações aproximadas que mantêm as características fundamentais da equação de Boltzmann e que são chamadas equações modelo [Zou et al., 1995; Barichello et al., 2001; Sharipov, 2002; Sharipov, 2003a; Siewert, 2002e]. Neste sentido, diferentes problemas são formulados por diversas equações modelo, dentre eles, destaca-se: o modelo BGK proposto por Bhatnagar, Gross e Krook [Bhatnagar et al., 1954] e independentemente por Welander [Welander, 1954], o modelo S proposto por Shakhov [Shakhov, 1974], o modelo CLF devido a Cercignani [Cercignani, 1966] e Loyalka e Ferziger [Loyalka e Ferziger, 1968] e recentemente os modelos CES e CEBS propostos por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2002]. Os modelos BGK e S caracterizam-se por serem modelos cuja frequência de colisão entre as partículas é constante, destaca-se que os modelos BGK e S são os modelos utilizados neste trabalho. Observa-se, também, que o modelo CLF pode ser considerado como um caso particular do modelo CES, ambos os modelos com frequência de colisão variável.

Em se tratando dos métodos determinísticos, no decorrer dos anos, diversos métodos foram propostos, dentre eles, destacam-se: o método de solução aproximado *two-stream*

[Schuster, 1905; Schwarzschild, 1906], o método dos harmônicos esféricos [Jeans, 1917], o método de ordenadas discretas [Wick, 1943; Chandrasekhar, 1950] e o método de ordenadas discretas analítico [Barichello e Siewert, 1999; Siewert, 2000a]. Ainda, destaca-se o método de velocidades discretas [Sharipov, 1999b] e um método exato de solução, o método de Case [Case, 1960].

Neste contexto, segundo Garcia [Garcia, 2002], na década de 40, Wick [Wick, 1943] propôs o método de ordenadas discretas, em que o termo integral da equação de transporte integro-diferencial é aproximado por uma fórmula de quadratura. Posteriormente, este método foi aprimorado e utilizado por Chandrasekhar em estudos de transferência radiativa [Chandrasekhar, 1950]. Em geometria plana a aproximação resulta em um sistema de equações diferenciais ordinárias que pode ser resolvido analiticamente.

Uma formulação recente do método de ordenadas discretas para a solução de problemas de transporte em geometria plana é apresentada por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 1999] e Siewert [Siewert, 2000a]. Esta formulação segue a fundamentação do método original, como proposto por Wick e Chandrasekhar, porém, difere basicamente do método original pelo uso de um esquema de quadratura mais arbitrário, do tipo *half-range*, pela determinação das constantes de separação que são encontradas através da resolução de um problema de autovalores e, ainda, é analítica em relação a variável espacial. A presente versão, incorpora uma técnica para encontrar soluções particulares com base na função de Green [Barichello et al., 2000] para versões não homogêneas da equação em ordenadas discretas.

Vários problemas da dinâmica de gases rarefeitos foram solucionados através do novo método de ordenadas discretas analítico (ADO) como podem ser encontrados nas Refs. [Barichello e Siewert, 1999; Barichello e Siewert, 2000; Siewert, 2000c; Barichello et al., 2001; Siewert, 2002c; Siewert, 2002a; Siewert e Valougeorgis, 2001; Siewert, 2001a]. Resultados satisfatórios também foram encontrados para os problemas Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico, Fluxo de Couette [Siewert, 2002c] e problema de Salto de Temperatura [Siewert, 2002d], baseados no modelo CES, assim como para os problemas Fluxo de Couette, Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso com a utilização do modelo S [Cabrera, 2003; Cabrera e Barichello, 2004] e para os problemas Fluxo de Couette, Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico [Camargo, 2003; Camargo e Barichello, 2004] e problema de Deslizamento

Viscoso [Siewert, 2001b] com aplicação do modelo CLF; outros problemas relacionados com a equação de Boltzmann propriamente dita, sem a aplicação de equações modelo têm sido resolvidos [Siewert, 2003c; Siewert, 2003a]. Ainda, destaca-se os problemas de mistura de gases baseados no modelo de McCormack, utilizando o método de ordenadas discretas analítico (ADO) [Siewert e Valougeorgis, 2004b; Siewert e Valougeorgis, 2004a; Garcia e Siewert, 2004; Siewert, 2004].

Neste trabalho, o estudo de alguns problemas da dinâmica de gases rarefeitos é feito através da equação integro-diferencial na dinâmica de gases rarefeitos, assim, as equações de Navier-Stokes não podem ser usadas [Sharipov e Seleznev, 1998]. Neste caso, é necessário a equação de Boltzmann [Cercignani, 1988], que é expressa como

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = J(f', f). \quad (1.2)$$

Aqui,  $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$  é a função distribuição,  $t$  é o tempo,  $\mathbf{r}$  é o vetor posição,  $\mathbf{v}$  é a velocidade molecular e  $J(f', f)$  é o operador (integral) de colisão. Na literatura, um tratamento mais detalhado da equação de Boltzmann pode ser encontrado nos livros de Cercignani [Cercignani, 1988; Cercignani, 1990] e Williams [Williams, 1971] e no trabalho de Sharipov e Seleznev [Sharipov e Seleznev, 1998].

Tendo constatado a eficiente aplicabilidade do método de ordenadas discretas analítico para diferentes equações modelo, inclusive para a própria equação de Boltzmann, decidiu-se, como objetivo principal deste trabalho, investigar com mais detalhes, questões relacionadas a diferentes modelos relativos, agora, às condições de contorno, mais especificamente, o modelo de Cercignani-Lampis. Este objetivo tem em vista uma análise mais detalhada dos efeitos de superfície na dinâmica de gases rarefeitos.

Diferentemente das condições de contorno de Maxwell, que apresentam apenas um coeficiente de acomodação para todas as propriedades físicas, as condições de contorno de Cercignani-Lampis [Cercignani e Lampis, 1971] modelam a acomodação considerando diferentes propriedades [Siewert e Sharipov, 2002]. Fisicamente, a quantidade  $\alpha_t$  descreve o coeficiente de acomodação do momento tangencial e a quantidade  $\alpha_n$  representa o coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal. Segundo Sharipov, [Sharipov, 2003b], como o modelo de Cercignani-Lampis é baseado em dois coeficientes de acomodação, o uso dessa condição de contorno é mais apropriada em estudos de problemas

básicos da dinâmica de gases rarefeitos do que o usual modelo (Maxwell) que envolve reflexão especular e difusa [Williams, 1971].

Ressalta-se que as equações modelo aqui tratadas, para o caso de um gás, seguem o modelo BGK e o modelo S por estes terem apresentado uma ótima performance como pode ser verificado, por exemplo, nas Refs. [Camargo, 2003; Camargo e Barichello, 2004] e [Cabrera, 2003; Cabrera e Barichello, 2004], mesmo usando diferentes modelagens para as condições de contorno como as apresentadas na Ref. [Siewert, 2002a].

Também foram tratados os problemas de mistura de gases. Para estes problemas, as equações cinéticas usadas para descrever o fluxo são baseadas no modelo de McCormack [McCormack, 1973] que fornece expressões corretas de todos os coeficientes para uma mistura, isto é, viscosidade, condutividade térmica, difusividade e difusividade térmica [Sharipov e Kalempa, 2003].

Desta forma, para a realização deste trabalho, seguiu-se os seguintes passos:

- implementou-se os problemas Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico, usando o modelo S, com condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis) [Siewert, 2002a] como forma de validar resultados e usar o programa como experiência na implementação dos demais problemas;

- realizou-se o estudo específico do problema de Fluxo de Poiseuille e do problema *Creep* Térmico apresentados no exame de qualificação que, também, se encontram, respectivamente, nas Refs. [Knackfuss e Barichello, 2003a] e [Knackfuss e Barichello, 2004a], ambos para o modelo BGK, com condições de contorno de Cercignani-Lampis;

- de forma diferente da utilizada por Siewert [Siewert, 2002a], definiu-se uma formulação genérica em relação ao parâmetro de adimensionalização para o problema *Creep* Térmico, usando o modelo S, como a apresentada por Knackfuss e Barichello [Knackfuss e Barichello, 2003b]. Esta formulação não está apresentada neste trabalho, apenas apresentam-se os resultados numéricos obtidos nas tabelas 7.7, 7.9 e 7.10;

- desenvolveu-se o problema de Fluxo de Couette [Knackfuss e Barichello, 2004c], para os modelos BGK e S, com condições de contorno difuso-especular, de forma diferente da apresentada nas Refs. [Camargo, 2003; Camargo e Barichello, 2004] e [Cabrera, 2003; Cabrera e Barichello, 2004], onde o termo não-homogêneo aparece na equação cinética em vez de fazer parte das equações que definem as condições de contorno. De forma similar,

desenvolveu-se o problema de Fluxo de Couette, para ambos os modelos com condições de contorno generalizadas. Estas formulações estão apresentadas neste trabalho. Salienta-se que o problema Fluxo de Couette usando o método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO) e condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis), segundo o conhecimento que se tem, ainda não havia sido tratado na literatura por nenhum dos modelos cinéticos;

- realizou-se uma formulação geral do problema de Salto de Temperatura na dinâmica de gases rarefeitos, conforme apresentado por Knackfuss, Camargo e Barichello [Knackfuss et al., 2004] e por Knackfuss e Barichello [Knackfuss e Barichello, 2004b];

- desenvolveu-se os problemas em semi-espço: Problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso para os modelos BGK e S com condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis);

- implementou-se o problema de Salto de Temperatura, modelo de McCormack para mistura de gases, com condições de contorno difuso-especular [Siewert, 2004], como forma de desenvolver e familiarizar-se com a formulação matemática do modelo;

- finalmente, desenvolveu-se os problemas de mistura de gases binários, problemas de Salto de Temperatura, Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso, baseados no modelo cinético de McCormack da equação de Boltzmann, incluindo as condições de contorno de Cercignani-Lampis.

Assim, no sentido de buscar um procedimento unificado para os problemas apresentados neste trabalho, baseados no método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO) e condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis) que ainda não estão disponíveis na literatura, define-se os capítulos posteriores como: no capítulo 2 apresenta-se uma modelagem da equação linearizada de Boltzmann, formulações dos modelos CES, CLF, BGK e S, condições de contorno e quantidades físicas de interesse utilizadas neste trabalho.

O capítulo 3 trata da apresentação e formulação dos problemas clássicos para o caso de um gás entre placas paralelas (Fluxo de Poiseuille, Problema *Creep* Térmico e Fluxo de Couette) e em semi-espço (Problema de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso). Ainda, apresenta-se o Problema de Salto de Temperatura para os modelos BGK e S com as condições de contorno generalizadas (modelo de Cercignani-Lampis) [Sharipov, 2002; Sharipov, 2003b] e as condições de contorno difuso-especular.

No capítulo 4, encontra-se a formulação geral do modelo de McCormack para os pro-

blemas de Salto de Temperatura, Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso para mistura de gases com condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis) e as grandezas físicas para estes problemas.

No capítulo 5 encontra-se as soluções particulares dos problemas propostos neste trabalho, descreve-se, resumidamente, o método de ordenadas discretas analítico e especifica-se as soluções e as quantidades físicas de interesse relativas a cada problema para o caso de um gás.

No capítulo 6, desenvolve-se o método de ordenadas discretas analítico para os problemas de mistura de gases.

No capítulo 7 apresenta-se os resultados numéricos.

E finalmente, o capítulo 8 é reservado para as considerações finais e propostas de novas investigações na área de gases rarefeitos.

## CAPÍTULO 2

---

### FUNDAMENTOS DA DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS

Quando um gás rarefeito está sujeito a pequenas perturbações, a equação integro-diferencial de Boltzmann, dada pela Eq. (1.2), pode ser linearizada. Mesmo após a sua linearização, a equação de Boltzmann ainda apresenta uma complexibilidade na estrutura do seu termo integral de colisão. Com o objetivo de deixá-lo mais simples, muitas expressões são apresentadas para substituir este termo e são chamadas de modelos de colisão [Bhatnagar et al., 1954; Cercignani, 1966; Loyalka e Ferziger, 1968; Shakhov, 1974; Sharipov e Seleznev, 1998; Barichello e Siewert, 2002]. De forma geral, conforme Cercignani [Cercignani, 1988] pode-se dizer que essas equações modelo são modelos simplificados, obtidos a partir da equação original, buscando-se preservar propriedades físicas.

Neste capítulo, desenvolve-se aspectos fundamentais sobre a linearização da equação de Boltzmann, os núcleos sintéticos, as equações modelo, as condições de contorno e as grandezas físicas.

#### 2.1 Equação Linearizada de Boltzmann

O estado estacionário de um gás rarefeito monoatômico é descrito por uma função distribuição de partículas  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ , onde  $\mathbf{r}$  é um vetor de coordenadas espaciais e  $\mathbf{v}=(v_x, v_y, v_z)$  é o vetor velocidade das partículas.

A função distribuição  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  satisfaz a equação integro-diferencial não linear de



Boltzmann [Williams, 2001]

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = J(f', f), \quad (2.1)$$

onde  $J$  representa o operador de colisão, definido como

$$J(f', f) = \int d\mathbf{v}'_1 \int d\mathbf{v}'_2 \int d\mathbf{v}_2 W(\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}'_1; \mathbf{v}_2 \rightarrow \mathbf{v}'_2) [f(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_1) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_2) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2)], \quad (2.2)$$

$f$  e  $f'$  são, respectivamente, as funções de distribuição de partículas “antes” e “após” as colisões e  $W$  é a função freqüência de espalhamento diferencial para a colisão entre dois corpos. Ainda, a função distribuição é definida tal que a quantidade  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v}$  é o número de partículas esperado no espaço de fase  $d\mathbf{r} d\mathbf{v}$  próximo ao ponto  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ .

Através dessa função distribuição, todas as grandezas físicas macroscópicas de interesse relativas ao fluxo do gás podem ser determinadas [Williams, 2001], tais como: velocidade, fluxo de calor, temperatura, densidade, etc.

Alguns aspectos básicos da teoria relacionada a equação de Boltzmann são apresentados neste trabalho. Para uma dedução com maior profundidade sugere-se, dentre outros, os livros do Williams [Williams, 1971] e Cercignani [Cercignani, 1988; Cercignani, 1990] e o trabalho de Sharipov e Seleznev [Sharipov e Seleznev, 1998].

De forma geral, de acordo com Williams, [Williams, 2001], para situações fracamente fora do equilíbrio, escreve-se a função de distribuição relativa a pequenas perturbações ( $|h| \ll 1$ ) causada à distribuição Maxwelliana local  $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ , pela presença de uma superfície de fronteira, como

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) [1 + h(\mathbf{r}, \mathbf{v})]. \quad (2.3)$$

A forma da função distribuição Maxwelliana local  $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  segundo Williams [Williams, 2001], é escrita como

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = n(\mathbf{r}) \left[ \frac{m}{2\pi kT(\mathbf{r})} \right]^{3/2} \exp \left[ - \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2kT(\mathbf{r})} \right], \quad (2.4)$$

onde  $\mathbf{r} = (y^*, z^*)$  é o vetor de coordenadas espaciais,  $m$  é a massa molecular,  $k$  é a constante de Boltzmann,  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$  é o vetor velocidade das partículas,  $n$  refere-se a densidade e

$T$  é a temperatura. Admite-se que as funções  $n$ ,  $T$  e  $u$  são funções lineares de  $y^*$  e  $z^*$  como segue

$$n(y^*, z^*) = n_0(1 + R_y y^* + R_z z^*), \quad (2.5)$$

$$T(y^*, z^*) = T_0(1 + K_y y^* + K_z z^*) \quad (2.6)$$

e

$$u(y^*) = K y^*, \quad (2.7)$$

onde  $n_0$  é a densidade de equilíbrio das partículas de gás,  $T_0$  é a temperatura constante de referência,  $K$  é um gradiente de velocidade na direção  $y$  e  $R_i$  e  $K_i$  são, respectivamente, os gradientes de densidade e temperatura na direção  $i$ .

Desta forma, seguindo Williams [Williams, 1971; Williams, 2001] e partindo-se da Eq. (2.3), a determinação da função distribuição  $f$  se dará em termos da perturbação  $h$ . Para isso, substitui-se a linearização dada pela Eq. (2.3) na Eq. (2.1), considera-se as propriedades de simetria da função frequência de espalhamento diferencial para a colisão entre dois corpos [Williams, 2001; Camargo, 2003], despreza-se os termos da ordem de  $O(h^2)$  e faz-se uma adimensionalização da forma

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

e

$$K_0 = K \left[ \frac{m}{2kT_0} \right]^{1/2}, \quad (2.9)$$

onde  $v$  é a magnitude da velocidade da partícula. Assim, obtém-se a equação de balanço

$$S(\mathbf{c}) + c_y \frac{\partial}{\partial y^*} h(y^*, \mathbf{c}) = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} \mathcal{L}\{h\}(y^*, \mathbf{c}), \quad (2.10)$$

onde  $\sigma_0$  é o diâmetro de colisão das partículas de gás (na aproximação de esferas rígidas) [Barichello et al., 2002],  $S(\mathbf{c})$  é o termo de fonte que será determinado para cada problema

e o operador de colisão é descrito por

$$\mathcal{L}\{h\}(y^*, \mathbf{c}) = -\eta(c)h(y^*, \mathbf{c}) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} \mathbf{K}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) h(y^*, \mathbf{c}') dc_z dc_y dc_x, \quad (2.11)$$

onde  $y^*$  é a variável espacial,  $\mathbf{K}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  é chamado núcleo de espalhamento e  $\eta(c)$  é a frequência de colisão das partículas dada por

$$\eta(c) = \frac{2c^2 + 1}{c} \int_0^c e^{-x^2} dx + e^{-c^2}. \quad (2.12)$$

Escrevendo-se o vetor velocidade em coordenadas esféricas  $(c, \arccos\mu, \chi)$ , ou seja,

$$c_y = c\mu \quad c_x = c(1 - \mu^2)^{1/2} \text{sen}\chi \quad e \quad c_z = c(1 - \mu^2)^{1/2} \text{cos}\chi, \quad (2.13)$$

a Eq. (2.10) pode ser escrita na forma

$$S(\mathbf{c}) + c\mu \frac{\partial}{\partial y^*} h(y^*, \mathbf{c}) = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} \mathcal{L}\{h\}(y^*, \mathbf{c}) \quad (2.14)$$

e reescreve-se o operador de colisão como

$$\mathcal{L}\{h\}(y^*, \mathbf{c}) = -\eta(c)h(y^*, \mathbf{c}) + \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} c'^2 e^{-c'^2} \mathbf{K}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) h(y^*, \mathbf{c}') d\chi' d\mu' dc'. \quad (2.15)$$

## 2.2 Livre Caminho Médio

Neste momento, introduzindo-se o conceito de Livre Caminho Médio  $l$ , considera-se a variável adimensional  $y = y^*/l$  e reescreve-se a versão homogênea da Eq. (2.14) na seguinte forma

$$c\mu \frac{\partial}{\partial x} h(y, \mathbf{c}) = \varepsilon \mathcal{L}\{h\}(y, \mathbf{c}), \quad (2.16)$$

onde o operador  $\mathcal{L}$  é dado pela Eq. (2.15) e

$$\varepsilon = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} l. \quad (2.17)$$

Segundo Loyalka e Hickey [Loyalka e Hickey, 1989], o livre caminho médio em termos da

viscosidade  $\mu_*$  é dado por

$$l = l_p = (\mu_*/p_0)(2kT_0/m)^{1/2}, \quad (2.18)$$

ou em termos da condutividade térmica  $\lambda_*$ , segundo Loyalka e Ferziger [Loyalka e Ferziger, 1968] é expresso por

$$l = l_t = [4\lambda_*/(5n_0k)][m/(2kT_0)]^{1/2}, \quad (2.19)$$

onde  $T_0$  é a temperatura (constante),  $m$  é a massa molecular,  $k$  é a constante de Boltzmann e  $p_0 = n_0kT_0$  é a pressão. Ainda, Pekeris e Alterman [Pekeris e Alterman, 1957] definem a viscosidade como

$$\mu_* = \frac{8(2mkT_0)^{1/2}}{15\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2} b(c) c^6 dc \quad (2.20)$$

e a condutividade térmica na forma

$$\lambda_* = \frac{4k(2kT_0/m)^{1/2}}{3\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 dc, \quad (2.21)$$

onde, nas Eqs. (2.20) e (2.21), a função  $b(c)$  é solução da equação de Chapman-Enskog para a viscosidade e  $a(c)$  é solução da equação de Chapman-Enskog para a condutividade térmica, as quais satisfazem equações integrais da forma:

$$\eta(c)c^2b(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2} b(c') k_2(c', c) c'^4 dc' = c^2 \quad (2.22)$$

e

$$\eta(c)ca(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2} a(c') k_1(c', c) c'^3 dc' = c(c^2 - 5/2), \quad (2.23)$$

com a condição de normalização

$$\int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^4 dc = 0. \quad (2.24)$$

Assim, pode-se obter, em termos da viscosidade, usando as Eqs. (2.22), (2.18) e (2.20) na

Eq. (2.17)

$$\varepsilon = \varepsilon_p = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} b(c) c^6 dc \quad (2.25)$$

e, em termos da condutividade térmica, usando as Eqs. (2.23), (2.19) e (2.21) na Eq. (2.17)

$$\varepsilon = \varepsilon_t = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 dc. \quad (2.26)$$

### 2.3 Núcleos Sintéticos e Equações Modelo

Em relação ao núcleo de espalhamento (em esferas rígidas)  $\mathbf{K}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ , que aparece na Eq. (2.15), Pekeris e Alterman [Pekeris e Alterman, 1957] propõem uma expansão em termos dos polinômios de Legendre, como funções do ângulo de espalhamento entre as direções “antes” e “depois” da colisão. Empregando-se o teorema da adição dos harmônicos esféricos, o núcleo de espalhamento  $\mathbf{K}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ , definido na Eq. (2.15) é escrito na forma

$$\mathbf{K}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (2n+1)(2-\delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) k_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi), \quad (2.27)$$

onde as funções de Legendre normalizadas, são dadas por

$$P_n^m(\mu) = \left[ \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right]^{1/2} (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_n(\mu), \quad n \geq m \quad (2.28)$$

e  $P_n(\mu)$  são os Polinômios de Legendre, tais que

$$\int_{-1}^1 P_n^m(\mu) P_{n'}^m(\mu) d\mu = \left( \frac{2}{2n+1} \right) \delta_{n,n'}, \quad (2.29)$$

onde  $\delta_{n,n'}$  representa o delta de Kronecker. Ainda, para alguns valores de  $n$ , as expressões para as componentes  $k_n(c', c)$  são encontradas nas Refs. [Pekeris e Alterman, 1957; Loyalka e Hickey, 1989; Barichello e Siewert, 2002].

Em geral, uma representação simplificada do núcleo de espalhamento não depende apenas de um simples truncamento na Eq. (2.27), uma vez que a dificuldade numérica está basicamente nas componentes  $k_n(c', c)$  exigidas na Eq. (2.27), que tem derivadas descontínuas em  $c' = c$ , mesmo para valores pequenos de  $n$ . Para amenizar essa dificuldade,

outras abordagens têm sido desenvolvidas na teoria de gases rarefeitos, as chamadas equações modelo, as quais, sem perder as características da equação origem, Eq. (2.1), simplificam e linearizam o núcleo de espalhamento.

Dentre os modelos onde a frequência de colisão é considerada constante, destaca-se: o modelo BGK, proposto por Bhatnagar, Gross e Krook [Bhatnagar et al., 1954] e o modelo S proposto por Shakhov [Shakhov, 1974], como variação do modelo BGK, sendo que esses são os modelos usados neste trabalho. Os modelos CLF e BGK podem ser derivados como casos especiais do modelo CES.

Em relação aos modelos cuja a frequência de colisão é variável pode-se destacar: o modelo CLF, introduzido por Cercignani [Cercignani, 1966] e Loyalka e Ferziger [Loyalka e Ferziger, 1968]; o modelo CES, recentemente proposto por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2002] que visa trabalhar com núcleo de espalhamento sintético baseado no uso das soluções exatas da Equação de Boltzmann homogênea e das equações de Chapman-Enskog para viscosidade e condutividade térmica [Pekeris e Alterman, 1957]; o modelo CEBS que também foi recentemente desenvolvido por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2002] no qual, além de trabalhar com núcleo de espalhamento sintético, que será mostrado a seguir, também envolve as equações de Chapman-Enskog, incluindo as soluções particulares de alguns problemas da dinâmica de gases rarefeitos e ainda as funções de Burnett [Loyalka e Hickey, 1989].

Segundo Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2002], um simples truncamento da expansão do núcleo Eq. (2.27) não é suficiente para simplificar o núcleo de espalhamento, pois mesmo para poucos termos, o problema de resolver a equação linearizada de Boltzmann é ainda difícil do ponto de vista numérico. Assim, para obter-se os modelos citados acima, substitui-se as componentes exatas  $k_n(c', c)$  de uma forma truncada do núcleo de espalhamento  $\mathbf{K}(c', \mathbf{c})$  por uma aproximação, preservando propriedades físicas do núcleo de espalhamento original [Barichello e Siewert, 2002], ou seja, a Eq. (2.27) é truncada e o núcleo de espalhamento é escrito como

$$\mathbf{F}(c', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n (2n+1)(2-\delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) f_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi), \quad (2.30)$$

onde em lugar de  $k_n(c', c)$  como na Eq. (2.27), são usadas aproximações  $f_n(c', c)$  obtidas na

próxima seção.

## 2.4 Modelo CES

Em um recente trabalho apresentado por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2002], encontra-se um desenvolvimento explícito do modelo CES. Neste modelo, é usada a forma exata da frequência de colisão dada pela Eq. (2.12). O núcleo de espalhamento conforme [Barichello e Siewert, 2002; Cabrera, 2003] é escrito como

$$\mathbf{F}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} \eta(c') \eta(c) \left[ \gamma_{01} + 3\gamma_{11}(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}) + \gamma_{02}(c'^2 - \omega)(c^2 - \omega) \right] + M(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + N(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad (2.31)$$

onde

$$\gamma_{01} = \frac{1}{V_0}, \quad \gamma_{11} = \frac{1}{V_2}, \quad \gamma_{02} = \frac{V_0}{V_0 V_4 - V_2^2} \quad e \quad \omega = \frac{V_2}{V_0} \quad (2.32)$$

com

$$V_n = \int_0^\infty \eta(c) c^n e^{-c^2} dc, \quad (2.33)$$

$$\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} = c' c \sum_{m=0}^1 (2 - \delta_{0,m}) P_1^m(\mu') P_1^m(\mu) \cos m(\chi' - \chi), \quad (2.34)$$

$$M(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} 3 \left[ a_1 - a_2 - \frac{a_3^2}{V_2} \right]^{-1} \left[ (\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}) / (c' c) \right] \Delta_1(c') \Delta_1(c) \quad (2.35)$$

e

$$N(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{5}{4\pi v_*} \Delta_2(c') \Delta_2(c) \sum_{m=0}^2 (2 - \delta_{0,m}) P_2^m(\mu') P_2^m(\mu) \cos m(\chi' - \chi). \quad (2.36)$$

Ainda

$$\Delta_1(c) = \eta(c) \left[ \frac{a_3}{V_2} c - ca(c) \right] + c(c^2 - 5/2) \quad (2.37)$$

e

$$\Delta_2(c) = [c^2 - \eta(c)c^2b(c)], \quad (2.38)$$

onde

$$v_* = \int_0^\infty e^{-c^2} b(c) [\eta(c)c^2b(c) - c^2] c^4 dc. \quad (2.39)$$

Tem-se também

$$a_1 = \int_0^\infty e^{-c^2} \eta(c) a^2(c) c^4 dc, \quad (2.40)$$

$$a_2 = \int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 dc \quad (2.41)$$

e

$$a_3 = \int_0^\infty e^{-c^2} \eta(c) a(c) c^4 dc. \quad (2.42)$$

Para colocar a Eq. (2.31) na forma da Eq. (2.30), deve-se ter

$$f_0(c', c) = \eta(c')\eta(c)[\gamma_{01} + \gamma_{02}(c'^2 - 7/4)(c^2 - 7/4)], \quad (2.43)$$

$$f_1(c', c) = \gamma_{11}c'\eta(c')\eta(c) + \gamma_{12}\Delta_1(c')\Delta_1(c), \quad (2.44)$$

$$f_2(c', c) = 1/v_*[c'^2 - \eta(c')c'^2b(c')][c^2 - \eta(c)c^2b(c)], \quad (2.45)$$

e

$$f_n(c', c) = 0, \quad n > 2. \quad (2.46)$$

Para avaliar as expressões  $\varepsilon_p$  e  $\varepsilon_t$ , dadas pelas Eqs. (2.25) e (2.26), considera-se os resultados numéricos obtidos nas Refs. [Rodrigues, 2003; Siewert, 2002b] ao resolverem as equações de



Chapman-Enskog para viscosidade e condutividade térmica e determina-se

$$\varepsilon_p = 0.449027806... \quad (2.47)$$

e

$$\varepsilon_t = 0.679630049... \quad (2.48)$$

Utilizando esses resultados para avaliar o número de Prandtl que pode ser expresso como

$$Pr = \varepsilon_p / \varepsilon_t \quad (2.49)$$

e utilizando as Eqs (2.47) e (2.48), encontra-se o resultado

$$Pr = 0.660694457... \quad (2.50)$$

que segundo [Barichello e Siewert, 2002] está correto (para a equação linearizada de Boltzmann e colisões de esferas rígidas) para todos os dígitos dados.

## 2.5 Modelo CLF

O modelo de frequência de colisão variável de Cercignani [Cercignani, 1966] e Loyalka e Ferziger [Loyalka e Ferziger, 1968] tem o núcleo de espalhamento expresso em termos de frequência de colisão  $\eta(c)$  como

$$\mathbf{F}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} \eta(c') \eta(c) \left[ \gamma_{01} + 3\gamma_{11}(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}) + \gamma_{02}(c'^2 - \omega)(c^2 - \omega) \right], \quad (2.51)$$

onde

$$\gamma_{01} = \frac{1}{V_0}, \quad \gamma_{11} = \frac{1}{V_2}, \quad \gamma_{02} = \frac{V_0}{V_0 V_4 - V_2^2} \quad e \quad \omega = \frac{V_2}{V_0}, \quad (2.52)$$

com

$$V_n = \int_0^\infty \eta(c) c^n e^{-c^2} dc, \quad (2.53)$$

Para escrever o núcleo de espalhamento dado pela Eq. (2.51) na forma da Eq. (2.30) deve-se escolher

$$f_0(c', c) = \eta(c')\eta(c)[\gamma_{01} + \gamma_{02}(c'^2 - \omega)(c^2 - \omega)], \quad (2.54)$$

$$f_1(c', c) = \gamma_{11}c'\eta(c')\eta(c) \quad (2.55)$$

e

$$f_n(c', c) = 0, \quad n > 1. \quad (2.56)$$

Agora, usando-se as Eqs. (2.54) e (2.55) nas Eqs. (2.22), (2.23) e (2.24), encontra-se as funções de Chapman-Enskog apropriadas para o modelo CLF

$$b(c) = \eta^{-1}(c) \quad (2.57)$$

e

$$a(c) = \eta^{-1}(c)(c^2 - 5/2) + \hat{a}, \quad (2.58)$$

onde

$$\hat{a} = -(8/3)\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} \eta^{-1}(c)(c^2 - 5/2)c^4 dc. \quad (2.59)$$

Substituindo as Eqs. (2.57) e (2.58) nas Eqs. (2.25) e (2.26) encontra-se

$$\varepsilon_p = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} \eta^{-1}(c)c^6 dc \quad (2.60)$$

e

$$\varepsilon_t = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} \eta^{-1}(c)(c^2 - 5/2)^2 c^4 dc. \quad (2.61)$$

Observa-se que no modelo CLF, a frequência de colisão  $\eta(c)$  pode ser definida de forma arbitrária. Alguns resultados numéricos [Camargo e Barichello, 2004] são dados para três formas da frequência de colisão:  $\eta(c) = 1$  para o modelo BGK,  $\eta(c) = c$  para o modelo de Williams e  $\eta(c)$  como dado pela Eq. (2.12) para o caso de esferas rígidas. As Eqs. (2.60)

e (2.61) produzem, respectivamente, para os modelos BGK, Williams e esferas rígidas, os seguintes resultados:

$$\varepsilon_p = 1, \quad \varepsilon_p = 0.601802222\dots \quad \text{e} \quad \varepsilon_p = 0.278804053\dots \quad (2.62)$$

e

$$\varepsilon_t = 1, \quad \varepsilon_t = 0.677027500\dots \quad \text{e} \quad \varepsilon_t = 0.275334588\dots \quad (2.63)$$

Avaliando-se o número de Prandtl que é dado como

$$Pr = \varepsilon_p / \varepsilon_t, \quad (2.64)$$

observa-se que as três variações do modelo CLF, não produzem bons resultados para o número de Prandtl, cujo valor normalmente usado na teoria cinética corresponde a 2/3 [Sharipov e Seleznev, 1998].

## 2.6 Modelo BGK e Modelo S

Como o modelo S, proposto por Shakhov, [Shakhov, 1974], é uma modificação do modelo BGK, conforme mencionado por Sharipov, [Sharipov e Seleznev, 1998], pode-se considerar, os núcleos de espalhamento dos modelos BGK e S em uma mesma relação, conforme Siewert e Sharipov [Siewert e Sharipov, 2002], levando em conta que para descrever o modelo BGK tem-se  $\beta = 0$  e para o modelo S considera-se  $\beta = 1$ , escreve-se o núcleo de espalhamento como

$$\mathbf{F}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + 2(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}) + (2/3)(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2) + \beta \mathbf{M}(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad (2.65)$$

onde

$$\mathbf{M}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/15)(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2). \quad (2.66)$$

Para colocar a Eq. (2.65) na forma da Eq. (2.30), deve-se escolher

$$f_0(c', c) = 4\pi^{-1/2}[1 + (2/3)(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2)], \quad (2.67)$$

$$f_1(c', c) = (8/3)c'c\pi^{-1/2}[1 + (2/15)\beta(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)] \quad (2.68)$$

e

$$f_n(c', c) = 0, \quad n > 1. \quad (2.69)$$

De acordo com [Barichello e Siewert, 2002], as componentes das funções  $f_n(c', c)$  para  $n = 0$  e  $1$  satisfazem as condições integrais (que resultam das condições de conservação de massa, momento e energia)

$$\eta(c) = \int_0^\infty e^{-c'^2} f_0(c', c) c'^2 dc', \quad (2.70)$$

$$\eta(c)c = \int_0^\infty e^{-c'^2} f_1(c', c) c'^3 dc' \quad (2.71)$$

e

$$\eta(c)c^2 = \int_0^\infty e^{-c'^2} f_0(c', c) c'^4 dc'. \quad (2.72)$$

Assim, substituindo-se as Eqs. (2.67) e (2.68) nas Eqs. (2.70), (2.71) e (2.72), encontra-se  $\eta(c) = 1$ , que é a frequência de colisão para os modelos BGK e S. Ainda, usando-se as Eqs. (2.67), (2.68) e (2.69) nas Eqs. (2.22), (2.23) e (2.24) encontra-se as funções de Chapman-Enskog apropriadas para cada modelo.

Para ambos os **modelos BGK** e **S**, obtém-se

$$b(c) = 1. \quad (2.73)$$

Para o **modelo BGK**, tem-se

$$a(c) = (c^2 - 5/2). \quad (2.74)$$

Para o **modelo S**, encontra-se

$$a(c) = (3/2)(c^2 - 5/2). \quad (2.75)$$

Assim, a partir das Eqs. (2.25) e (2.26) obtém-se para o **modelo BGK**, respectivamente,

$$\varepsilon_p = 1 \quad e \quad \varepsilon_t = 1, \quad (2.76)$$

enquanto que para o **modelo S**, obtém-se

$$\varepsilon_p = 1 \quad e \quad \varepsilon_t = 3/2. \quad (2.77)$$

A partir dos resultados encontrados para  $\varepsilon_t$  e  $\varepsilon_p$ , dados acima, avalia-se o número de Prandtl, como definido na Eq. (2.64). Observa-se que enquanto para o **modelo BGK** o valor do número de Prandtl é um ( $Pr = 1$ ), para o **modelo S**, encontra-se o valor correto, ou seja,  $Pr = 2/3$ . Assim, a literatura, [Sharipov e Seleznev, 1998], considera uma vantagem do **modelo S** sobre o **modelo BGK**, apesar de ambos estarem relacionados a frequência de colisão constante.

Aqui, enfatiza-se novamente, que os **modelos BGK** e **S** são os modelos utilizados neste trabalho. Assim, tendo definido os núcleos de espalhamento para o **modelo BGK** e para o **modelo S**, Eq. (2.65), e considerando-se a relação entre as coordenadas cartesianas e esféricas definidas pelas Eqs (2.13), considera-se, neste trabalho, a equação cinética escrita em termos da perturbação  $h(y, \mathbf{c})$ , para a função distribuição de uma Maxwelliana local, como

$$c_y \frac{\partial}{\partial y} h(y, \mathbf{c}) + \varepsilon h(y, \mathbf{c}) = \varepsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} \mathbf{F}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) h(y, \mathbf{c}') dc'_x dc'_y dc'_z + S(\mathbf{c}), \quad (2.78)$$

onde  $\mathbf{F}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  é definida pela Eq. (2.65).

## 2.7 Condições de Contorno

Esta seção trata do enfoque principal deste trabalho que é a interação do gás com a

superfície que envolve o gás. Em relação a esta interação, ou seja, as condições de contorno, tem-se que a função distribuição, em geral, é dada através do núcleo de espalhamento  $\mathbf{R}(\mathbf{v}' : \mathbf{v})$  [Cercignani, 1988], como

$$|v_n|f(\mathbf{v}) = \int_{v'_n < 0} |v'_n| \mathbf{R}(\mathbf{v}' : \mathbf{v})f(\mathbf{v}')d\mathbf{v}', \quad v_n > 0 \quad (2.79)$$

onde  $\mathbf{v}'$  e  $\mathbf{v}$  são, respectivamente, velocidades moleculares das partículas de incidência e reflexão,  $v_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$  é uma componente normal da velocidade  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{n}$  é o vetor unitário normal à superfície. O núcleo de espalhamento  $\mathbf{R}(\mathbf{v}' : \mathbf{v})$  satisfaz a condição de normalização

$$\int_{v'_n < 0} \mathbf{R}(\mathbf{v}' : \mathbf{v})d\mathbf{v} = 1 \quad (2.80)$$

e a relação de reciprocidade [Cercignani, 1975]

$$|v'_n|exp\left(-\frac{mv'^2}{2kT_w}\right)\mathbf{R}(\mathbf{v}' : \mathbf{v}) = |v_n|exp\left(-\frac{mv^2}{2kT_w}\right)\mathbf{R}(-\mathbf{v} : -\mathbf{v}'). \quad (2.81)$$

O núcleo de espalhamento difuso-especular, proposto por Maxwell, é dado como

$$\mathbf{R}(\mathbf{v}' : \mathbf{v}) = (1 - \alpha)\delta^*(\mathbf{v}' - \mathbf{v} + 2\mathbf{n}v_n) + \alpha\frac{m^2v_n}{2\pi(kT_w)^2} exp\left(-\frac{mv^2}{2kT_w}\right), \quad (2.82)$$

onde  $\delta^*$  é a função de Dirac,  $m$  é a massa molecular das partículas de gás,  $k$  é a constante de Boltzmann,  $T_w$  é a temperatura da superfície e o parâmetro  $\alpha$  é chamado de coeficiente de acomodação. Fisicamente, significa que a fração  $\alpha$  de partículas é refletida difusivamente e o restante da fração  $(1 - \alpha)$  é refletida specularmente.

Em uma versão linearizada da condição de contorno, segundo Williams [Williams, 2001], escreve-se o modelo difuso-especular para problemas de fluxo entre duas placas paralelas localizadas em  $y = -a$  e  $y = a$  em coordenadas cartesianas como

$$\begin{aligned} h(-a, c_x, c_y, c_z) = & \alpha \left[ 2c_z u_w + \frac{T_w - T_0}{T_0} (c^2 - 2) \right] + (1 - \alpha)h(-a, c_x, -c_y, c_z) \\ & + \frac{2\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^0 c'_x dc'_x \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(-a, c'_x, -c'_y, c'_z) dc'_y dc'_z \end{aligned} \quad (2.83)$$

e

$$\begin{aligned}
 h(a, c_x, -c_y, c_z) = & \alpha \left[ 2c_z u_w + \frac{T_w - T_0}{T_0} (c^2 - 2) \right] + (1 - \alpha) h(a, c_x, c_y, c_z) \\
 & + \frac{2\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^0 c'_x dc'_x \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(a, c'_x, c'_y, c'_z) dc'_y dc'_z, \quad (2.84)
 \end{aligned}$$

onde  $u_w$  é a velocidade da placa e  $T_0$  é a temperatura constante de referência.

Em se tratando do modelo difuso-especular, encontra-se na literatura vários trabalhos de dinâmica de gases rarefeitos baseados no núcleo de Maxwell, Eq. (2.82), dentre outros, destaca-se: [Cercignani, 1965a; Cercignani, 1965b; Sone et al., 1989; Barichello e Siewert, 2000; Barichello et al., 2001; Siewert, 2001b; Siewert, 2002a; Siewert, 2002c; Siewert, 2002d; Cabrera, 2003; Camargo, 2003; Siewert, 2003a; Cercignani et al., 2004]. Ainda, pode-se destacar trabalhos com resultados para a taxa de fluxo de massa de um gás em um canal plano ou em um tubo [Porodnov et al., 1978; Lo et al., 1984; Sharipov, 1996]. Nos trabalhos [Porodnov et al., 1974; Porodnov et al., 1978] o coeficiente  $\alpha$  foi calculado e comparado os dados experimentais obtidos para a taxa de fluxo de massa com os correspondentes resultados teóricos. Neste sentido, poder-se-ia tabular o parâmetro  $\alpha$  para cada par gás-superfície, considerando-se vários gases e várias superfícies. No entanto, segundo Sharipov [Sharipov, 2002], cálculos do parâmetro  $\alpha$  para diferentes dados experimentais, por exemplo, para o fluxo de Poiseuille e para a Diferença de Pressão Termomolecular (TPD) resultam em valores diferentes. Ainda, os valores de  $\alpha$  podem ser diferentes para regimes de moléculas livres e hidrodinâmico.

Com isto, o modelo de Maxwell (difuso-especular) não descreve corretamente a interação gás-superfície. A principal razão é o fato de que o núcleo de Maxwell considera um único coeficiente de acomodação para todas as propriedades físicas [Sharipov, 2002; Sharipov, 2003a], enquanto que na prática cada propriedade tem seu próprio coeficiente de acomodação. Desta forma, é necessário, no mínimo, dois parâmetros de acomodação. Isto é possível através do núcleo de Cercignani-Lampis proposto por Cercignani e Lampis [Cercignani e Lampis, 1971] que tem dois coeficientes de acomodação para descrever as propriedades físicas permitindo, assim, uma melhor descrição física para fenômenos de transporte de gases.

Este núcleo é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{CL}(\mathbf{v}' : \mathbf{v}) &= \frac{m^2 v_n}{2\pi \alpha_n \alpha_t (2 - \alpha_t) (kT_w)^2} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{m[v_n^2 + (1 - \alpha_n)v_n'^2]}{2kT_w \alpha_n} - \frac{m[\mathbf{v}_t - (1 - \alpha_t)\mathbf{v}_t']^2}{2kT_w \alpha_t (2 - \alpha_t)} \right\} \\ &\times I_0 \left( \frac{\sqrt{1 - \alpha_n} m v_n v_n'}{\alpha_n kT_w} \right), \end{aligned} \quad (2.85)$$

onde  $I_0(w)$  é a função de Bessel modificada, definida como

$$I_0(w) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{w \cos \phi} d\phi, \quad (2.86)$$

ainda,  $\mathbf{v}_t$  é o vetor bidimensional da velocidade tangencial e  $v_n$  é a componente normal da velocidade  $\mathbf{v}$ .

O núcleo, Eq. (2.85), contém dois parâmetros  $0 \leq \alpha_t \leq 2$  e  $0 \leq \alpha_n \leq 1$ , definidos, respectivamente, como, coeficiente de acomodação do momento tangencial e coeficiente de acomodação da energia cinética devido a componente normal da velocidade [Sharipov e Seleznev, 1998; Siewert, 2003c]. Fisicamente, segundo Sharipov [Sharipov, 2002], isto significa que o núcleo de Cercignani-Lampis admite a reflexão para trás que pode ocorrer em superfícies rugosas. No caso limite quando  $\alpha_t = 2$  e  $\alpha_n = 0$ , a velocidade troca de sinal após uma colisão com a superfície, trocando, assim, a sua direção. Quando  $\alpha_t = 1$  e  $\alpha_n = 1$ , o núcleo Eq. (2.85) coincide com o núcleo difuso, por outro lado, no caso limite  $\alpha_t = 0$  e  $\alpha_n = 0$ , o núcleo Eq. (2.85) torna-se o núcleo especular [Sharipov, 2002]. Na Ref. [Siewert, 2003c] tem-se uma análise mais profunda de alguns casos especiais relacionados aos coeficientes de acomodação e o núcleo de espalhamento que encontram-se nas condições de contorno de Cercignani-Lampis.

Usando a adimensionalização para o vetor velocidade  $\mathbf{c}$ , conforme a Eq. (2.8), descreve-se a interação entre o gás e a parede, [Siewert, 2002a], como

$$h(-a, c_x, c_y, c_z) = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty h(-a, c'_x, -c'_y, c'_z) \mathbf{R}_{CL}(c'_x, -c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) dc'_x dc'_z dc'_y \quad (2.87)$$

e

$$h(a, c_x, -c_y, c_z) = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty h(a, c'_x, c'_y, c'_z) \mathbf{R}_{CL}(c'_x, c'_y, c'_z : c_x, -c_y, c_z) dc'_x dc'_z dc'_y, \quad (2.88)$$



para  $c_y \in (0, \infty)$  e  $c_x, c_z \in (-\infty, \infty)$ .

Tem-se que  $\mathbf{c}'$  e  $\mathbf{c}$  são, respectivamente, velocidades moleculares de partículas de incidência e reflexão e  $\mathbf{R}_{CL}(\mathbf{c}' : \mathbf{c})$  é o núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis que descreve o efeito da parede na função distribuição das partículas, Eq. (2.85), com a velocidade adimensionalizada.

Em termos da velocidade adimensional  $\mathbf{c}$ , introduzido na Eq. (2.8), o núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis em coordenadas retangulares pode ser escrito como

$$\mathbf{R}_{CL}(c'_x, c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) = \frac{2c'_y}{\pi\alpha_n\alpha_t(2-\alpha_t)} T(c'_x : c_x) S(c'_y : c_y) T(c'_z : c_z), \quad (2.89)$$

onde

$$T(x : z) = \exp\left[-\frac{[(1-\alpha_t)z-x]^2}{\alpha_t(2-\alpha_t)}\right], \quad (2.90)$$

$$S(x : z) = \exp\left[-\frac{[(1-\alpha_n)^{1/2}z-x]^2}{\alpha_n}\right] \widehat{I}_0\left[\frac{2(1-\alpha_n)^{1/2}|xz|}{\alpha_n}\right] \quad (2.91)$$

e

$$\widehat{I}_0(w) = I_0(w)e^{-w}. \quad (2.92)$$

Aqui,  $I_0(w)$  é dada pela Eq. (2.86).

Para os problemas em meio semi-infinito, além de uma condição de contorno, considera-se também uma condição associada ao comportamento da solução no infinito, que será comentado quando estes problemas forem tratados.

## 2.8 Grandezas Físicas

Tendo formulado a equação modelo dada pela Eq. (2.78) com as condições de contorno Eqs. (2.87) e (2.88), deseja-se calcular as quantidades físicas relacionadas a velocidade das partículas, fluxo de calor, desvio de temperatura e densidade. Assim, para o perfil de velocidade e para o perfil de fluxo de calor, conforme [Siewert, 2002a], tem-se, respectiva-

mente,

$$u(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(y, c_x, c_y, c_z) c_x dc_x dc_y dc_z, \quad (2.93)$$

e

$$q(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(y, c_x, c_y, c_z) (\mathbf{c}^2 - 5/2) c_x dc_x dc_y dc_z. \quad (2.94)$$

De acordo com Williams [Williams, 2001], tem-se para o desvio de temperatura e para o desvio de densidade, respectivamente,

$$T(y) = \frac{2}{3} \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(y, c_x, c_y, c_z) (\mathbf{c}^2 - 3/2) dc_x dc_y dc_z \quad (2.95)$$

e

$$N(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(y, c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z. \quad (2.96)$$

A partir do próximo capítulo, será abordado pontos específicos, relacionados à formulação aqui apresentada, associada a cada um dos problemas clássicos tratados neste trabalho.

## CAPÍTULO 3

---

### FORMULAÇÃO MATEMÁTICA - CASO DE UM GÁS

Após a derivação das equações modelo da equação linearizada de Boltzmann para esferas rígidas, apresenta-se neste capítulo as formulações para os modelos BGK e S, alguns conceitos fundamentais e grandezas físicas associadas a alguns problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos. Para todos os problemas desenvolvidos neste capítulo, considera-se as condições de contorno de Cercignani-Lampis e para o Fluxo de Couette e problema de Salto de Temperatura considera-se, também, as condições de contorno difuso-especular, no sentido de completar resultados que ainda não estão disponíveis na literatura, relativamente ao uso do método de ordenadas discretas analítico (ADO). Os problemas clássicos tratados aqui são:

- Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico, Fluxo de Couette, Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso para equações do modelo BGK.
- Fluxo de Couette, Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso para equações do modelo S.
- Salto de Temperatura para equações dos modelos BGK e S.

Observa-se que, para o desenvolvimento das formulações dos problemas fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico, baseados no modelo BGK, exige-se diferentes esforços matemáticos e novas formulações das que são apresentadas na Ref. [Siewert, 2002a], baseadas no modelo S, sendo assim, não pode-se considerá-los como casos particulares da Ref. [Siewert, 2002a].

### 3.1 Formulação Geral para os Modelos BGK e S

Apresenta-se, nesta seção, a formulação matemática geral para os modelos BGK e S utilizada no desenvolvimento dos problemas de Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico, Fluxo de Couette, Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso. Em função do problema de Salto de Temperatura ter uma formulação diferente dos problemas citados acima, este será tratado, separadamente, na seção 3.3.

Uma vez que não tem-se, verdadeiramente, calculado a função distribuição completa  $h(y, c_x, c_y, c_z)$  para encontrar as grandezas físicas de interesse definidas pelas Eqs. (2.93) e (2.94), pode-se obter os resultados desejados a partir de vários momentos (integrals) da função distribuição. Desta forma, inicia-se multiplicando a Eq. (2.78) por

$$\phi_1(c_x, c_z) = \frac{1}{\pi} c_x e^{-(c_x^2 + c_z^2)} \quad (3.1)$$

integrando-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$  e introduzindo-se a nova variável  $\xi = c_y$ , obtendo-se para o **modelo BGK** a equação

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} h_1(y, \xi) + \varepsilon h_1(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} h_1(y, \xi') d\xi' + a_1(\xi) \quad (3.2)$$

e para o **modelo S**

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} h_1(y, \xi) + \varepsilon h_1(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [f_{11}(\xi', \xi) h_1(y, \xi') + f_{12}(\xi) h_2(y, \xi')] d\xi' + a_1(\xi), \quad (3.3)$$

onde

$$h_1(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_x, c_z) h(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (3.4)$$

$$h_2(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_x, c_z) h(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (3.5)$$

$$\phi_2(c_x, c_z) = \frac{1}{\pi \sqrt{2}} c_x (c_x^2 + c_z^2 - 2) e^{-(c_x^2 + c_z^2)}, \quad (3.6)$$

$$a_1(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_x, c_z) S(c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (3.7)$$

$$f_{11}(\xi', \xi) = 1 + (2/15)(\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2) \quad (3.8)$$

e

$$f_{12}(\xi) = (2/15)2^{1/2}(\xi^2 - 1/2). \quad (3.9)$$

A seguir, multiplica-se a Eq. (2.78) pela Eq. (3.6) e integra-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$ , obtendo-se para o **modelo BGK**

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} h_2(y, \xi) + \varepsilon h_2(y, \xi) = a_2(\xi) \quad (3.10)$$

e para o **modelo S**

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} h_2(y, \xi) + \varepsilon h_2(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [f_{12}(\xi') h_1(y, \xi') + f_{22}(\xi) h_2(y, \xi')] d\xi' + a_2(\xi), \quad (3.11)$$

onde

$$a_2(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_x, c_z) S(c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z \quad (3.12)$$

e

$$f_{22}(\xi) = 4/15. \quad (3.13)$$

Definindo-se o vetor  $\mathbf{H}(y, \xi)$ , com componentes  $h_1(y, \xi)$  e  $h_2(y, \xi)$  reescreve-se as Eqs. (3.2) e (3.10), do **modelo BGK** na forma

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{H}(y, \xi) + \varepsilon \mathbf{H}(y, \xi) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Psi}^*(\xi') \mathbf{H}(y, \xi') d\xi' + \mathbf{S}(\xi) \quad (3.14)$$

e as Eqs. (3.3) e (3.11), do **modelo S** como

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{H}(y, \xi) + \varepsilon \mathbf{H}(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \mathbf{Q}(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi) \mathbf{H}(y, \xi') d\xi' + \mathbf{S}(\xi), \quad (3.15)$$

onde define-se

$$\mathbf{\Psi}^*(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \mathbf{Q}^*, \quad (3.16)$$

$$\mathbf{Q}^* = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.17)$$

$$\mathbf{Q}(\xi) = \begin{bmatrix} (2/15)^{1/2}(\xi^2 - 1/2) & 1 \\ 2(15^{-1/2}) & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.18)$$

$$\mathbf{S}(\xi) = \begin{bmatrix} a_1(\xi) \\ a_2(\xi) \end{bmatrix}, \quad (3.19)$$

com  $a_1(\xi)$  e  $a_2(\xi)$  definidas, respectivamente, pelas Eqs (3.7) e (3.12) e, na Eq. (3.15),  $T$  representa a operação transposta.

Realizando-se as mesmas operações nas condições de contorno, isto é, multiplicando-se as Eqs. (2.83), (2.84), (2.87) e (2.88) pela Eq. (3.1) e posteriormente, pela Eq. (3.6) e integrando-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$ , encontra-se, conforme a notação vetorial proposta, para as condições de contorno de Maxwell (difuso-especular) para a Eq. (2.83)

$$\mathbf{H}(-a, \xi) = (1 - \alpha)\mathbf{H}(-a, -\xi') \quad (3.20)$$

e para a Eq. (2.84)

$$\mathbf{H}(a, -\xi) = (1 - \alpha)\mathbf{H}(a, \xi'). \quad (3.21)$$

Para as condições de contorno de Cercignani-Lampis encontra-se para a Eq. (2.87)

$$\mathbf{H}(-a, \xi) = \mathbf{A} \int_0^\infty \mathbf{H}(-a, -\xi') f(\xi', \xi) d\xi' \quad (3.22)$$

e para a Eq. (2.88)

$$\mathbf{H}(a, -\xi) = \mathbf{A} \int_0^\infty \mathbf{H}(a, \xi') f(\xi', \xi) d\xi', \quad (3.23)$$

onde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 - \alpha_t & 0 \\ 0 & (1 - \alpha_t)^3 \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

e

$$f(\xi', \xi) = \frac{2\xi'}{\alpha_n} \exp\left[-\frac{[(1 - \alpha_n)^{1/2}\xi - \xi']^2}{\alpha_n}\right] \widehat{I}_0\left[\frac{2(1 - \alpha_n)^{1/2}\xi'\xi}{\alpha_n}\right] \quad (3.25)$$

para  $\xi, \xi' \in (0, \infty)$ .

De acordo com a notação vetorial proposta, reescreve-se as grandezas físicas nas seguintes formas:

- Perfil de velocidade, dado pela Eq. (2.93) é reescrito como

$$u(y) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} [1 \quad 0] \mathbf{H}(y, \xi) d\xi. \quad (3.26)$$

- Perfil de fluxo de calor, dado pela Eq. (2.94) é reescrito como

$$q(y) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} [(\xi^2 - 1/2) \quad \sqrt{2}] \mathbf{H}(y, \xi) d\xi. \quad (3.27)$$

Além dessas duas grandezas de interesse, Eqs. (3.26) e (3.27), busca-se também avaliar a taxa de fluxo de partículas

$$U = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a u(y) dy \quad (3.28)$$

e a taxa de fluxo de calor

$$Q = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a q(y) dy. \quad (3.29)$$

Neste momento, introduz-se uma reformulação nas equações do **modelo S** para obter-se uma forma mais conveniente para as Eqs. (3.15), (3.20), (3.21), (3.22) e (3.23). Assim, escrevendo-se

$$\mathbf{H}(y, \xi) = \mathbf{Q}(\xi) \mathbf{G}(y, \xi) \quad (3.30)$$

e

$$\mathbf{S}(\xi) = \mathbf{Q}(\xi) \mathbf{\Gamma}(\xi), \quad (3.31)$$

reescreve-se a Eq. (3.15) na forma do chamado problema  $\mathbf{G}$  como

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{G}(y, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(y, \xi) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi') \mathbf{G}(y, \xi') d\xi' + \mathbf{\Gamma}(\xi), \quad (3.32)$$

onde

$$\Psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \mathbf{Q}^T(\xi) \mathbf{Q}(\xi), \quad (3.33)$$

$$\mathbf{G}(y, \xi) = \begin{bmatrix} g_1(y, \xi) \\ g_2(y, \xi) \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

e  $\mathbf{\Gamma}(\xi)$  dado pela Eq. (3.31).

Usando-se a Eq. (3.30), reescreve-se as condições de contorno de Maxwell, definidas pelas Eqs. (3.20) e (3.21), respectivamente, na forma do problema  $\mathbf{G}$ , como

$$\mathbf{G}(-a, \xi) = (1 - \alpha) \mathbf{G}(-a, -\xi') \quad (3.35)$$

e

$$\mathbf{G}(a, -\xi) = (1 - \alpha) \mathbf{G}(a, \xi'). \quad (3.36)$$

E as condições de contorno de Cercignani-Lampis, reescreve-se as Eqs. (3.22) e (3.23), respectivamente, como

$$\mathbf{G}(-a, \xi) = \int_0^{\infty} \mathbf{T}(\xi', \xi) \mathbf{G}(-a, -\xi') d\xi' \quad (3.37)$$

e

$$\mathbf{G}(a, -\xi) = \int_0^{\infty} \mathbf{T}(\xi', \xi) \mathbf{G}(a, \xi') d\xi', \quad (3.38)$$

onde

$$\mathbf{T}(\xi', \xi) = \mathbf{Q}^{-1}(\xi) \mathbf{A} \mathbf{Q}(\xi') f(\xi', \xi). \quad (3.39)$$

Aqui,  $\mathbf{Q}(\xi)$  é dada pela Eq. (3.18), a matriz  $\mathbf{A}$  é dada pela Eq. (3.24) e  $f(\xi', \xi)$  é definida pela Eq. (3.25).



Baseado na notação vetorial, pode-se expressar as grandezas físicas, definidas nas Eqs. (3.26) e (3.27), em termos de  $\mathbf{G}$ , como

$$u(y) = [0 \quad 1] \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi) \mathbf{G}(y, \xi) d\xi \quad (3.40)$$

para o perfil de velocidade e

$$q(y) = (15/2)^{1/2} [1 \quad 0] \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi) \mathbf{G}(y, \xi) d\xi \quad (3.41)$$

para perfil de fluxo de calor.

Assim sendo, ao trabalhar-se com problemas formulados pelo **modelo BGK** as equações básicas serão escritas em termos de  $\mathbf{H}(y, \xi)$ , definida pela Eq. (3.14), com condições de contorno do tipo das Eqs. (3.20), (3.21), (3.22) e (3.23). Por outro lado, no caso do **modelo S**, a equação básica a ser considerada é dada pela Eq. (3.32), com condições de contorno definidas pelas Eqs. (3.35), (3.36), (3.37) e (3.38).

A seguir, através da consideração dos problemas específicos, define-se os termos de fonte  $S(\mathbf{c})$  e  $\Gamma(\mathbf{c})$  referentes, respectivamente, as formulações dos **modelos BGK e S**.

## 3.2 Alguns Problemas Clássicos

Nesta seção, será apresentado alguns problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos. O desenvolvimento feito na seção 3.1 foi geral, evidentemente, aqui serão abordados alguns aspectos específicos de cada problema. Em geral, na formulação matemática, a diferença entre os problemas está no termo não-homogêneo,  $S(\mathbf{c})$  e  $\Gamma(\mathbf{c})$ , que aparecem, respectivamente, nas Eqs (3.14) e (3.32) e que referem-se aos **modelos BGK e S**. Outra diferença é notada nas condições de contorno que para os problemas formulados no **modelo BGK** são definidas pelas Eqs. (3.20), (3.21), (3.22) e (3.23) e no caso do **modelo S** são do tipo das Eqs. (3.35), (3.36), (3.37) e (3.38).

### 3.2.1 Fluxo de Poiseuille

Considera-se um gás rarefeito confinado entre duas placas paralelas infinitas sepa-

radas por uma distância  $2a$  ( $y = \pm a$ ), sujeito a um gradiente (constante) de pressão. O gás desloca-se paralelamente as placas, na direção  $x$ . Considera-se, ainda, neste problema, que a temperatura da parede é constante. Assim, lineariza-se a equação de Boltzmann, Eq. (2.1), em torno da Maxwelliana local [Williams, 2001]

$$f_0(x, \mathbf{v}) = n(x) \left( \frac{m}{2\pi kT_0} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{m(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}{2kT_0} \right), \quad (3.42)$$

e considera-se a densidade escrita na forma

$$n(x) = n_0(1 + R_x x) \quad (3.43)$$

onde  $R_x$  representa o gradiente de densidade na direção  $x$ . Assim sendo, encontra-se o termo de fonte na Eq. (2.78) como

$$S(\mathbf{c}) = -R_x c_x. \quad (3.44)$$

Tem-se que a magnitude da velocidade ( $c$ ) é adimensionalizada conforme Eq. (2.8). Através das Eqs. (3.1), (3.6), (3.7) e (3.12) determina-se então

$$\mathbf{S}(\xi) = R_x \begin{bmatrix} -1/2 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.45)$$

O problema, Eq. (3.14), é associado a condição de contorno expressa pela Eq. (3.23) e a condição de simetria

$$\mathbf{H}(y, \xi) = \mathbf{H}(-y, -\xi). \quad (3.46)$$

As grandezas físicas de interesse, ou seja, perfil de velocidade, perfil de fluxo de calor, taxa de fluxo de partículas e taxa de fluxo de calor, podem ser encontradas, respectivamente, conforme as Eqs. (3.26), (3.27), (3.28) e (3.29).

Observa-se que no problema fluxo de Poiseuille desenvolvido aqui, baseado no modelo BGK com condições de contorno de Cercignani-Lampis, escrito na forma escalar, ou seja, antes de escrevê-lo na forma vetorial, encontra-se duas equações

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} h_1(y, \xi) + \varepsilon h_1(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} h_1(y, \xi') d\xi' - \frac{R_x}{2} \quad (3.47)$$

e

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} h_2(y, \xi) + \varepsilon h_2(y, \xi) = 0 \quad (3.48)$$

e suas respectivas condições de contorno definidas pela Eq. (3.23). Observa-se que neste caso, as equações são independentes uma da outra e que a solução para a Eq. (3.48) associada as condições de contorno, é nula. Sendo assim, o problema poderia ser tratado de forma escalar como na formulação apresentada por Knackfuss e Barichello na Ref. [Knackfuss e Barichello, 2003a]. A justificativa para o tratamento vetorial desse problema neste trabalho se deve ao fato de realizar-se uma formulação geral para os cinco problemas (Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico, Deslizamento Térmico, Deslizamento Viscoso e Fluxo de Couette) e também buscar uma similaridade com o desenvolvimento de outros modelos, como por exemplo, o modelo S [Siewert, 2002a; Cabrera, 2003].

### 3.2.2 Problema *Creep* Térmico

O problema *Creep* Térmico trata do movimento de um gás na direção  $x$  entre duas placas paralelas, colocadas em  $y = \pm a$ , provocado por um gradiente constante de temperatura ( $K_x$ ) na direção paralela às placas que cercam o gás. Devido, neste problema, a pressão ser constante, a densidade pode variar com  $x$ , de forma que  $p = nkT$  mantenha-se constante. Para que isso aconteça, tem-se que  $R_x = -K_x$ . Neste caso, a Eq. (2.1) é linearizada em torno da distribuição Maxwelliana [Williams, 2001]

$$f_0(x, \mathbf{v}) = n(x) \left( \frac{m}{2\pi kT(x)} \right)^{3/2} \exp\left( - \frac{m(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}{2kT(x)} \right), \quad (3.49)$$

onde considera-se a densidade na forma

$$n(x) = n_0(1 + R_x x) \quad (3.50)$$

e a temperatura como

$$T(x) = T_0(1 + K_x x). \quad (3.51)$$

De acordo com a consideração feita acima, ou seja,  $R_x = -K_x$ , obtém-se, assim, o termo de

fonte da Eq. (2.78) como

$$S(\mathbf{c}) = -c_x(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 - 5/2)K_x. \quad (3.52)$$

A adimensionalização da magnitude da velocidade ( $c$ ) é de acordo com a Eq.(2.8). Usando-se as Eqs. (3.1), (3.7), (3.6) e (3.12) encontra-se

$$\mathbf{S}(\xi) = \frac{K_x}{2} \begin{bmatrix} -\xi^2 + 1/2 \\ -\sqrt{2} \end{bmatrix}. \quad (3.53)$$

Para completar a formulação matemática do problema *Creep* Térmico, associa-se a condição de contorno definida pela Eq. (3.23) e a condição de simetria dada pela Eq. (3.46). As grandezas físicas de interesse, ou seja, perfil de velocidade, perfil de fluxo de calor, taxa de fluxo de partículas e taxa de fluxo de calor, podem ser encontradas, respectivamente, conforme as Eqs. (3.26), (3.27), (3.28) e (3.29).

### 3.2.3 Fluxo de Couette

O fluxo de Couette descreve o escoamento de um gás rarefeito entre duas placas paralelas infinitas, separadas por uma distância  $2a$  ( $y = \pm a$ ), as quais movimentam-se em direções opostas com velocidade  $+u_w$  e  $-u_w$ . Lineariza-se a Eq. (2.1) em torno da distribuição Maxwelliana [Williams, 2001]

$$f_0(y, \mathbf{v}) = n_0 \left( \frac{m}{2\pi kT_0} \right)^{3/2} \exp\left( - \frac{m(v_x^2 + v_y^2 + [v_z - u_1(y)]^2)}{2kT_0} \right), \quad (3.54)$$

onde

$$u_1(y) = Ky, \quad (3.55)$$

sendo  $K$  um gradiente na direção  $y$ . Neste problema, encontra-se o termo de fonte na Eq. (2.78) como

$$S(\mathbf{c}) = -2c_x c_y K_0, \quad (3.56)$$

onde  $K_0$  é dado pela Eq. (2.9) e a magnitude da velocidade ( $c$ ) é adimensionalizada conforme

o procedimento da Eq. (2.8). Considerando-se as Eqs. (3.1), (3.7), (3.6) e (3.12) tem-se

$$\mathbf{S}(\xi) = K_0 \begin{bmatrix} -\xi \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.57)$$

Ainda, este problema é associado a condição de contorno expressa pela Eq. (3.23) para as condições de contorno de Cercignani-Lampis ou pela Eq. (3.21) para as condições de contorno de Maxwell e a condição de anti-simetria definida como

$$\mathbf{H}(-y, -\xi) = -\mathbf{H}(y, \xi). \quad (3.58)$$

Para a formulação no problema em  $\mathbf{G}$ , Eq. (3.32), encontra-se

$$\mathbf{\Gamma}(\xi) = \begin{bmatrix} 0 \\ -K_0\xi \end{bmatrix}. \quad (3.59)$$

Para esta formulação associa-se a condição de contorno definida pela Eq. (3.38) para as condições de contorno de Cercignani-Lampis e pela Eq. (3.36) para as condições de contorno de Maxwell e a condição de anti-simetria dada por

$$\mathbf{G}(-y, -\xi) = -\mathbf{G}(y, \xi). \quad (3.60)$$

Para o fluxo de Couette, o perfil de velocidade, no modelo BGK, é definido como

$$u(y) = K_0 y + \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} [1 \quad 0] \mathbf{H}(y, \xi) d\xi \quad (3.61)$$

e no modelo S como

$$u(y) = K_0 y + [0 \quad 1] \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Psi}(\xi) \mathbf{G}(y, \xi) d\xi. \quad (3.62)$$

O perfil de fluxo de calor, para o modelo BGK, definido pela Eq. (3.27) e para o modelo S pela Eq. (3.41).

Para o fluxo de Couette, além do perfil de velocidade e do fluxo de calor, deseja-se avaliar, outras três grandezas físicas: a taxa de fluxo de partículas, que para ambos os modelos (BGK ou S) é dada pela Eq. (3.28), a taxa de fluxo de calor, que também para

ambos os modelos é dada pela Eq. (3.29) e a componente do tensor de pressão

$$P_{xy} = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mathbf{c}^2} h(y, c_x, c_y, c_z) c_x c_y dc_x dc_y dc_z \quad (3.63)$$

que pode ser escrito, considerando as Eqs. (3.4) e (3.5), para o modelo BGK como

$$P_{xy} = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} [1 \quad 0] \mathbf{H}(y, \xi) \xi d\xi \quad (3.64)$$

e para o modelo S como

$$P_{xy} = [0 \quad 1] \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Psi}(\xi) \mathbf{G}(y, \xi) \xi d\xi. \quad (3.65)$$

### 3.2.4 Problema de Deslizamento Térmico

O problema de deslizamento térmico descreve a expansão de um gás em um domínio semi-infinito, devido a um gradiente constante de temperatura ( $K_x$ ) na direção paralela à parede. O gás é limitado por uma placa localizada em  $y = 0$ . Neste caso, a Maxwelliana usada para linearizar a Eq. (2.1) é

$$f_0(x, \mathbf{v}) = n(x) \left( \frac{m}{2\pi kT(x)} \right)^{3/2} \exp\left( - \frac{m(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}{2kT(x)} \right), \quad (3.66)$$

onde a densidade  $n(x)$  e a temperatura  $T(x)$  são consideradas, respectivamente, nas formas das Eqs. (3.50) e (3.51). Para o problema de Deslizamento Térmico, devido a pressão ser constante, a densidade do gás pode variar com  $x$ . Em função disso, ou seja, para ter-se  $p = nkT = \text{constante}$ , tem-se  $R_x = -K_x$ . Assim, o termo de fonte na Eq. (2.78) fica definido por

$$S(\mathbf{c}) = -c_x(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 - 5/2)K_x, \quad (3.67)$$

onde a adimensionalização da magnitude da velocidade ( $c$ ) é da forma da Eq. (2.8). Em adição, considera-se as Eqs. (3.1), (3.6), (3.7) e (3.12) para encontra-se

$$\mathbf{S}(\xi) = \frac{K_x}{2} \begin{bmatrix} -\xi^2 + 1/2 \\ -\sqrt{2} \end{bmatrix}. \quad (3.68)$$

O problema dado pela Eq. (3.14) é associado a condição de contorno expressa pela Eq. (3.23), quando  $a = 0$ , como

$$\mathbf{H}(0, -\xi) = \mathbf{A} \int_0^\infty \mathbf{H}(0, \xi') f(\xi', \xi) d\xi', \quad (3.69)$$

onde a matriz  $\mathbf{A}$  e  $f(\xi', \xi)$  são dadas, respectivamente, pelas Eqs. (3.24) e (3.25).

Na formulação do chamado problema  $\mathbf{G}$ , Eq. (3.32), tem-se

$$\mathbf{\Gamma}(\xi) = \frac{K_x}{2} \begin{bmatrix} -\sqrt{\frac{15}{2}} \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.70)$$

A expressão para a condição de contorno, nessa formulação, é dada pela Eq. (3.37), com  $a = 0$ ,

$$\mathbf{G}(0, \xi) = \int_0^\infty \mathbf{T}(\xi', \xi) \mathbf{G}(0, -\xi') d\xi', \quad (3.71)$$

onde  $\mathbf{T}(\xi', \xi)$  é dada pela Eq. (3.39).

Para o problema de Deslizamento Térmico, deseja-se determinar o perfil de velocidade, perfil de fluxo de calor, definidos, respectivamente, pelas Eqs. (3.26) e (3.27) para o modelo BGK e pelas Eqs. (3.40) e (3.41) para o modelo S e o coeficiente de deslizamento térmico  $\zeta_t$ , que é usado nas equações hidrodinâmicas quando é considerado a condição de deslizamento da velocidade do gás na parede [Camargo, 2003], que é definido por

$$\lim_{y \rightarrow \infty} u(y) = \zeta_t \quad (3.72)$$

onde  $u(y)$  representa o perfil de velocidade.

### 3.2.5 Problema de Deslizamento Viscoso

O problema de Deslizamento Viscoso descreve a expansão de um gás em um domínio semi-infinito limitado por uma placa localizada em  $y = 0$ , com um gradiente de velocidade ( $K$ ) ao longo do eixo  $y$ . Obtém-se esse problema linearizando-se a equação de Boltzmann

em torno da seguinte Maxwelliana

$$f_0(y, \mathbf{v}) = n_0 \left( \frac{m}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \exp \left( - \frac{m(v_x^2 + v_y^2 + [v_z - u_1(y)]^2)}{2kT_0} \right), \quad (3.73)$$

onde

$$u_1(y) = Ky, \quad (3.74)$$

sendo  $K$  um gradiente na direção  $y$ . Assim, neste problema, o termo de fonte na Eq. (2.78) fica definido por

$$S(\mathbf{c}) = -2c_x c_y K_0, \quad (3.75)$$

onde  $K_0$  é dado pela Eq. (2.9) e considera-se a adimensionalização da magnitude da velocidade da partícula ( $c$ ) conforme a Eq. (2.8). Neste problema, na equação vetorial, Eq. (3.14), tem-se

$$\mathbf{S}(\xi) = K_0 \begin{bmatrix} -\xi \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.76)$$

com a condição de contorno expressa pela Eq. (3.23), quando  $a = 0$ , assim tem-se

$$\mathbf{H}(0, -\xi) = \mathbf{A} \int_0^\infty \mathbf{H}(0, \xi') f(\xi', \xi) d\xi', \quad (3.77)$$

onde a matriz  $\mathbf{A}$  e  $f(\xi', \xi)$  são dadas, respectivamente, pelas Eqs. (3.24) e (3.25).

Na formulação do problema  $\mathbf{G}$ , Eq. (3.32), tem-se

$$\mathbf{\Gamma}(\xi) = K_0 \begin{bmatrix} 0 \\ -\xi \end{bmatrix}, \quad (3.78)$$

com a condição de contorno dada pela Eq. (3.37), com  $a = 0$ , ou seja

$$\mathbf{G}(0, \xi) = \int_0^\infty \mathbf{T}(\xi', \xi) \mathbf{G}(0, -\xi') d\xi', \quad (3.79)$$

onde  $\mathbf{T}(\xi', \xi)$  é dada pela Eq. (3.39).



Ainda, o comportamento, no infinito, para o perfil de velocidade é dado pela relação

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \frac{d}{dy} u(y) = K_0. \quad (3.80)$$

Para o problema de Deslizamento Viscoso, o perfil de velocidade, no modelo BGK, é definido como

$$u(y) = y + \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} [1 \quad 0] \mathbf{H}(y, \xi) d\xi \quad (3.81)$$

e no modelo S como

$$u(y) = y + [0 \quad 1] \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi) \mathbf{G}(y, \xi) d\xi. \quad (3.82)$$

O perfil de fluxo de calor, para o modelo BGK, é definido pela Eq. (3.27) e para o modelo S é dado pela Eq. (3.41). O coeficiente de deslizamento viscoso  $\zeta_p$  será, posteriormente, definido neste trabalho.

Os itens desenvolvidos na seção (3.2) completam a definição da formulação para os **modelos BGK** e **S**, iniciada na seção (3.1) para os problemas clássicos, onde os resultados numéricos serão apresentados, neste trabalho, em capítulos posteriores. Considerando-se as diferenças na derivação dos problemas clássicos e do problema de Salto de Temperatura, a próxima seção será destinada ao desenvolvimento deste problema (problema de Salto de Temperatura).

### 3.3 Problema de Salto de Temperatura

De acordo com Welander [Welander, 1954], Bartz [Bartz, 2000] e Camargo [Camargo, 2003] no processo de troca de calor entre uma massa de gás altamente rarefeita e uma parede adjacente observa-se uma diferença entre a temperatura  $T_0$  do gás muito próximo da parede e a temperatura  $T_w$  da parede. Além disso, a temperatura no gás não varia linearmente perto da parede, desviando-se de uma distribuição linear como mostra a figura 3.1. O desvio é notado sobre a região que se estende a uma distância da ordem do livre caminho médio  $l$  da parede que é chamada de região de transição.

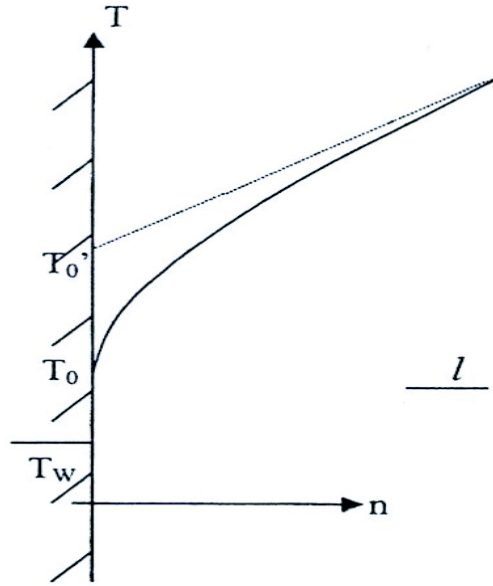


Figura 3.1 – Salto de Temperatura

Este fenômeno é, em parte, devido ao fato de que as moléculas de gás refletidas da parede nunca atingem a temperatura de equilíbrio com a parede, desta maneira, as moléculas de gás têm uma temperatura  $T_{0+}$  diferente da temperatura da parede  $T_w$ . Outro fator que também influencia neste fenômeno são as restrições geométricas que a parede exerce no movimento das moléculas de gás. Conforme Welander [Welander, 1954], define-se Salto de Temperatura como a diferença entre a temperatura  $T_0'$  encontrada na parede a partir de uma extrapolação linear da curva de temperatura após a região de transição e a temperatura da parede  $T_w$  ( ver fig. 3.1). E a avaliação desta quantidade é necessária na consideração de efeitos de rarefação em problemas definidos no regime chamado *Slip-flow* ( $0,01 < Kn < 0,1$ ).

No problema de Salto de Temperatura, a Maxwelliana utilizada para linearizar a Eq. (2.1) é

$$f_0(\mathbf{v}) = f_\infty(\mathbf{v}) = n_0 \left( \frac{m}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \exp\left( - \frac{m(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}{2k T_0} \right), \quad (3.83)$$

seguindo-se de forma análoga de como desenvolvido na seção 2.1, obtém-se a seguinte equação de balanço

$$c_y \frac{\partial}{\partial y} h(y, \mathbf{c}) + \varepsilon h(y, \mathbf{c}) = \varepsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} \mathbf{F}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) h(y, \mathbf{c}') dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (3.84)$$

para  $y > 0$  (em unidades adimensionais), a magnitude da velocidade ( $c$ ) é adimensionalizada conforme a Eq. (2.8) e  $\mathbf{F}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  segue como dado na Eq. (2.65) com  $\beta = 0$  e  $\beta = 1$ , respectivamente, para os modelos BGK e S.

Observa-se que, na Eq. (3.84),  $h(y, \mathbf{c}) = h(y, c_x, c_y, c_z)$  e é unidimensional na variável espacial e considera-se  $c$  a magnitude do vetor velocidade  $\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)$ . Essas grandezas,  $y$  e  $c$ , são expressas em unidades adimensionais [Williams, 1971]. A Eq. (3.84) é suplementada, em geral, pelas condições de contorno, assim, neste problema, baseado no modelo de Maxwell (difuso-especular), segue-se [Williams, 2001] e escreve-se esta condição de contorno como

$$h(0, c_x, c_y, c_z) = (1 - \alpha)h(0, c_x, -c_y, c_z) + \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty e^{-c'^2} h(0, c'_x, -c'_y, c'_z) c'_y dc'_x dc'_z dc'_y, \quad (3.85)$$

para  $c_y \in (0, \infty)$  e todo  $c_x$  e  $c_z$ . Aqui,  $\alpha$  é o coeficiente de acomodação, que representa a fração de moléculas incidentes que são difusivamente refletidas. Escolhendo-se trabalhar com a condição de contorno baseada no modelo de Cercignani-Lampis [Cercignani, 1988; Siewert, 2002a], escreve-se

$$h(0, c_x, c_y, c_z) = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty h(0, c'_x, -c'_y, c'_z) \mathbf{R}_{CL}(c'_x, -c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) dc'_x dc'_z dc'_y, \quad (3.86)$$

onde  $\mathbf{R}_{CL}(c'_x, -c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z)$  é dado pela Eq. (2.85).

Para o problema de Salto de Temperatura, além de uma condição de contorno, como definidas nas Eqs. (3.85) e (3.86), respectivamente, para os modelos difuso-especular e Cercignani-Lampis, considera-se para completar a definição do problema, a condição de Welander [Welander, 1954] na perturbação de temperatura no infinito, definida por

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \frac{d}{dy} T(y) = K_1, \quad (3.87)$$

onde  $K_1$  é considerado conhecido e  $T(y)$  é dada pela Eq. (2.95).

De forma similar aos problemas desenvolvidos anteriormente, para encontrar as grandezas físicas de interesse, como: Desvio de temperatura  $T(y)$  e desvio de densidade  $N(y)$ , precisa-se trabalhar apenas com certos momentos (integrals) das Eq. (3.84), (3.85) e (3.86), os quais são diferentes dos apresentados nos problemas da seção 3.2, por isto, o problema de Salto de Temperatura, é apresentado em seção a parte dos demais problemas.

Assim, multiplica-se a Eq. (3.84) por

$$\phi_1(c_x, c_z) = \frac{1}{\pi} e^{-(c_x^2 + c_z^2)} \quad (3.88)$$

e integra-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$ . A seguir, multiplica-se por

$$\phi_2(c_x, c_z) = \frac{1}{\pi} (c_x^2 + c_z^2 - 1) e^{-(c_x^2 + c_z^2)} \quad (3.89)$$

integrando-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$ . Considera-se a nova variável  $\xi = c_y$  e usa-se a condição de *no net flow*, isto é,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} h(y, \mathbf{c}) c_y dc_x dc_y dc_z = 0 \quad (3.90)$$

para o modelo BGK. Com isto, obtém-se para o modelo BGK, respectivamente, as equações

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial}{\partial y} h_1(y, \xi) + \varepsilon h_1(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \left[ \left( \frac{2}{3} \left( \xi^2 - \frac{1}{2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. \times \left( \xi'^2 - \frac{1}{2} \right) + 1 \right) h_1(y, \xi') + \frac{2}{3} \left( \xi^2 - \frac{1}{2} \right) h_2(y, \xi') \right] d\xi' \end{aligned} \quad (3.91)$$

e

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial}{\partial y} h_2(y, \xi) + \varepsilon h_2(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \left[ \frac{2}{3} \left( \xi'^2 - \frac{1}{2} \right) h_1(y, \xi') \right. \\ \left. + \frac{2}{3} h_2(y, \xi') \right] d\xi'. \end{aligned} \quad (3.92)$$

Para o modelo S, usando-se a condição de fluxo resultante ser nulo, Eq. (3.90), como era de se esperar, os resultados numéricos encontrados para as grandezas físicas são iguais aos resultados numéricos quando a condição não é usada. No entanto, observa-se que mesmo aplicando esta condição a expressão final para o núcleo de espalhamento apresenta termos que não possibilitam a escrita do núcleo de forma separável, como no caso do modelo BGK, e um tratamento mais geral da formulação deve ser adotado. Desta forma, escolhe-se, no modelo S, por preservar todos os termos não usando a condição de fluxo resultante ser nulo dado pela Eq. (3.90), sendo assim, obtém-se as seguintes equações

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} h_1(y, \xi) + \varepsilon h_1(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \left[ \kappa_{11}(\xi', \xi) h_1(y, \xi') + \kappa_{12}(\xi', \xi) h_2(y, \xi') \right] d\xi' \quad (3.93)$$

e

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} h_2(y, \xi) + \varepsilon h_2(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \left[ \kappa_{21}(\xi', \xi) h_1(y, \xi') + \kappa_{22}(\xi', \xi) h_2(y, \xi') \right] d\xi', \quad (3.94)$$

onde

$$\kappa_{11}(\xi', \xi) = \frac{2}{3} \left( \xi^2 - \frac{1}{2} \right) \left( \xi'^2 - \frac{1}{2} \right) + 1 + 2\xi'\xi + \frac{4}{15} \left( \xi'^2 - \frac{3}{2} \right) \left( \xi^2 - \frac{3}{2} \right) \xi'\xi, \quad (3.95)$$

$$\kappa_{12}(\xi', \xi) = \frac{2}{3} \xi^2 - \frac{1}{3} + \left( \frac{4}{15} \xi^2 - \frac{2}{5} \right) \xi \xi', \quad (3.96)$$

$$\kappa_{21}(\xi', \xi) = \frac{2}{3} \xi'^2 - \frac{1}{3} + \left( \frac{4}{15} \xi'^2 - \frac{2}{5} \right) \xi \xi', \quad (3.97)$$

$$\kappa_{22}(\xi', \xi) = \frac{2}{3} + \frac{4}{15} \xi \xi', \quad (3.98)$$

$$h_1(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_x, c_z) h(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z \quad (3.99)$$

e

$$h_2(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_x, c_z) h(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z. \quad (3.100)$$

Escrevendo-se na forma vetorial e tomando-se  $\mathbf{H}(y, \xi)$  com componentes  $h_1(y, \xi)$  e  $h_2(y, \xi)$ , reescreve-se as Eqs. (3.91) e (3.92) como

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{H}(y, \xi) + \varepsilon \mathbf{H}(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \mathbf{Q}_*(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}_*^T(\xi') \mathbf{H}(y, \xi') d\xi' \quad (3.101)$$

e as Eqs. (3.93) e (3.94) como segue

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{H}(y, \xi) + \varepsilon \mathbf{H}(y, \xi) = \varepsilon \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{H}(y, \xi') d\xi', \quad (3.102)$$

para  $y > 0$  e  $\xi \in (-\infty, \infty)$ .

Aqui,

$$\mathbf{Q}_*(\xi) = \begin{bmatrix} (2/3)^{1/2}(\xi^2 - 1/2) & 1 \\ (2/3)^{1/2} & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.103)$$

$$\mathbf{H}(y, \xi) = \begin{bmatrix} h_1(y, \xi) \\ h_2(y, \xi) \end{bmatrix} \quad (3.104)$$

e

$$\mathbf{K}(\xi', \xi) = \begin{bmatrix} \kappa_{11}(\xi', \xi) & \kappa_{12}(\xi', \xi) \\ \kappa_{21}(\xi', \xi) & \kappa_{22}(\xi', \xi) \end{bmatrix}. \quad (3.105)$$

As componentes do núcleo  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  são definidas, respectivamente, pelas Eqs. (3.95), (3.96), (3.97) e (3.98).

Segue-se o mesmo procedimento em relação a condição de contorno. Assim, multiplica-se as Eqs. (3.85) e (3.86) pela expressão dada na Eq. (3.88) e integra-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$  para obter-se, para a condição difuso-especular

$$h_1(0, \xi) = (1 - \alpha)h_1(0, -\xi) + 2\alpha \int_0^\infty e^{-\xi'^2} h_1(0, -\xi') \xi' d\xi' \quad (3.106)$$

e para a condição de Cercignani-Lampis

$$h_1(0, \xi) = \int_0^\infty h_1(0, -\xi') f(\xi', \xi) d\xi', \quad (3.107)$$

para  $\xi, \xi' \in (0, \infty)$  e  $f(\xi', \xi)$  é dada pela Eq. (3.25).

A seguir, multiplica-se as Eqs. (3.85) e (3.86) pela expressão dada na Eq. (3.89) e integra-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$  obtendo-se, para a condição difuso-especular

$$h_2(0, \xi) = (1 - \alpha)h_2(0, -\xi) \quad (3.108)$$

e para a condição de Cercignani-Lampis

$$h_2(0, \xi) = (1 - \alpha_t)^2 \int_0^\infty h_2(0, -\xi') f(\xi', \xi) d\xi', \quad (3.109)$$

para  $\xi, \xi' \in (0, \infty)$  e  $f(\xi', \xi)$  é dada pela Eq. (3.25).

Pode-se, então, escrever a condição de contorno na forma vetorial para a condição difuso-especular como

$$\mathbf{H}(0, \xi) = (1 - \alpha)\mathbf{H}(0, -\xi) + \mathbf{A}' \int_0^\infty \mathbf{e}^{-\xi'^2} \mathbf{H}(0, -\xi') \xi' d\xi' \quad (3.110)$$

e para a condição de Cercignani-Lampis como

$$\mathbf{H}(0, \xi) = \mathbf{A}'' \int_0^\infty \mathbf{H}(0, -\xi') f(\xi', \xi) d\xi', \quad (3.111)$$

onde

$$\mathbf{A}' = \begin{bmatrix} 2\alpha & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.112)$$

e

$$\mathbf{A}'' = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (1 - \alpha_t)^2 \end{bmatrix}, \quad (3.113)$$

para  $\xi, \xi' \in (0, \infty)$  e  $f(\xi', \xi)$  como definida na Eq. (3.25).

As grandezas físicas de interesse podem ser escritas, para ambos os modelos, como

$$T(y) = \frac{2}{3} \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^\infty \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{H}(y, \xi) e^{-\xi^2} d\xi \quad (3.114)$$

para o desvio de temperatura e

$$N(y) = \pi^{-1/2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \int_{-\infty}^\infty \mathbf{H}(y, \xi) e^{-\xi^2} d\xi \quad (3.115)$$

para o desvio de densidade.

Em termos de  $h_1$  e  $h_2$ , escreve-se

$$T(y) = \frac{2}{3} \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^\infty e^{-\xi^2} [(\xi^2 - 1/2)h_1(y, \xi) + h_2(y, \xi)] d\xi \quad (3.116)$$

para o desvio de temperatura e

$$N(y) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^\infty e^{-\xi^2} h_1(y, \xi) d\xi \quad (3.117)$$

para o desvio de densidade.

No próximo capítulo, o desenvolvimento matemático de alguns problemas de mistura de gases será abordado, para isto, utiliza-se o modelo de McCormack. As equações resultantes, na forma vetorial, para este modelo, assemelham-se, no geral, com as equações encontradas para os modelos BGK e S para o caso de um gás que foram definidas neste capítulo, porém, observa-se que os elementos que compõem suas equações têm uma notação carregada no sentido algébrico.



## CAPÍTULO 4

---

### PROBLEMAS DE MISTURA DE GASES

Este capítulo trata dos problemas de mistura de gases binários baseados no modelo de McCormack [McCormack, 1973], com condições de contorno de Cercignani-Lampis. Especificamente, os problemas abordados aqui são: problema de Salto de Temperatura, problema de Deslizamento Térmico e problema de Deslizamento Viscoso. Inicialmente, será mostrada a formulação do modelo de McCormack para, posteriormente, estudar os três problemas propostos neste capítulo. Embora, usa-se o modelo de McCormack como definido na Ref. [McCormack, 1973], emprega-se, aqui, uma notação apropriada para a formulação e análise das expressões apresentadas neste trabalho, seguindo a formulação de Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2004b].

Os resultados que serão encontrados para uma mistura de gases binários, serão desenvolvidos em termos da concentração molar (em termos da primeira partícula) como

$$C = \frac{n_1}{n_1 + n_2}, \quad (4.1)$$

onde  $n_1$  e  $n_2$  representam, respectivamente, as densidades do primeiro e segundo gás.

#### 4.1 O Modelo de McCormack

Para definir-se a formulação matemática dos problemas de Salto de Temperatura, Deslizamento Viscoso e Deslizamento Térmico com condições de contorno de Cercignani-Lampis para mistura de gases, utiliza-se, o modelo cinético de McCormack [McCormack,

1973]. Este modelo foi usado em outras referências considerando outras condições de contorno e/ou outros métodos determinísticos, dentre elas, destaca-se:

- Problemas de gases definidos em meio semi-infinito (problema de Deslizamento Viscoso e Deslizamento Térmico) [Siewert e Valougeorgis, 2004a].
- Problemas de Transferência de Calor [Garcia e Siewert, 2004]
- Problemas de fluidos em canal de placas paralelas (fluxo de Poiseuille e problema *Creep* Térmico) [Siewert e Valougeorgis, 2004c].
- Problemas de fluidos em canal de placas paralelas (fluxo de Couette) [Sharipov et al., 2004].
- Problema de coeficiente de Deslizamento Viscoso [Sharipov e Kalempa, 2003].
- Problema de Salto de Temperatura [Siewert, 2004].
- Problema de coeficiente de Deslizamento Térmico [Sharipov e Kalempa, 2004a].
- Problema de coeficiente de Deslizamento Difuso [Sharipov e Kalempa, 2004b].
- Problema de coeficiente de Salto de Temperatura [Sharipov e Kalempa, 2004c].
- Sistemas microeletromecânico [Naris et al., 2004].

Considera-se que as funções distribuição  $h_\alpha(y^*, \mathbf{v})$  para os dois tipos de partículas ( $\alpha = 1$  e  $2$ ) denotam perturbações à distribuição Maxwelliana para cada espécie. A linearização da função distribuição  $f_\alpha(y^*, \mathbf{v})$  para cada espécie  $\alpha$ , segundo McCormack [McCormack, 1973], para os problemas de Salto de Temperatura e de Deslizamento Viscoso, é feita em torno da Maxwelliana absoluta, caracterizada por uma densidade constante  $n_\alpha$  e temperatura  $T_0$  [Siewert e Valougeorgis, 2004a; Siewert, 2004]. Assim,

$$f_\alpha(y^*, \mathbf{v}) = f_{\alpha,0}(\mathbf{v})[1 + h_\alpha(y^*, \mathbf{v})], \quad (4.2)$$

onde

$$f_{\alpha,0}(\mathbf{v}) = n_\alpha (\lambda_\alpha / \pi)^{3/2} e^{-\lambda_\alpha \mathbf{v}^2}, \quad \lambda_\alpha = m_\alpha / (2kT_0), \quad (4.3)$$

$h_\alpha(y^*, \mathbf{v})$  é a perturbação da função distribuição para o gás 1 quando  $\alpha = 1$  e para o gás 2 quando  $\alpha = 2$ . Ainda,  $k$  é a constante de Boltzmann,  $m_\alpha$  é a massa molecular das espécies 1 e 2,  $n_\alpha$  é a densidade de equilíbrio das espécies 1 e 2, respectivamente, quando  $\alpha = 1$  e  $\alpha = 2$ ,  $y^*$  é a variável espacial,  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ , com magnitude  $v$ , é a velocidade da partícula

e  $T_0$  é a temperatura de referência. A função perturbação  $h_\alpha$ , seguindo a Ref. [McCormack, 1973], obedece duas equações de Boltzmann acopladas, que para este problema escreve-se como

$$c_y \frac{\partial}{\partial y^*} h_\alpha(y^*, \mathbf{c}) + \omega_\alpha \gamma_\alpha h_\alpha(y^*, \mathbf{c}) = \omega_\alpha \gamma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(y^*, \mathbf{c}), \quad \alpha = 1, 2, \quad (4.4)$$

onde  $\mathbf{c}$ , com componentes  $c_x, c_y, c_z$  e magnitude  $c$ , é uma velocidade adimensional. Observa-se que introduz-se esta velocidade adimensional  $\mathbf{c}$  diferentemente nas duas equações, ou seja, seguindo Siewert [Siewert, 2004], para o caso  $\alpha = 1$  usa-se a transformação  $\mathbf{c} = \omega_1 \mathbf{v}$  e para o caso  $\alpha = 2$  usa-se a transformação  $\mathbf{c} = \omega_2 \mathbf{v}$ . Ainda,

$$\omega_\alpha = [m_\alpha / (2kT_0)]^{1/2}, \quad \alpha = 1, 2 \quad (4.5)$$

e  $\gamma_\alpha, \alpha = 1, 2$ , são as frequências de colisão que serão definidas posteriormente.

O operador de colisão  $\mathcal{L}$  correspondente ao modelo de McCormack pode ser escrito como

$$\mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(y^*, \mathbf{c}) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_{\beta=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\beta(y^*, \mathbf{c}') \mathbf{K}_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (4.6)$$

os núcleos  $\mathbf{K}_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  possuem uma notação carregada como pode ser visto a seguir. Conforme [Siewert, 2004], estes núcleos, são dados pela expressão que segue

$$\mathbf{K}_{\beta,\alpha} = \mathbf{K}_{\beta,\alpha}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \mathbf{K}_{\beta,\alpha}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \mathbf{K}_{\beta,\alpha}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \mathbf{K}_{\beta,\alpha}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad (4.7)$$

onde

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{1,2}^{(1)}] - \eta_{1,2}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.8)$$

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (4.9)$$

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_1[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (4.10)$$

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\beta_1(c'^2 - 5/2) - \eta_{1,2}^{(2)}](c^2 - 5/2) \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.11)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = r\{2\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(2)}[r^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\}\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.12)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)r^*\eta_{1,2}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (4.13)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{1,2}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2c^2], \quad (4.14)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.15)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{2,1}^{(1)}] - \eta_{2,1}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\}\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.16)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (4.17)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_2[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2c^2], \quad (4.18)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\beta_2(c'^2 - 5/2) - \eta_{2,1}^{(2)}](c^2 - 5/2)\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.19)$$

$$\mathbf{K}_{1,2}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = s\{2\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(2)}[s^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\}\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.20)$$

$$\mathbf{K}_{1,2}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)s^*\eta_{2,1}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (4.21)$$

$$\mathbf{K}_{1,2}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{2,1}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2c^2], \quad (4.22)$$

e

$$\mathbf{K}_{1,2}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}. \quad (4.23)$$

Aqui, usa-se

$$r = (m_1/m_2)^{1/2} \quad \text{e} \quad s = (m_2/m_1)^{1/2}, \quad (4.24)$$

ainda

$$r^* = \frac{r^2}{1+r^2} \quad \text{e} \quad s^* = \frac{s^2}{1+s^2} . \quad (4.25)$$

Ainda tem-se

$$\varpi_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(4)} - \eta_{1,1}^{(3)} - \eta_{1,2}^{(3)}, \quad (4.26)$$

$$\varpi_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(4)} - \eta_{2,2}^{(3)} - \eta_{2,1}^{(3)}, \quad (4.27)$$

$$\beta_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(6)} - \eta_{1,1}^{(5)} - \eta_{1,2}^{(5)}, \quad (4.28)$$

e

$$\beta_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(6)} - \eta_{2,2}^{(5)} - \eta_{2,1}^{(5)}, \quad (4.29)$$

onde

$$\eta_{i,j}^{(k)} = \frac{\nu_{i,j}^{(k)}}{\gamma_i}. \quad (4.30)$$

De acordo com McCormack [McCormack, 1973], tem-se

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} n_\beta \Omega_{\alpha,\beta}^{11}, \quad (4.31)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 n_\beta \left( \Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} \right), \quad (4.32)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha,\beta}^{22} \right), \quad (4.33)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \Omega_{\alpha,\beta}^{22} \right), \quad (4.34)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left[ \Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \left( \frac{15m_\alpha}{4m_\beta} + \frac{25m_\beta}{8m_\alpha} \right) \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \left( \frac{m_\beta}{2m_\alpha} \right) \left( 5\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \Omega_{\alpha,\beta}^{13} \right) \right] \quad (4.35)$$

e após uma correção de Sharipov e Kalempa [Sharipov e Kalempa, 2003]

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \left( \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{3/2} n_\beta \left[ -\Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{12} + \frac{1}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{13} \right]. \quad (4.36)$$

Aqui

$$m_{\alpha,\beta} = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \quad (4.37)$$

e as funções  $\Omega$  são as integrais de Chapman-Cowling [Chapman e Cowling, 1970]. Estas integrais dependem do potencial de interação intermolecular. Para o caso do modelo de esfera rígida tem-se

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{ij} = \frac{(j+1)!}{8} \left[ 1 - \frac{1 + (-1)^i}{2(i+1)} \right] \left( \frac{\pi kT}{2m_{\alpha,\beta}} \right) (d_\alpha + d_\beta)^2 \quad (4.38)$$

onde  $d_\alpha$  é o diâmetro molecular da espécie  $\alpha$ .

Seguindo Sharipov e Kalempa [Sharipov e Kalempa, 2003], introduz-se na Eq. (4.4) a seguinte variável espacial adimensional

$$y = \frac{y^*}{l_0}, \quad (4.39)$$

onde

$$l_0 = \frac{\mu v_0}{P_0} \quad (4.40)$$

representa o livre caminho médio (baseado na viscosidade) da mistura. Ainda, seguindo Sharipov e Kalempa [Sharipov e Kalempa, 2003], escreve-se a velocidade molecular característica da mistura como

$$v_0 = \left( \frac{2kT_0}{m} \right)^{1/2}. \quad (4.41)$$

A massa molecular média da mistura  $m$  é definida como

$$m = C_0 m_1 + (1 - C_0) m_2, \quad (4.42)$$

onde  $m_\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2$  é a massa molecular da espécie  $\alpha$  e a concentração molar  $C_0$  define-se

como

$$C_0 = \frac{n_1}{n_1 + n_2}. \quad (4.43)$$

A viscosidade da mistura em termos das pressões parciais  $P_\alpha$  e a frequência de colisão  $\gamma_\alpha$  [Sharipov e Kalempa, 2003] são expressas como

$$\mu = \frac{P_1}{\gamma_1} + \frac{P_2}{\gamma_2}, \quad (4.44)$$

onde

$$\frac{P_\alpha}{P_0} = \frac{n_\alpha}{n_1 + n_2}, \quad (4.45)$$

$$\gamma_1 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}}{\Psi_2 + \nu_{1,2}^{(4)}} \quad (4.46)$$

e

$$\gamma_2 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}}{\Psi_1 + \nu_{2,1}^{(4)}}. \quad (4.47)$$

Aqui,

$$\Psi_\alpha = \nu_{\alpha,\alpha}^{(3)} - \nu_{\alpha,\alpha}^{(4)} + \nu_{\alpha,\beta}^{(3)}, \quad \alpha = 1, 2, \quad \beta = 1, 2 \quad e \quad \beta \neq \alpha. \quad (4.48)$$

Finalmente, reescreve-se a Eq. (4.4) em termos da variável  $y$  como

$$c_y \frac{\partial}{\partial y} h_\alpha(y, \mathbf{c}) + \sigma_\alpha h_\alpha(y, \mathbf{c}) = \sigma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(y, \mathbf{c}), \quad (4.49)$$

onde

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \omega_\alpha l_0 \quad (4.50)$$

ou, mais explicitamente,

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \frac{n_1/\gamma_1 + n_2/\gamma_2}{n_1 + n_2} (m_\alpha/m)^{1/2}. \quad (4.51)$$

## 4.2 Condições de Contorno

Neste trabalho, nos problemas de mistura de gases, as condições de contorno consideradas são baseadas no modelo de Cercignani-Lampis [Cercignani e Lampis, 1971; Siewert, 2002a] que é escrita como

$$h_\alpha(-a, c_x, c_y, c_z) = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty h_\alpha(-a, c'_x, -c'_y, c'_z) \mathbf{R}_{CL\alpha}(c'_x, -c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) dc'_x dc'_z dc'_y \quad (4.52)$$

e

$$h_\alpha(a, c_x, -c_y, c_z) = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty h_\alpha(a, c'_x, c'_y, c'_z) \mathbf{R}_{CL\alpha}(c'_x, c'_y, c'_z : c_x, -c_y, c_z) dc'_x dc'_z dc'_y, \quad (4.53)$$

onde

$$\mathbf{R}_{CL\alpha}(c'_x, c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) = \frac{2c'_y}{\pi a_{n\alpha} a_{t\alpha} (2 - a_{t\alpha})} T_\alpha(c'_x : c_x) S_\alpha(c'_y : c_y) T_\alpha(c'_z : c_z), \quad \alpha = 1, 2, \quad (4.54)$$

$$T_\alpha(x : z) = \exp\left[-\frac{[(1 - a_{t\alpha})z - x]^2}{a_{t\alpha}(2 - a_{t\alpha})}\right], \quad (4.55)$$

$$S_\alpha(x : z) = \exp\left[-\frac{[(1 - a_{n\alpha})^{1/2}z - x]^2}{a_{n\alpha}}\right] \widehat{I}_0\left[\frac{2(1 - a_{n\alpha})^{1/2}|xz|}{a_{n\alpha}}\right] \quad (4.56)$$

e

$$\widehat{I}_0(w) = I_0(w)e^{-w}. \quad (4.57)$$

Ainda,  $a_{t\alpha}$  representa o coeficiente de acomodação do momento tangencial da espécie  $\alpha$  ( $\alpha = 1, 2$ ) e  $a_{n\alpha}$  é o coeficiente de acomodação da energia cinética devido a componente normal da velocidade da espécie  $\alpha$  ( $\alpha = 1, 2$ ).

Para o problema de Salto de Temperatura, além de uma condição de contorno, como a Eq. (4.52) com  $a = 0$ , para o modelo de Cercignani-Lampis, considera-se ainda uma condição associada ao comportamento da solução no infinito. Esta condição (generalizada),



segundo Welander [Welander, 1954] é dada pela seguinte equação

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \frac{d}{dy} \mathbf{T}(y) = K_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.58)$$

Aqui,  $K_2$  é uma constante de normalização e a função vetorial temperatura  $\mathbf{T}(y)$  tem como componentes  $T_\alpha(y)$ , ( $\alpha = 1, 2$ ).

### 4.3 Grandezas Físicas

Para calcular a função distribuição completa  $h_\alpha(y, \mathbf{c})$ , necessita-se trabalhar explicitamente com as Eqs. (4.49) e (4.52). Entretanto, desde que procura-se, no problema de Salto de Temperatura, o desvio de densidade [Siewert, 2004]

$$N_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) dc_x dc_y dc_z, \quad (4.59)$$

e o desvio de temperatura [Siewert, 2004]

$$T_\alpha(y) = \frac{2}{3} \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) (\mathbf{c}^2 - 3/2) dc_x dc_y dc_z, \quad (4.60)$$

nos problemas de Deslizamento Viscoso e Deslizamento Térmico, calcula-se o perfil de velocidade

$$v_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) c_x dc_x dc_y dc_z, \quad (4.61)$$

o perfil da tensão de cisalhamento

$$p_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) c_x c_z dc_x dc_y dc_z \quad (4.62)$$

e o perfil de fluxo de calor

$$q_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) (\mathbf{c}^2 - 5/2) c_x dc_x dc_y dc_z, \quad (4.63)$$

necessita-se trabalhar somente com certos momentos (integrais) das Eqs. (4.49) e (4.52). Para os problemas deste capítulo, usa-se os mesmos momentos (integrais) para os problemas

de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso e momentos diferentes para o problema de Salto de Temperatura, como pode ser constatado nas seções que seguem.

#### 4.4 Problema de Salto de Temperatura

De acordo com a sub-seção anterior, para avaliar-se as grandezas físicas, precisa-se trabalhar apenas com certos momentos (integrais) das Eqs. (4.49) e (4.52). Para o problema de Salto de Temperatura, inicia-se multiplicando-se a Eq. (4.49) por

$$\phi_1(c_x, c_z) = \frac{1}{\pi} e^{-(c_x^2 + c_z^2)} \quad (4.64)$$

e integra-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$ .

A seguir, repete-se este procedimento multiplicando-se agora por

$$\phi_2(c_x, c_z) = \frac{1}{\pi} (c_x^2 + c_z^2 - 1) e^{-(c_x^2 + c_z^2)} \quad (4.65)$$

e integrando-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$ . Considera-se a nova variável  $\xi = c_y$ .

Assim, obtém-se quatro equações de balanço

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial}{\partial y} g_1(y, \xi) + \sigma_1 g_1(y, \xi) &= \pi^{-1/2} \sigma_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{11}(\xi', \xi) g_1(y, \xi') + k_{12}(\xi', \xi) g_2(y, \xi') \\ &+ k_{13}(\xi', \xi) g_3(y, \xi') + k_{14}(\xi', \xi) g_4(y, \xi')] d\xi', \end{aligned} \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial}{\partial y} g_2(y, \xi) + \sigma_1 g_2(y, \xi) &= \pi^{-1/2} \sigma_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{21}(\xi', \xi) g_1(y, \xi') + k_{22}(\xi', \xi) g_2(y, \xi') \\ &+ k_{23}(\xi', \xi) g_3(y, \xi') + k_{24}(\xi', \xi) g_4(y, \xi')] d\xi', \end{aligned} \quad (4.67)$$

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial}{\partial y} g_3(y, \xi) + \sigma_2 g_3(y, \xi) &= \pi^{-1/2} \sigma_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{31}(\xi', \xi) g_1(y, \xi') + k_{32}(\xi', \xi) g_2(y, \xi') \\ &+ k_{33}(\xi', \xi) g_3(y, \xi') + k_{34}(\xi', \xi) g_4(y, \xi')] d\xi' \end{aligned} \quad (4.68)$$

e

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial}{\partial y} g_4(y, \xi) + \sigma_2 g_4(y, \xi) &= \pi^{-1/2} \sigma_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{41}(\xi', \xi) g_1(y, \xi') + k_{42}(\xi', \xi) g_2(y, \xi') \\ &+ k_{43}(\xi', \xi) g_3(y, \xi') + k_{44}(\xi', \xi) g_4(y, \xi')] d\xi', \end{aligned} \quad (4.69)$$

onde

$$g_1(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_x, c_z) h_1(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.70)$$

$$g_2(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_x, c_z) h_1(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.71)$$

$$g_3(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_x, c_z) h_2(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.72)$$

$$g_4(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_x, c_z) h_2(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.73)$$

$$k_{1,1}(\xi', \xi) = 1 + f_{1,1}(\xi', \xi) \xi' \xi + (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)} + 2\varpi_1](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \quad (4.74)$$

$$k_{1,2}(\xi', \xi) = [(4/5)\beta_1(\xi^2 - 3/2) - \eta_{1,2}^{(2)}] \xi' \xi + (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)} - \varpi_1](\xi^2 - 1/2), \quad (4.75)$$

$$k_{1,3}(\xi', \xi) = f_{1,3}(\xi', \xi) \xi' \xi + (4/3)[r^* \eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \quad (4.76)$$

$$k_{1,4}(\xi', \xi) = [r^3 \eta_{1,2}^{(2)} + (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(\xi^2 - 3/2)] \xi' \xi + (2/3)[2r^* \eta_{1,2}^{(1)} - \eta_{1,2}^{(4)}](\xi^2 - 1/2), \quad (4.77)$$

$$k_{2,1}(\xi', \xi) = [(4/5)\beta_1(\xi'^2 - 3/2) - \eta_{1,2}^{(2)}] \xi' \xi + (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)} - \varpi_1](\xi'^2 - 1/2), \quad (4.78)$$

$$k_{2,2}(\xi', \xi) = (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)}] + (1/3)\varpi_1 + (4/5)\beta_1 \xi' \xi, \quad (4.79)$$

$$k_{2,3}(\xi', \xi) = [r \eta_{1,2}^{(2)} + (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(\xi'^2 - 3/2)] \xi' \xi + (2/3)[2r^* \eta_{1,2}^{(1)} - \eta_{1,2}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2), \quad (4.80)$$

$$k_{2,4}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{1,2}^{(6)} \xi' \xi + (1/3)[4r^* \eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(4)}], \quad (4.81)$$

$$k_{3,1}(\xi', \xi) = f_{3,1}(\xi', \xi) \xi' \xi + (4/3)[s^* \eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \quad (4.82)$$

$$k_{3,2}(\xi', \xi) = [s^3\eta_{2,1}^{(2)} + (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(\xi^2 - 3/2)]\xi'\xi + (2/3)[2s^*\eta_{2,1}^{(1)} - \eta_{2,1}^{(4)}](\xi^2 - 1/2), \quad (4.83)$$

$$k_{3,3}(\xi', \xi) = 1 + f_{3,3}(\xi', \xi)\xi'\xi + (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)} + 2\varpi_2](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \quad (4.84)$$

$$k_{3,4}(\xi', \xi) = [(4/5)\beta_2(\xi^2 - 3/2) - \eta_{2,1}^{(2)}]\xi'\xi + (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)} - \varpi_2](\xi^2 - 1/2), \quad (4.85)$$

$$k_{4,1}(\xi', \xi) = [s\eta_{2,1}^{(2)} + (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(\xi'^2 - 3/2)]\xi'\xi + (2/3)[2s^*\eta_{2,1}^{(1)} - \eta_{2,1}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2), \quad (4.86)$$

$$k_{4,2}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}\xi'\xi + (1/3)[4s^*\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(4)}], \quad (4.87)$$

$$k_{4,3}(\xi', \xi) = [(4/5)\beta_2(\xi'^2 - 3/2) - \eta_{2,1}^{(2)}]\xi'\xi + (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)} - \varpi_2](\xi'^2 - 1/2) \quad (4.88)$$

e

$$k_{4,4}(\xi', \xi) = (2/3)[1 - 2s^*\eta_{2,1}^{(1)}] + (1/3)\varpi_2 + (4/5)\beta_2\xi'\xi. \quad (4.89)$$

Aqui, define-se

$$f_{1,1}(\xi', \xi) = 2[1 - \eta_{1,2}^{(1)}] - \eta_{1,2}^{(2)}(\xi'^2 + \xi^2 - 3) + (4/5)\beta_1(\xi'^2 - 3/2)(\xi^2 - 3/2), \quad (4.90)$$

$$f_{3,3}(\xi', \xi) = 2[1 - \eta_{2,1}^{(1)}] - \eta_{2,1}^{(2)}(\xi'^2 + \xi^2 - 3) + (4/5)\beta_2(\xi'^2 - 3/2)(\xi^2 - 3/2), \quad (4.91)$$

$$f_{1,3}(\xi', \xi) = 2r\eta_{1,2}^{(1)} + r\eta_{1,2}^{(2)}[r^2(\xi'^2 - 3/2) + \xi^2 - 3/2] + (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(\xi'^2 - 3/2)(\xi^2 - 3/2) \quad (4.92)$$

e

$$f_{3,1}(\xi', \xi) = 2s\eta_{2,1}^{(1)} + s\eta_{2,1}^{(2)}[s^2(\xi'^2 - 3/2) + \xi^2 - 3/2] + (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(\xi'^2 - 3/2)(\xi^2 - 3/2). \quad (4.93)$$

Escrevendo-se as Eqs (4.66), (4.67), (4.68) e (4.69) na forma vetorial, tem-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \xi) + \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \xi) = \boldsymbol{\Sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(\mathbf{y}, \xi') d\xi', \quad (4.94)$$

onde

$$\mathbf{\Sigma} = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_2\} \quad (4.95)$$

e

$$\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2}. \quad (4.96)$$

As componentes de  $\mathbf{G}(y, \xi)$  dadas pelas Eqs. (4.70) - (4.73) podem ser reescritas como

$$g_{2\alpha-1}(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_x, c_z) h_\alpha(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z \quad (4.97)$$

e

$$g_{2\alpha}(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_x, c_z) h_\alpha(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.98)$$

com  $\alpha = 1, 2$ . Ainda, as componentes  $k_{i,j}(\xi', \xi)$  do núcleo  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  são definidas pelas Eqs. (4.74) - (4.89).

Comparando-se a Eq. (4.94) do problema de Salto de Temperatura para mistura de gases com as Eqs. (3.101) e (3.102) relativas ao problema de Salto de Temperatura para o caso de um gás, nota-se uma semelhança na forma da equação, evidentemente, apresentam diferentes soluções exatas, as dimensões dos problemas não são as mesmas e os núcleos de espalhamento apresentam dimensões e elementos diferentes.

Para encontrar a condição de contorno relativa a Eq. (4.94), realiza-se as mesmas projeções  $\phi_1(c_x, c_y)$  e  $\phi_2(c_x, c_y)$  na Eq. (4.52), com  $a = 0$ , obtendo-se

$$\mathbf{G}(0, \xi) = \mathbf{D} \int_0^{\infty} \mathbf{F}(\xi', \xi) \mathbf{G}(0, -\xi) d\xi', \quad \xi > 0, \quad (4.99)$$

onde

$$\mathbf{D} = \text{diag} \{1, (1 - a_{t1})^2, 1, (1 - a_{t2})^2\} \quad (4.100)$$

e

$$\mathbf{F}(\xi', \xi) = \text{diag} \{f_1(\xi', \xi), f_1(\xi', \xi), f_2(\xi', \xi), f_2(\xi', \xi)\}. \quad (4.101)$$

Aqui

$$f_1(\xi', \xi) = \frac{2\xi'}{a_{n1}} \exp\left[-\frac{[(1 - a_{n1})^{1/2}\xi - \xi']^2}{a_{n1}}\right] \widehat{I}_0\left[\frac{2(1 - a_{n1})^{1/2}\xi'\xi}{a_{n1}}\right] \quad (4.102)$$

e

$$f_2(\xi', \xi) = \frac{2\xi'}{a_{n2}} \exp\left[-\frac{[(1 - a_{n2})^{1/2}\xi - \xi']^2}{a_{n2}}\right] \widehat{I}_0\left[\frac{2(1 - a_{n2})^{1/2}\xi'\xi}{a_{n2}}\right] \quad (4.103)$$

para  $\xi, \xi' \in (0, \infty)$ .

Assim, resolvendo-se a Eq. (4.94) com a condição de contorno dada pela Eq. (4.99), as grandezas físicas de interesse descritas pelas Eqs. (4.59) e (4.60), podem ser escritas como

- Desvio de densidade:

$$N_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) g_{2\alpha-1}(y, \xi) d\xi, \quad \alpha = 1, 2. \quad (4.104)$$

- Desvio de temperatura:

$$T_\alpha(y) = \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) [(\xi^2 - 1/2)g_{2\alpha-1}(y, \xi) + g_{2\alpha}(y, \xi)] d\xi, \quad \alpha = 1, 2. \quad (4.105)$$

## 4.5 Problema de Deslizamento Viscoso

Conforme citado anteriormente, para avaliar-se as grandezas físicas, precisa-se trabalhar apenas com certos momentos (integrais) das Eqs. (4.49) e (4.52). Para o problema de Deslizamento Viscoso inicia-se multiplicando-se a Eq. (4.49) por

$$\phi_1(c_x, c_z) = \frac{1}{\pi} e^{-(c_x^2 + c_z^2)} c_z \quad (4.106)$$

e integra-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$ .

A seguir, repete-se este procedimento multiplicando-se agora por

$$\phi_2(c_x, c_z) = \frac{1}{\pi} (c_x^2 + c_z^2 - 2) c_z e^{-(c_x^2 + c_z^2)} \quad (4.107)$$

e integrando-se sobre todo  $c_x$  e  $c_z$ . Considera-se a nova variável  $\xi = c_y$ .

Assim, obtém-se quatro equações de balanço

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} g_1(y, \xi) + \sigma_1 g_1(y, \xi) = \pi^{-1/2} \sigma_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{11}(\xi', \xi) g_1(y, \xi') + k_{12}(\xi', \xi) g_2(y, \xi') + k_{13}(\xi', \xi) g_3(y, \xi') + k_{14}(\xi', \xi) g_4(y, \xi')] d\xi', \quad (4.108)$$

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} g_2(y, \xi) + \sigma_1 g_2(y, \xi) = \pi^{-1/2} \sigma_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{21}(\xi', \xi) g_1(y, \xi') + k_{22}(\xi', \xi) g_2(y, \xi') + k_{23}(\xi', \xi) g_3(y, \xi') + k_{24}(\xi', \xi) g_4(y, \xi')] d\xi', \quad (4.109)$$

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} g_3(y, \xi) + \sigma_2 g_3(y, \xi) = \pi^{-1/2} \sigma_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{31}(\xi', \xi) g_1(y, \xi') + k_{32}(\xi', \xi) g_2(y, \xi') + k_{33}(\xi', \xi) g_3(y, \xi') + k_{34}(\xi', \xi) g_4(y, \xi')] d\xi' \quad (4.110)$$

e

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} g_4(y, \xi) + \sigma_2 g_4(y, \xi) = \pi^{-1/2} \sigma_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{41}(\xi', \xi) g_1(y, \xi') + k_{42}(\xi', \xi) g_2(y, \xi') + k_{43}(\xi', \xi) g_3(y, \xi') + k_{44}(\xi', \xi) g_4(y, \xi')] d\xi', \quad (4.111)$$

onde

$$g_1(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_x, c_z) h_1(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.112)$$

$$g_2(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_x, c_z) h_1(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.113)$$

$$g_3(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_x, c_z) h_2(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.114)$$

$$g_4(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_x, c_z) h_2(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.115)$$

$$k_{1,1}(\xi', \xi) = 2\varpi_1 \xi' \xi + 1 - \eta_{1,2}^{(1)} - \eta_{1,2}^{(2)} (\xi'^2 + \xi^2 - 1)/2 + 2\beta_1 (\xi'^2 - 1/2) (\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.116)$$

$$k_{1,2}(\xi', \xi) = -(1/2) \eta_{1,2}^{(2)} + 2\beta_1 (\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.117)$$

$$k_{1,3}(\xi', \xi) = 2\eta_{1,2}^{(4)}\xi'\xi + r\{\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(2)}[r^2(\xi'^2 - 1/2) + \xi^2 - 1/2]/2\} + 2\eta_{1,2}^{(6)}(\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.118)$$

$$k_{1,4}(\xi', \xi) = (1/2)r^3\eta_{1,2}^{(2)} + 2\eta_{1,2}^{(6)}(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.119)$$

$$k_{2,1}(\xi', \xi) = -\eta_{1,2}^{(2)} + 4\beta_1(\xi'^2 - 1/2)/5, \quad (4.120)$$

$$k_{2,2}(\xi', \xi) = (4/5)\beta_1, \quad (4.121)$$

$$k_{2,3}(\xi', \xi) = r\eta_{1,2}^{(2)} + 4\eta_{1,2}^{(6)}(\xi'^2 - 1/2)/5, \quad (4.122)$$

$$k_{2,4}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}, \quad (4.123)$$

$$k_{3,1}(\xi', \xi) = 2\eta_{2,1}^{(4)}\xi'\xi + s\{\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(2)}[s^2(\xi'^2 - 1/2) + \xi^2 - 1/2]/2\} + 2\eta_{2,1}^{(6)}\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.124)$$

$$k_{3,2}(\xi', \xi) = (1/2)s^3\eta_{2,1}^{(2)} + 2\eta_{2,1}^{(6)}(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.125)$$

$$k_{3,3}(\xi', \xi) = 2\varpi_2\xi'\xi + 1 - \eta_{2,1}^{(1)} - \eta_{2,1}^{(2)}(\xi'^2 + \xi^2 - 1)/2 + 2\beta_2(\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.126)$$

$$k_{3,4}(\xi', \xi) = -(1/2)\eta_{2,1}^{(2)} + 2\beta_2(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.127)$$

$$k_{4,1}(\xi', \xi) = s\eta_{2,1}^{(2)} + 4\eta_{2,1}^{(6)}(\xi'^2 - 1/2)/5, \quad (4.128)$$

$$k_{4,2}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}, \quad (4.129)$$

$$k_{4,3}(\xi', \xi) = -\eta_{2,1}^{(2)} + 4\beta_2(\xi'^2 - 1/2)/5 \quad (4.130)$$



e

$$k_{4,4}(\xi', \xi) = (4/5)\beta_2. \quad (4.131)$$

Escrevendo-se as Eqs. (4.108) – (4.111) na forma vetorial, tem-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{G}(y, \xi) + \mathbf{\Sigma} \mathbf{G}(y, \xi) = \mathbf{\Sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(y, \xi') d\xi', \quad (4.132)$$

onde

$$\mathbf{\Sigma} = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_2\} \quad (4.133)$$

e

$$\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2}. \quad (4.134)$$

As componentes de  $\mathbf{G}(y, \xi)$  dadas pelas Eqs. (4.112) - (4.115) podem ser reescritas como

$$g_{2\alpha-1}(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_x, c_z) h_\alpha(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z \quad (4.135)$$

e

$$g_{2\alpha}(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_x, c_z) h_\alpha(y, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (4.136)$$

com  $\alpha = 1, 2$ . Ainda, as componentes  $k_{i,j}(\xi', \xi)$  do núcleo  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  são definidas pelas Eqs. (4.116) - (4.131).

Para encontrar a condição de contorno relativa a Eq. (4.94), realiza-se as mesmas projeções  $\phi_1(c_x, c_y)$  e  $\phi_2(c_x, c_y)$  na Eq. (4.52), com  $a = 0$ , obtendo-se

$$\mathbf{G}(0, \xi) = \mathbf{D} \int_0^{\infty} \mathbf{F}(\xi', \xi) \mathbf{G}(0, -\xi) d\xi', \quad \xi > 0, \quad (4.137)$$

onde

$$\mathbf{D} = \text{diag} \left\{ (1 - a_{t1}), (1 - a_{t1})^3, (1 - a_{t2}), (1 - a_{t2})^3 \right\} \quad (4.138)$$

e  $\mathbf{F}(\xi', \xi)$  é dada pela Eq. (4.101).

Assim, resolvendo-se a Eq. (4.132) com a condição de contorno dada pela Eq.

(4.137), as grandezas físicas de interesse descritas pelas Eqs. (4.61), (4.62) e (4.63), podem ser escritas como

- Perfil de velocidade:

$$v_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) g_{2\alpha-1}(y, \xi) d\xi, \quad \alpha = 1, 2. \quad (4.139)$$

- Perfil da tensão de cisalhamento:

$$p_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) g_{2\alpha-1}(y, \xi) \xi d\xi, \quad \alpha = 1, 2. \quad (4.140)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) [(\xi^2 - 1/2)g_{2\alpha-1}(y, \xi) + g_{2\alpha}(y, \xi)] d\xi, \quad \alpha = 1, 2. \quad (4.141)$$

## 4.6 Problema de Deslizamento Térmico

No problema de Deslizamento Térmico, o movimento do gás é causado por um gradiente constante de temperatura na direção paralela à parede. A linearização da função distribuição da velocidade das partículas é feita através de uma Maxwelliana local [Siewert e Valougeorgis, 2004a] dada por

$$f_\alpha(y, \eta, \mathbf{c}) = f_{\alpha,0}(\mathbf{c}) \left\{ 1 + \eta \left[ \left( \mathbf{c}^2 - \frac{3}{2} \right) K_\eta + R_\eta \right] + h_\alpha(y, \mathbf{v}) \right\}, \quad (4.142)$$

onde  $\eta = x/l_0$ .  $K_\eta$  e  $R_\eta$  são, respectivamente, os gradientes de temperatura e densidade na direção  $\eta$  e

$$f_{\alpha,0}(\mathbf{c}) = n_\infty (\lambda_\alpha / \pi)^{3/2} e^{-\lambda_\alpha \mathbf{c}^2}, \quad \lambda_\alpha = m_\alpha / (2kT_0). \quad (4.143)$$

Para o problema de Deslizamento Térmico, devido a pressão ser constante, a densidade da mistura pode variar com  $\eta$ . Em função disso, ou seja, para ter-se  $p = nkT = \text{constante}$ , tem-se  $R_\eta = -K_\eta$  e reescreve-se a Eq. (4.142) como

$$f_\alpha(y, \eta, \mathbf{c}) = f_{\alpha,0}(\mathbf{c}) \left[ 1 + \eta \left( \mathbf{c}^2 - \frac{5}{2} \right) K_\eta + h_\alpha(y, \mathbf{v}) \right]. \quad (4.144)$$

Segundo Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2004a], como resultado desta linearização, o termo não-homogêneo

$$\mathbf{S}_1(\xi) = K_\eta \begin{bmatrix} (1/2)(\xi^2 - 1/2) \\ 1 \\ (1/2)(\xi^2 - 1/2) \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (4.145)$$

pode ser acrescentado à Eq. (4.132), resultando

$$\mathbf{S}_1(\xi) + \xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{G}(y, \xi) + \Sigma \mathbf{G}(y, \xi) = \Sigma \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(y, \xi') d\xi', \quad (4.146)$$

$\mathbf{K}(\xi', \xi)$  é formado pelas componentes dadas pelas Eqs. (4.116) - (4.131),  $\Sigma$  é dada pela Eq. (4.133),  $\mathbf{G}(y, \xi)$  é formada pelas componentes dadas pelas Eqs (4.135) e (4.136) e  $\psi(\xi)$  dada pela Eq. (4.134).

O problema de Deslizamento Térmico para mistura de gases, Eq. (4.146), é associado a condição de contorno dada pela Eq. (4.137). As grandezas físicas, como perfil de velocidade, perfil da tensão de cisalhamento e perfil de fluxo de calor, são dadas, respectivamente, pelas Eqs (4.139), (4.140) e (4.141).

Observa-se uma semelhança na equação que define o problema de Deslizamento Térmico para mistura de gases, Eq. (4.146), com as equações que definem esse mesmo problema para o caso de um gás, Eqs. (3.14) e Eqs. (3.15), com seus respectivos termos de fonte. Evidentemente, apresentam diferentes soluções exatas, as dimensões dos problemas não são as mesmas e os núcleos de espalhamento apresentam dimensões e elementos diferentes.

## CAPÍTULO 5

---

### SOLUÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS - CASO DE UM GÁS

Para encontrar os resultados numéricos dos problemas propostos neste trabalho, derivados segundo o modelo BGK ou S, utiliza-se o método determinístico de ordenadas discretas, em particular uma versão analítica denotada como método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO). Para descrever a interação entre o gás e a superfície, considera-se o modelo de Cercignani-Lampis como o principal processo deste capítulo. Apesar disso, o modelo difuso-especular, para alguns problemas, também será considerado.

#### 5.1 O Método de Ordenadas Discretas

Dentre os métodos determinísticos para resolução de problemas baseados em modelos derivados da equação de Boltzmann linearizada, destaca-se o método de ordenadas discretas, proposto por Wick [Wick, 1943] e Chandrasekhar [Chandrasekhar, 1950], que tem como base a aproximação da integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma fórmula de quadratura numérica, e em resolver analiticamente o sistema de equações diferenciais ordinárias resultante para a função de distribuição de partículas nos pontos de quadratura. No entanto, encontra-se uma dificuldade na aplicação da solução em ordenadas discretas como proposto por Chandrasekhar, basicamente, no cálculo das constantes de separação como raízes de um polinômio.

Mantendo-se as características originais do método de ordenadas discretas proposta por Wick e Chandrasekhar, Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 1999] apresentam o método de ordenadas discretas analítico para a solução de problemas baseados em modelos

derivados da equação de Boltzmann linearizada em geometria plana. Nesta nova versão, as constantes de separação podem ser encontradas a partir de um problema de autovalores e o esquema de quadratura do tipo *half-range* pode ser arbitrário. A presente versão do método também incorpora uma técnica para encontrar soluções particulares com base na função de Green e a técnica de inclusão de “nós mudos” para realizar interpolação angular, no caso da solução ser necessária em outras ordenadas que não aquelas incluídas na quadratura. Essas técnicas podem ser encontradas na Ref. [Garcia, 2002].

Para exemplificar o método de ordenadas discretas analítico, escolhe-se um problema simples, definido pela seguinte equação

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \Upsilon(y, \xi) + \varepsilon \Upsilon(y, \xi) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi') \Upsilon(y, \xi') d\xi' + \Gamma(y, \xi), \quad (5.1)$$

com  $y \in [-a, a]$  e  $\xi \in (-\infty, \infty)$ .

O método de Ordenadas Discretas Analítico aproxima o termo integral de espalhamento usando uma fórmula de quadraturas. A aproximação da integral de uma função por quadraturas numéricas, no caso de  $x \in [-1, 1]$ , segue a fórmula básica [Davis e Polonsky, 1964]

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{k=1}^N \omega_k f(x_k), \quad (5.2)$$

onde, na prescrição de Gauss, os nós  $\{x_k\}$  são os zeros do polinômio de Legendre  $P_N(x)$  e  $\{\omega_k\}$  os pesos associados. Quando o intervalo de integração é um segmento finito arbitrário  $[a, b]$ , um simples mapeamento linear relaciona a integral original com uma integral definida sobre o intervalo  $[-1, 1]$ . No caso de integrais definidas sobre intervalos infinitos ou semi-infinitos, existem mapeamentos não-lineares [Barichello e Siewert, 1999] que relacionam essas integrais com uma integral do tipo daquela na Eq. (5.2).

Sabe-se que a função de distribuição de partículas  $\Upsilon(y, \xi)$  apresenta descontinuidades nos contornos  $y = -a$  e  $y = a$ , quando  $\xi \rightarrow 0$  pela esquerda e pela direita. Assim, para melhor representar a integral de espalhamento na Eq. (5.1) é conveniente separar o intervalo de integração  $[-\infty, \infty]$  em dois intervalos,  $[-\infty, 0]$  e  $[0, \infty]$  e usar a transformação  $u(\xi) = e^{-\xi}$  para mapear  $\xi \in [0, \infty]$  sobre  $u \in [0, 1]$  e, então, aplicar a fórmula de Gauss-Legendre mapeado (linearmente) no intervalo  $[0, 1]$ . Denotando por  $\{\xi_k\}$  e  $\{\omega_k\}$  os conjuntos

dos  $N$  pontos de quadraturas e  $N$  pesos obtidos para o intervalo  $[0, \infty]$ , pode-se escrever as equações de ordenadas discretas para a versão homogênea da Eq. (5.1) como

$$\xi_i \frac{d}{dy} \Upsilon(y, \xi_i) + \varepsilon \Upsilon(y, \xi_i) = \varepsilon \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k) [\Upsilon(y, \xi_k) + \Upsilon(y, -\xi_k)] \quad (5.3)$$

e

$$-\xi_i \frac{d}{dy} \Upsilon(y, -\xi_i) + \varepsilon \Upsilon(y, -\xi_i) = \varepsilon \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k) [\Upsilon(y, \xi_k) + \Upsilon(y, -\xi_k)], \quad (5.4)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Claramente, as Eqs. (5.3) e (5.4) admitem soluções exponenciais, portanto, substituindo

$$\Upsilon(y, \pm \xi_i) = \Phi(\nu, \pm \xi_i) e^{-y\varepsilon/\nu}, \quad (5.5)$$

nas Eqs. (5.3) e (5.4), obtém-se

$$\frac{1}{\nu} \Xi \Phi_+(\nu) = (\mathbf{I}^* - \mathbf{W}) \Phi_+(\nu) - \mathbf{W} \Phi_-(\nu) \quad (5.6)$$

e

$$-\frac{1}{\nu} \Xi \Phi_-(\nu) = (\mathbf{I}^* - \mathbf{W}) \Phi_-(\nu) - \mathbf{W} \Phi_+(\nu) \quad (5.7)$$

onde  $\mathbf{I}^*$  é a matriz identidade de dimensão  $2N \times 2N$ ,  $\mathbf{W}$  é uma matriz de dimensão  $2N \times 2N$  na qual a cada  $2 \times 2N$  linhas é dada por

$$\mathbf{R}_i = [\omega_1 \Psi(\xi_1) \quad \omega_2 \Psi(\xi_2) \quad \cdots \quad \omega_N \Psi(\xi_N)], \quad (5.8)$$

$\Phi_+(\nu)$  e  $\Phi_-(\nu)$  denotam vetores  $2N \times 1$ , nos quais as  $2 \times 1$  componentes são, respectivamente,  $\Phi(\nu, +\xi_k)$  e  $\Phi(\nu, -\xi_k)$  e

$$\Xi = \text{diag}\{\xi_1 \mathbf{I}, \xi_2 \mathbf{I}, \dots, \xi_N \mathbf{I}\}. \quad (5.9)$$

Aqui,  $\mathbf{I}$  representa a matriz identidade de dimensão  $2 \times 2$ . Pela adição e subtração das Eqs. (5.6) e (5.7) obtém-se ainda as relações

$$\frac{1}{\nu} \Xi [\Phi_+(\nu) - \Phi_-(\nu)] = (\mathbf{I}^* - 2\mathbf{W}) [\Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu)] \quad (5.10)$$

e

$$\frac{1}{\nu}\Xi[\Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu)] = \Phi_+(\nu) - \Phi_-(\nu). \quad (5.11)$$

Neste momento, reescreve-se as Eqs. (5.10) e (5.11) da seguinte forma

$$(\mathbf{I}^* - 2\mathbf{W})\mathbf{U} = \frac{1}{\nu}\Xi\mathbf{V} \quad (5.12)$$

e

$$\mathbf{V} = \frac{1}{\nu}\Xi\mathbf{U}, \quad (5.13)$$

onde

$$\mathbf{U} = \Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu) \quad (5.14)$$

e

$$\mathbf{V} = \Phi_+(\nu) - \Phi_-(\nu). \quad (5.15)$$

Multiplicando-se a Eq. (5.12) por  $\Xi^{-1}$ , obtém-se

$$\nu[\mathbf{I}^* - 2\mathbf{W}]\Xi^{-1}\mathbf{U} = \mathbf{V}. \quad (5.16)$$

Substituindo-se a Eq. (5.13) na Eq. (5.16), tem-se

$$\nu[\mathbf{I}^* - 2\mathbf{W}]\Xi^{-1}\mathbf{U} = \frac{1}{\nu}\Xi\mathbf{U}. \quad (5.17)$$

Multiplicando-se a Eq. (5.17) por  $\Xi^{-1}$ , obtém-se o problema de autovalores

$$[\mathbf{D} - 2\widehat{\mathbf{W}}]\mathbf{U} = \lambda\mathbf{U} \quad (5.18)$$

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

$$\mathbf{D} = \Xi^{-2} = \text{diag}\{\xi_1^{-2}\mathbf{I}, \xi_2^{-2}\mathbf{I}, \dots, \xi_N^{-2}\mathbf{I}\} \quad (5.19)$$

e  $\widehat{\mathbf{W}}$  é uma matriz de dimensão  $2N \times 2N$  onde cada  $2 \times 2N$  linha é dada por

$$\mathbf{R}_i = 1/\xi_i^2 [\omega_1 \Psi(\xi_1) \quad \omega_2 \Psi(\xi_2) \quad \cdots \quad \omega_N \Psi(\xi_N)], \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, N. \quad (5.20)$$

Nota-se que  $\mathbf{I}$ , na Eq. (5.19) é usado para denotar a matriz identidade de dimensão  $2 \times 2$ .

Uma vez calculado o conjunto de autovalores  $\{\lambda_j\}$  do sistema definido pela Eq. (5.18), as constantes de separação  $\nu$  que determinam as possíveis soluções na forma da Eq. (5.5) passam a ser conhecidas. Essas constantes ocorrem aos pares de números positivos e negativos. Denotando por  $\nu_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ , o recíproco da raiz quadrada positiva de  $\lambda_j$ , pode-se usar as Eqs. (5.13), (5.15), (5.16) e (5.17) para obter os correspondentes vetores

$$\Phi_+(\nu_j) = \frac{1}{2\nu_j} \text{diag} \{(\nu_j + \xi_1)\mathbf{I}, (\nu_j + \xi_2)\mathbf{I}, \dots, (\nu_j + \xi_N)\mathbf{I}\} \mathbf{U}_j \quad (5.21)$$

e

$$\Phi_-(\nu_j) = \frac{1}{2\nu_j} \text{diag} \{(\nu_j - \xi_1)\mathbf{I}, (\nu_j - \xi_2)\mathbf{I}, \dots, (\nu_j - \xi_N)\mathbf{I}\} \mathbf{U}_j, \quad (5.22)$$

para  $j = 1, 2, \dots, N$ . Nas Eqs. (5.21) e (5.22), é fácil ver que  $\Phi_+(-\nu_j) = \Phi_-(\nu_j)$  e  $\Phi_-(-\nu_j) = \Phi_+(\nu_j)$ .

Então, definindo-se os vetores-solução

$$\Upsilon_+(y) = [\Upsilon(y, \xi_1), \Upsilon(y, \xi_2), \dots, \Upsilon(y, \xi_N)]^T \quad (5.23)$$

e

$$\Upsilon_-(y) = [\Upsilon(y, -\xi_1), \Upsilon(y, -\xi_2), \dots, \Upsilon(y, -\xi_N)]^T \quad (5.24)$$

e usando o princípio da superposição, chega-se que a parte homogênea da solução aproximada em ordenadas discretas da Eq. (5.1) é expressa por

$$\Upsilon_{\pm}^h(y) = \sum_{j=1}^{2N} [A_j \Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)\varepsilon/\nu_j} + B_j \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)\varepsilon/\nu_j}] \quad (5.25)$$

onde  $\{A_j\}$  e  $\{B_j\}$  são os coeficientes de superposição ( constantes arbitrárias).

Neste capítulo, a versão analítica do método de ordenadas discretas, [Barichello e Siewert, 1999; Siewert, 2000b], será usada na busca de soluções para os problemas propostos



no capítulo anterior.

## 5.2 Soluções Particulares

Antes de aplicar o método de ordenadas discretas analítico para encontrar a solução em ordenadas discretas dos problemas propostos, faz-se necessário desenvolver uma solução particular das equações não-homogêneas (3.14) e (3.32) para cada problema.

Para uma melhor compreensão denota-se para o Fluxo de Poiseuille o sub-índice “ $p$ ”, para o Problema *Creep* Térmico o sub-índice “ $t$ ”, para o Deslizamento Térmico o sub-índice “ $d$ ”, para o Problema de Deslizamento Viscoso o sub-índice “ $k$ ” e para o fluxo de Couette o sub-índice “ $c$ ”. Ainda, algumas considerações com relação a normalização devem ser apresentadas, para o Fluxo de Poiseuille considera-se  $R_x = 1$ , para o Problema *Creep* Térmico e Deslizamento Térmico considera-se  $K_x = 1$ .

Seguindo Cabrera [Cabrera, 2003], propõe-se uma solução do tipo

$$\mathbf{H}^p(y, \xi) = \mathbf{B}y^2 + \mathbf{C}y\xi + \mathbf{D}\xi^2 + \mathbf{E}\xi + \mathbf{F}, \quad (5.26)$$

onde  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{D}$  e  $\mathbf{F}$  são vetores com componentes constantes.

Substituindo-se a Eq. (5.26) na Eq. (3.14), encontra-se para o Fluxo de Poiseuille, modelo BGK, a solução particular

$$\mathbf{H}_p^p(y, \xi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} y^2 - 2y\xi + 2\xi^2 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (5.27)$$

Para o Problema *Creep*-Térmico e Deslizamento Térmico, modelo BGK, tem-se

$$\mathbf{H}_t^p(y, \xi) = \mathbf{H}_d^p(y, \xi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -\xi^2 + 1/2 \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} \quad (5.28)$$

e para o modelo S, tem-se como solução particular

$$\mathbf{G}_d^p = \frac{1}{2\varepsilon} \begin{bmatrix} -3/4\sqrt{30} \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (5.29)$$

Para o problema de Deslizamento Viscoso e o Fluxo de Couette, modelo BGK, encontra-se

$$\mathbf{H}_{k,c}^p(\xi) = K_0 \begin{bmatrix} -\xi \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.30)$$

e para o modelo S, tem-se

$$\mathbf{G}_{k,c}^p(\xi) = \frac{1}{\varepsilon} \begin{bmatrix} 0 \\ -K_0\xi \end{bmatrix}. \quad (5.31)$$

Após encontrar as soluções particulares, pode-se escrever, para o modelo BGK

$$\mathbf{H}_{p,t,d,k,c}(y, \xi) = \mathbf{H}_{p,t,d,k,c}^h(y, \xi) + \mathbf{H}_{p,t,d,k,c}^p(y, \xi) \quad (5.32)$$

e encontrar as soluções da equação homogênea

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{H}_{p,t,d,k,c}^h(y, \xi) + \mathbf{H}_{p,t,d,k,c}^h(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Psi}(\xi') \mathbf{H}_{p,t,d,k,c}^h(y, \xi') d\xi', \quad (5.33)$$

onde  $\mathbf{\Psi}(\xi)$  é dada pela Eq. (3.16) e  $\mathbf{Q}^*$  como definido na Eq. (3.17) com as condições de Cercignani-Lampis

$$\mathbf{H}_{p,t,c}^h(a, -\xi) - \mathbf{A} \int_0^{\infty} \mathbf{H}_{p,t,c}^h(a, \xi') f(\xi', \xi) d\xi' = \mathbf{R}_{p,t,c}(\xi) \quad (5.34)$$

para o Fluxo de Poiseuille, Problema *Creep*-Térmico e Fluxo de Couette e

$$\mathbf{H}_{d,k}^h(0, \xi) - \mathbf{A} \int_0^{\infty} \mathbf{H}_{d,k}^h(0, -\xi') f(\xi', \xi) d\xi' = \mathbf{R}_{d,k}(\xi) \quad (5.35)$$

para os Problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso, onde os termos conhecidos  $\mathbf{R}_{p,t,c}(\xi)$  e  $\mathbf{R}_{d,k}(\xi)$  ficam definidos, respectivamente, por

$$\mathbf{R}_{p,t,c}(\xi) = \mathbf{A} \int_0^{\infty} \mathbf{H}_{p,t,c}^p(a, \xi') f(\xi', \xi) d\xi' - \mathbf{H}_{p,t,c}^p(a, -\xi) \quad (5.36)$$

e

$$\mathbf{R}_{d,k}(\xi) = \mathbf{A} \int_0^{\infty} \mathbf{H}_{d,k}^p(0, -\xi') f(\xi', \xi) d\xi' - \mathbf{H}_{d,k}^p(0, \xi). \quad (5.37)$$

Aqui,  $\mathbf{A}$  é dado pela Eq. (3.24) e  $f(\xi', \xi)$  é dado pela Eq. (3.25).

Neste trabalho, o fluxo de Couette também é desenvolvido com as condições de contorno de Maxwell, que para o modelo BGK são dadas por

$$\mathbf{H}_c^h(a, -\xi) - (1 - \alpha)\mathbf{H}_c^h(a, \xi) = \mathbf{R}_c(\xi). \quad (5.38)$$

Aqui,

$$\mathbf{R}_c(\xi) = (1 - \alpha)\mathbf{H}_c^p(a, \xi) - \mathbf{H}_c^p(a, -\xi). \quad (5.39)$$

Para o modelo S, pode-se escrever

$$\mathbf{G}_{d,k,c}(y, \xi) = \mathbf{G}_{d,k,c}^h(y, \xi) + \mathbf{G}_{d,k,c}^p(y, \xi) \quad (5.40)$$

e então buscar soluções para a equação homogênea

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{G}_{d,k,c}^h(y, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}_{d,k,c}^h(y, \xi) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Psi}(\xi') \mathbf{G}_{d,k,c}^h(y, \xi') d\xi', \quad (5.41)$$

onde  $\mathbf{\Psi}(\xi)$  é dada pela Eq. (3.33) associada as condições de contorno de Cercignani-Lampis, para os problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso

$$\mathbf{G}_{d,k}^h(0, \xi) - \int_0^{\infty} \mathbf{T}(\xi', \xi) \mathbf{G}_{d,k}^h(0, -\xi') d\xi' = \mathbf{R}_{d,k}(\xi) \quad (5.42)$$

onde o termo conhecido  $\mathbf{R}_{d,k}(\xi)$  fica definido por

$$\mathbf{R}_{d,k}(\xi) = \int_0^{\infty} \mathbf{T}(\xi', \xi) \mathbf{G}_{d,k}^p(0, -\xi') d\xi' - \mathbf{G}_{d,k}^p(0, \xi) \quad (5.43)$$

e  $\mathbf{T}(\xi', \xi)$  é dado pela Eq. (3.39). Para o fluxo de Couette, associa-se as condições de contorno de Cercignani-Lampis

$$\mathbf{G}_c^h(a, -\xi) - \int_0^{\infty} \mathbf{T}(\xi', \xi) \mathbf{G}_c^h(0, \xi') d\xi' = \mathbf{R}_c(\xi) \quad (5.44)$$

onde o termo conhecido  $\mathbf{R}_c(\xi)$  fica definido por

$$\mathbf{R}_c(\xi) = \int_0^{\infty} \mathbf{T}(\xi', \xi) \mathbf{G}_c^p(a, -\xi') d\xi' - \mathbf{G}_c^p(a, -\xi) \quad (5.45)$$

e  $\mathbf{T}(\xi', \xi)$  é dado pela Eq. (3.39). Associa-se as condições de contorno de Maxwell

$$\mathbf{G}_c^h(a, -\xi) - (1 - \alpha)\mathbf{G}_c^h(a, \xi) = \mathbf{R}_c(\xi). \quad (5.46)$$

Aqui,

$$\mathbf{R}_c(\xi) = (1 - \alpha)\mathbf{G}_c^p(a, \xi) - \mathbf{G}_c^p(a, -\xi). \quad (5.47)$$

Nas próximas seções, encontra-se a solução homogênea para os problemas propostos, utilizando o método analítico de ordenadas discretas como definido na seção 5.1.

### 5.3 Modelo BGK - Cercignani-Lampis

#### 5.3.1 Fluxo de Poiseuille e Problema *Creep* Térmico

As soluções em ordenadas discretas dos problemas de Poiseuille e *Creep* Térmico serão abordadas simultaneamente devido a proximidade em suas características. Nestes problemas procura-se soluções da Eq. (5.33), sujeitas as condições de contorno definidas pela Eq. (5.34) e a condição de simetria dada pela Eq. (3.46).

Estes problemas são conservativos e como discutido na Ref. [Barichello et al., 2001], um dos autovalores Eq. (5.18) tende a zero quando  $N$  tende ao infinito. Levando em conta este fato, negligencia-se a maior constante de separação entre as  $\nu_j$  e reescreve-se a Eq. (5.25) na forma

$$\mathbf{H}_{\pm p, t}^h(y) = A_1 \mathbf{\Phi}^1 + B_1 \mathbf{\Phi}_{\pm}^2(y) + \sum_{j=2}^{2N} [A_j \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)/\nu_j} + B_j \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)/\nu_j}], \quad (5.48)$$

onde introduz-se as soluções exatas  $\mathbf{\Phi}^1$  de dimensão  $2N \times 1$  definida por  $N$  componentes (vetores) da forma

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.49)$$

e a solução  $\Phi_{\pm}^2(y)$  de dimensão  $2N \times 1$  com  $N$  componentes (vetores)

$$\mathbf{F}_2 \pm (y) = \begin{bmatrix} y \mp \xi_i \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.50)$$

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

Para os problemas de Poiseuille e *Creep* Térmico, tem-se a condição de simetria dada pela Eq. (3.46), então, para satisfazer esta condição, considera-se na Eq. (5.48)  $B_1 = 0$  e  $B_j = A_j$ ,  $j = 2, 3, \dots, 2N$ , e reescreve-se a solução para estes problemas como

$$\mathbf{H}_{\pm p, t}^h(y) = A_1 \Phi^1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)/\nu_j} + \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)/\nu_j}]. \quad (5.51)$$

Para completar a solução do problema, substitui-se a Eq. (5.51) na condição de contorno dada pela Eq. (5.34), obtendo-se o sistema de equações algébricas lineares

$$A_1 \left\{ \Phi^1 - \left[ \mathbf{A}^* \Phi^1 \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \right] \right\} + \sum_{j=2}^{2N} A_j \left\{ \left[ \Phi_{-}(\nu_j) e^{-2a/\nu_j} + \Phi_{+}(\nu_j) \right] - \left[ \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{A}^* \left[ \Phi_{+}(\nu_j) e^{-2a/\nu_j} + \Phi_{-}(\nu_j) \right] \right] \right\} = \mathbf{R}_{p, t}^*(\xi_i), \quad (5.52)$$

onde cada duas linhas do vetor  $\mathbf{R}_{p, t}^*(\xi_i)$  é do tipo

$$\mathbf{R}_{p, t}(\xi_i) = \mathbf{A} \sum_{k=1}^N [\omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{H}_{p, t}^p(a, \xi_k)] - \mathbf{H}_{p, t}^p(a, -\xi_i). \quad (5.53)$$

Ainda,  $\mathbf{A}^*$  é uma matriz diagonal de dimensão  $2N \times 2N$  dada por

$$\mathbf{A}^* = \text{diag} \left\{ (1 - \alpha_t), (1 - \alpha_t)^3, \dots, (1 - \alpha_t), (1 - \alpha_t)^3 \right\}, \quad (5.54)$$

$\omega_k$  são os pesos de quadratura,  $\mathbf{A}$  é dada pela Eq. (3.24) e  $f(\xi_k, \xi_i)$  é dada pela Eq. (3.25).

A solução  $\mathbf{H}_{\pm p, t}^h(y)$  dada pela Eq. (5.51) fica resolvida, depois de encontrar os coeficientes  $A_1$  e  $A_j$  com  $j = 2, \dots, 2N$ , através do sistema linear dado pela Eq. (5.52). A seguir, para o Problema de Poiseuille, encontra-se a solução  $\mathbf{H}_{\pm p}(y)$ , substituindo-se as soluções  $\mathbf{H}_{\pm p}^h(y)$  da Eq. (5.51) e  $\mathbf{H}_{\pm p}^p(y)$  da Eq. (5.27) na Eq. (5.32). Analogamente para o Problema *Creep* Térmico, substitui-se as soluções  $\mathbf{H}_{\pm t}^h(y)$  da Eq. (5.51) e  $\mathbf{H}_{\pm t}^p(y)$  da Eq.

(5.28) na Eq. (5.32) para obter-se a solução  $\mathbf{H}_{\pm t}(y)$ . Assim

$$\mathbf{H}_{\pm p,t}(y) = \mathbf{H}_{\pm p,t}^p(y) + A_1 \Phi^1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_+(\nu_j) e^{-(a+y)/\nu_j} + \Phi_-(\nu_j) e^{-(a-y)/\nu_j}]. \quad (5.55)$$

Pode-se agora, encontrar as grandezas físicas de interesse:

► Fluxo de Poiseuille.

• Perfil de velocidade: substitui-se a Eq. (5.55) na Eq. (3.26) obtendo-se

$$u_p(y) = \frac{1}{2}y^2 + \frac{1}{2} + A_1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+y)/\nu_j} + e^{-(a-y)/\nu_j}] N_1(\nu_j). \quad (5.56)$$

• Perfil de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.55) na Eq.(3.27) obtendo-se

$$q_p(y) = \frac{1}{2} + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+y)/\nu_j} + e^{-(a-y)/\nu_j}] N_2(\nu_j). \quad (5.57)$$

• Taxa de fluxo de partículas: substitui-se a Eq. (5.56) na Eq. (3.28) obtendo-se

$$U_p = \frac{1}{2a^2} \left[ a \left( \frac{a^2}{3} + 1 \right) + 2aA_1 + 2 \sum_{j=2}^{2N} A_j \nu_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) N_1(\nu_j) \right]. \quad (5.58)$$

• Taxa de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.57) na Eq. (3.29) obtendo-se

$$Q_p = \frac{1}{2a^2} \left[ a + 2 \sum_{j=2}^{2N} A_j \nu_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) N_2(\nu_j) \right]. \quad (5.59)$$

► Problema *Creep* Térmico.

• Perfil de velocidade: substitui-se a Eq. (5.55) na Eq. (3.26) obtendo-se

$$u_t(y) = A_1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+y)/\nu_j} + e^{-(a-y)/\nu_j}] N_1(\nu_j). \quad (5.60)$$

• Perfil de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.55) na Eq.(3.27) obtendo-se

$$q_t(y) = -\frac{5}{4} + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+y)/\nu_j} + e^{-(a-y)/\nu_j}] N_2(\nu_j). \quad (5.61)$$

- Taxa de fluxo de partículas: substitui-se a Eq. (5.60) na Eq. (3.28) obtendo-se

$$U_t = \frac{1}{2a^2} \left[ 2aA_1 + 2 \sum_{j=2}^{2N} A_j \nu_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) N_1(\nu_j) \right] \quad (5.62)$$

- Taxa de fluxo de calor: substitui-se a (5.61) na Eq. (3.29) obtendo-se

$$Q_t = \frac{1}{2a^2} \left[ -\frac{5a}{2} + 2 \sum_{j=2}^{2N} A_j \nu_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) N_2(\nu_j) \right]. \quad (5.63)$$

No contexto, define-se  $N_1(\nu_j)$  e  $N_2(\nu_j)$  como as componentes do vetor  $\mathbf{N}(\nu_j)$  dado por

$$\mathbf{N}(\nu_j) = [\omega_1 \mathbf{\Lambda}(\xi_1) \quad \omega_2 \mathbf{\Lambda}(\xi_2) \quad \cdots \quad \omega_N \mathbf{\Lambda}(\xi_N)] [\mathbf{\Phi}_+(\nu_j) + \mathbf{\Phi}_-(\nu_j)]. \quad (5.64)$$

Aqui,

$$\mathbf{\Lambda}(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \xi^2 - 1/2 & \sqrt{2} \end{bmatrix}. \quad (5.65)$$

### 5.3.2 Fluxo de Couette

Resolve-se o problema homogêneo Eq. (5.33) associado as condições de contorno de Cercignani-Lampis definidas pela Eq. (5.34) através do método de ordenadas discretas analítico [Barichello e Siewert, 1999]. De acordo com [Barichello et al., 2001], devido o problema ser conservativo, uma das constantes de separação torna-se ilimitada quando  $N$  tende ao infinito, Eq. (5.18), então negligencia-se a maior dessas constantes e reescreve-se a Eq. (5.25) na forma

$$\mathbf{H}_{\pm c}^h(y) = A_1 \mathbf{\Phi}^1 + B_1 \mathbf{\Phi}_{\pm}^2(y) + \sum_{j=2}^{2N} [A_j \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)/\nu_j} + B_j \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)/\nu_j}], \quad (5.66)$$

onde introduz-se as soluções exatas  $\mathbf{\Phi}^1$  de dimensão  $2N \times 1$  definida por  $N$  componentes (vetores) da forma

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.67)$$

e a solução  $\Phi_{\pm}^2(y)$  de dimensão  $2N \times 1$  com  $N$  componentes (vetores)

$$\mathbf{F}_2 \pm (y) = \begin{bmatrix} y \mp \xi_i \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.68)$$

com  $i = 1, \dots, N$ . A solução deste problema satisfaz a condição de anti-simetria definida pela Eq. (3.58), assim, obtém-se  $A_1 = 0$  e  $B_j = -A_j$ ,  $j = 2, 3, \dots, 2N$ . Reescrevendo-se a Eq. (5.66) tem-se

$$\mathbf{H}_{\pm c}^h(y) = B_1 \Phi_{\pm}^2(y) + \sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)/\nu_j} - \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)/\nu_j}]. \quad (5.69)$$

Substitui-se a Eq. (5.69) na condição de contorno de Cercignani-Lampis dada pela Eq. (5.34) obtendo-se o seguinte sistema de equações algébricas

$$B_1 \left\{ \Phi_{-}^2(y) - \left[ \mathbf{A}^* \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \Phi_{+}^2(y) \right] \right\} + \sum_{j=2}^{2N} A_j \left\{ \left[ \Phi_{-}(\nu_j) e^{-2a/\nu_j} - \Phi_{+}(\nu_j) \right] - \left[ \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{A}^* \left[ \Phi_{+}(\nu_j) e^{-2a/\nu_j} - \Phi_{-}(\nu_j) \right] \right] \right\} = \mathbf{R}_c^*(\xi_i), \quad (5.70)$$

onde cada duas linhas do vetor  $\mathbf{R}_c^*(\xi_i)$  é do tipo

$$\mathbf{R}_c(\xi_i) = \mathbf{A} \sum_{k=1}^N [\omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{H}_c^p(a, \xi_k)] - \mathbf{H}_c^p(a, -\xi_i). \quad (5.71)$$

Aqui,  $\mathbf{A}^*$  é uma matriz diagonal de dimensão  $2N \times 2N$  dada pela Eq. (5.54),  $\omega_k$  são os pesos de quadratura,  $\mathbf{A}$  é dada pela Eq. (3.24) e  $f(\xi_k, \xi_i)$  é dada pela Eq. (3.25).

A solução fica completamente definida após resolver o sistema linear, Eqs. (5.70), usando as condições de Cercignani-Lampis. A seguir, encontra-se a solução  $\mathbf{H}_{\pm c}(y)$ , substituindo-se as soluções  $\mathbf{H}_{\pm c}^h(y)$  da Eq. (5.69) e  $\mathbf{H}_{\pm c}^p(y)$  da Eq. (5.30) na Eq. (5.32) para obter-se a solução  $\mathbf{H}_{\pm c}(y)$ . Assim

$$\mathbf{H}_{\pm c}(y) = \mathbf{H}_{\pm c}^p(y) + B_1 \Phi_{\pm}^2(y) + \sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)/\nu_j} - \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)/\nu_j}]. \quad (5.72)$$

Encontra-se, agora, as grandezas físicas de interesse:



- Perfil de velocidade: substitui-se a Eq. (5.72) na Eq. (3.26), obtendo-se

$$u_c(y) = K_0 y + B_1 y + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+y)/\nu_j} - e^{-(a-y)/\nu_j}] N_1(\nu_j). \quad (5.73)$$

- Perfil de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.72) na Eq.(3.27) obtendo-se

$$q_c(y) = \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+y)/\nu_j} - e^{-(a-y)/\nu_j}] N_2(\nu_j) \quad (5.74)$$

- Taxa de fluxo de partículas: substitui-se a Eq. (5.73) na Eq. (3.28) obtendo-se

$$U_c = \frac{1}{2a^2} \left[ \left( K_0 + B_1 \right) \frac{a^2}{2} - \sum_{j=2}^{2N} A_j \nu_j (e^{-a/\nu_j} - 1)^2 N_1(\nu_j) \right] \quad (5.75)$$

- Taxa de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.74) na Eq. (3.29) obtendo-se

$$Q_c = -\frac{1}{2a^2} \left[ \sum_{j=2}^{2N} A_j \nu_j (e^{-a/\nu_j} - 1)^2 N_2(\nu_j) \right]. \quad (5.76)$$

Aqui,  $N_1(\nu_j)$  e  $N_2(\nu_j)$  são as componentes do vetor  $\mathbf{N}(\nu_j)$  dado pela Eq. (5.64).

- Componente do tensor de pressão: substitui-se a Eq (5.72) na Eq. (3.64) obtendo-se

$$P_{xy} = -\left( \frac{k_0}{2} + \frac{B_1}{2} \right). \quad (5.77)$$

### 5.3.3 Problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso

Com relação aos problemas em meio semi-infinito (Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso), semelhantemente aos problemas de Poiseuille e *Creep* Térmico, estes também são conservativos. Assim, reescreve-se a Eq. (5.25) na forma

$$\mathbf{H}_{\pm d,k}^h(y) = A_1 \Phi^1 + B_1 \Phi_{\pm}^2(y) + \sum_{j=2}^{2N} [A_j \Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)/\nu_j} + B_j \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)/\nu_j}], \quad (5.78)$$

onde introduz-se as soluções exatas  $\Phi^1$  de dimensão  $2N \times 1$  definida por  $N$  componentes (vetores) da forma

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.79)$$

e a solução  $\Phi_{\pm}^2(y)$  de dimensão  $2N \times 1$  com  $N$  componentes (vetores)

$$\mathbf{F}_2 \pm (y) = \begin{bmatrix} y \mp \xi_i \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.80)$$

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

Nestes problemas, deseja-se que suas soluções homogêneas sejam limitadas. Assim, toma-se  $B_j = 0$ ,  $j = 1, \dots, 2N$  na Eq. (5.78) e escreve-se a solução em ordenadas discretas na forma

$$\mathbf{H}_{\pm d, k}^h(y) = A_1 \Phi^1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j \Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-y/\nu_j}. \quad (5.81)$$

Substitui-se a Eq. (5.81) na condição de contorno dada pela Eq. (5.35) para obter-se o seguinte sistema de equações algébricas

$$A_1 \left\{ \Phi^1 - \left[ \mathbf{A}^* \Phi^1 \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \right] \right\} + \sum_{j=2}^{2N} A_j \left\{ \Phi_+(\nu_j) - \left[ \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{A}^* \Phi_-(\nu_j) \right] \right\} = \mathbf{R}_{d, k}^*(\xi_i), \quad (5.82)$$

onde cada duas linhas do vetor  $\mathbf{R}_{d, k}^*(\xi_i)$  é do tipo

$$\mathbf{R}_{d, k}(\xi_i) = \mathbf{A}^* \sum_{k=1}^N [\omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{H}_{d, k}^p(0, \xi_k)] - \mathbf{H}_{d, k}^p(0, -\xi_i). \quad (5.83)$$

Ainda,  $\mathbf{A}^*$  é uma matriz diagonal de dimensão  $2N \times 2N$  dada pela Eq. (5.54),  $\omega_k$  são os pesos de quadratura,  $\mathbf{A}$  é dada pela Eq. (3.24) e  $f(\xi_k, \xi_i)$  é dada pela Eq. (3.25). Após resolvido o sistema, ou seja, os coeficientes  $A_1$  e  $A_j$  com  $j = 2, \dots, 2N$  são conhecidos, tem-se,

então, a solução geral dada pela Eq. (5.32)

$$\mathbf{H}_{\pm d,k}(y) = \mathbf{H}_{\pm d,k}^p(y) + A_1 \Phi^1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j \Phi_+(\nu_j) e^{-y/\nu_j}. \quad (5.84)$$

Neste momento, as grandezas físicas de interesse podem ser determinadas:

► Problema de Deslizamento Térmico.

- Perfil de velocidade: substitui-se a Eq. (5.84) na Eq. (3.26) obtendo-se

$$u_d(y) = A_1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-y/\nu_j} N_1(\nu_j). \quad (5.85)$$

- Perfil de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.84) na Eq. (3.27) obtendo-se

$$q_d(y) = -\frac{5}{4} + \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-y/\nu_j} N_2(\nu_j). \quad (5.86)$$

- Coeficiente de deslizamento térmico: substitui-se a Eq. (5.85) na Eq. (3.72) obtendo-se

$$A_t = A_1. \quad (5.87)$$

Aqui  $N_1(\nu_j)$  e  $N_2(\nu_j)$  são as componentes do vetor  $N(\nu_j)$  definido pela Eq. (5.64).

► Problema de Deslizamento Viscoso.

- Perfil de velocidade: substitui-se a Eq. (5.84) na Eq. (3.26) obtendo-se

$$u_k(y) = A_1 + y + \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-y/\nu_j} N_1(\nu_j). \quad (5.88)$$

- Perfil de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.84) na Eq. (3.27) obtendo-se

$$q_k(y) = \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-y/\nu_j} N_2(\nu_j). \quad (5.89)$$

Aqui,  $N_1(\nu_j)$  e  $N_2(\nu_j)$  são as componentes do vetor  $N(\nu_j)$  definido pela Eq. (5.64).

Neste momento, faz-se

$$u_{asy}(y) = y + A_1 \quad (5.90)$$

e define-se o coeficiente de deslizamento viscoso como

$$u_{asy}(0) = A_p \frac{d}{dy} u_{asy} \Big|_{y=0} \quad (5.91)$$

obtendo-se

$$A_p = A_1. \quad (5.92)$$

## 5.4 Modelo S - Cercignani-Lampis

### 5.4.1 Fluxo de Couette

De forma semelhante a subseção 5.3.2, resolve-se o problema homogêneo Eq. (5.41) associado as condições de contorno de Cercignani-Lampis definidas pela Eq. (5.44) através do método de ordenadas discretas analítico [Barichello e Siewert, 1999]. De acordo com [Barichello et al., 2001], devido o problema ser conservativo, uma das constantes de separação torna-se ilimitada quando  $N$  tende ao infinito, então negligencia-se a maior dessas constantes e reescreve-se a Eq. (5.25) na forma

$$\mathbf{G}_{\pm c}^h(y) = A_1 \mathbf{\Phi}_*^1 + B_1 \mathbf{\Phi}_{*\pm}^2 + \sum_{j=2}^{2N} [A_j \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)\varepsilon/\nu_j} + B_j \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)\varepsilon/\nu_j}], \quad (5.93)$$

onde introduz-se as soluções exatas  $\mathbf{\Phi}_*^1$ , de dimensão  $2N \times 1$ , com  $N$  componentes definidas por

$$\mathbf{F}_1^* = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.94)$$

e a solução  $\mathbf{\Phi}_{*\pm}^2(y)$ , de dimensão  $2N \times 1$ , com  $N$  componentes (vetores) da forma

$$\mathbf{F}_2^* \pm(y) = \begin{bmatrix} 0 \\ y \mp \xi_i/\varepsilon \end{bmatrix}. \quad (5.95)$$

com  $i = 1, \dots, N$ . A solução deste problema satisfaz a condição de anti-simetria definida pela Eq. (3.60), assim, obtém-se  $A_1 = 0$  e  $B_j = -A_j$ ,  $j = 2, 3, \dots, 2N$  e reescreve-se a Eq. (5.93) como

$$\mathbf{G}_{\pm c}^h(y) = B_1 \Phi_{*\pm}^2(y) + \sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)\varepsilon/\nu_j} - \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)\varepsilon/\nu_j}]. \quad (5.96)$$

Substitui-se a Eq. (5.96) na condição de contorno de Cercignani-Lampis dada pela Eq. (5.44) para obter-se o seguinte sistema de equações algébricas

$$B_1 \left\{ \Phi_{*-}^2 - \left[ \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{T}^*(\xi_k, \xi_i) \Phi_{*+}^2 \right] \right\} + \sum_{j=2}^{2N} A_j \left\{ \left[ \Phi_{-}(\nu_j) e^{-(2a)\varepsilon/\nu_j} - \Phi_{+}(\nu_j) \right] - \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{T}^*(\xi_k, \xi_i) \left[ \Phi_{+}(\nu_j) e^{-(2a)\varepsilon/\nu_j} - \Phi_{-}(\nu_j) \right] \right\} = \mathbf{R}_c^*(\xi_i), \quad (5.97)$$

onde cada duas linhas do vetor  $\mathbf{R}_c^*(\xi_i)$  é do tipo

$$\mathbf{R}_c(\xi_i) = \sum_{k=1}^N [\omega_k \mathbf{T}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}_{d,k}^p(a, \xi_k)] - \mathbf{G}_{d,k}^p(a, -\xi_i) \quad (5.98)$$

e  $\mathbf{T}^*$  é uma matriz de dimensão  $2N \times 2N$ , na qual a cada  $2 \times 2N$  linhas é dada por

$$\mathbf{S}_i = [\mathbf{T}(\xi_1, \xi_i) \quad \mathbf{T}(\xi_2, \xi_i) \quad \dots \quad \mathbf{T}(\xi_N, \xi_i)] \quad (5.99)$$

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

$$\mathbf{T}(\xi_k, \xi_i) = \mathbf{Q}^{*-1}(\xi_i) \mathbf{A} \mathbf{Q}^*(\xi_k) f(\xi_k, \xi_i). \quad (5.100)$$

Ainda,  $\mathbf{Q}^*(\xi)$  é dada pela Eq. (3.18),  $\mathbf{A}$  é dada pela Eq. (3.24) e  $f(\xi_k, \xi_i)$  é dada pela Eq. (3.25).

As grandezas físicas de interesse são determinadas como segue:

- Perfil de velocidade: substitui-se a Eq. (5.96) na Eq. (3.40) obtendo-se

$$u_c(y) = K_0 y + B_1 y + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+y)\varepsilon/\nu_j} - e^{-(a-y)\varepsilon/\nu_j}] N_2^*(\nu_j). \quad (5.101)$$

- Perfil de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.96) na Eq. (3.41) obtendo-se

$$q_c(y) = (15/2)^{1/2} \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+y)\varepsilon/\nu_j} - e^{-(a-y)\varepsilon/\nu_j}] N_1^*(\nu_j). \quad (5.102)$$

- Taxa de fluxo de partículas: substitui-se a Eq. (5.101) na Eq. (3.28) obtendo-se

$$U_c = \frac{1}{2a^2} \left[ (K_0 + B_1) \frac{a^2}{2} - \sum_{j=2}^{2N} A_j (\nu_j/\varepsilon) (e^{-a\varepsilon/\nu_j} - 1)^2 N_2^*(\nu_j) \right]. \quad (5.103)$$

- Taxa de calor: substitui-se a Eq. (5.102) na Eq. (3.29) obtendo-se

$$Q_c = -\frac{(15/2)^{1/2}}{2a^2} \left[ \sum_{j=2}^{2N} A_j (\nu_j/\varepsilon) (e^{-a\varepsilon/\nu_j} - 1)^2 N_1^*(\nu_j) \right], \quad (5.104)$$

Tem-se que  $N_1^*(\nu_j)$  e  $N_2^*(\nu_j)$  como as componentes do vetor  $\mathbf{N}^*(\nu_j)$  dado pela Eq. (5.118).

- Componente do tensor de pressão: substitui-se a Eq. (5.96) na Eq. (3.65) obtendo-se

$$P_{xy} = -\left( \frac{k_0}{2} + \frac{B_1}{2\varepsilon} \right). \quad (5.105)$$

#### 5.4.2 Problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso

De forma semelhante a subseção 5.3.3, resolve-se o problema homogêneo definido pela Eq. (5.41) associado as condições de contorno definidas pela Eq. (5.42) através do método de ordenadas discretas analítico [Barichello e Siewert, 1999].

De acordo com Siewert e Valougeorgis, [Siewert e Valougeorgis, 2001], devido os problemas serem conservativos, uma das constantes de separação torna-se ilimitada quando  $N$  tende ao infinito, então negligencia-se a maior dessas constantes e reescreve-se a Eq. (5.25) na forma

$$\mathbf{G}_{\pm d,k}^h(y) = A_1 \mathbf{\Phi}_*^1 + B_1 \mathbf{\Phi}_{*\pm}^2(y) + \sum_{j=2}^{2N} [A_j \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)\varepsilon/\nu_j} + B_j \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)\varepsilon/\nu_j}], \quad (5.106)$$

onde introduz-se as soluções exatas  $\Phi_*^1$ , de dimensão  $2N \times 1$ , com  $N$  componentes definidas por

$$\mathbf{F}_1^* = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.107)$$

e a solução  $\Phi_{*\pm}^2(y)$ , de dimensão  $2N \times 1$ , com  $N$  componentes (vetores) da forma

$$\mathbf{F}_2^* \pm (y) = \begin{bmatrix} 0 \\ y \mp \xi_i/\varepsilon \end{bmatrix}. \quad (5.108)$$

com  $i = 1, \dots, N$ . Para os problemas em meio semi-infinito, deseja-se que a solução homogênea seja limitada. Com isto, toma-se  $B_j = 0$ ,  $j = 1, \dots, 2N$  na Eq. (5.106) e reescreve-se a solução em ordenadas discretas como

$$\mathbf{G}_{\pm d,k}^h(y) = A_1 \Phi_*^1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j \Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-y\varepsilon/\nu_j}. \quad (5.109)$$

Substitui-se a Eq. (5.109) na condição de contorno dada pela Eq. (5.42) obtendo-se o seguinte sistema de equações lineares

$$A_1 \left\{ \Phi_*^1 - \left[ \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{T}^*(\xi_k, \xi_i) \Phi_*^1 \right] \right\} + \sum_{j=2}^{2N} A_j \left\{ \Phi_+(\nu_j) - \left[ \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{T}^*(\xi_k, \xi_i) \Phi_-(\nu_j) \right] \right\} = \mathbf{R}_{d,k}^*(\xi_i), \quad (5.110)$$

onde cada duas linhas do vetor  $\mathbf{R}_{d,k}^*(\xi_i)$  é do tipo

$$\mathbf{R}_{d,k}(\xi_i) = \sum_{k=1}^N [\omega_k \mathbf{T}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}_{d,k}^p(0, \xi_k)] - \mathbf{G}_{d,k}^p(0, -\xi_i) \quad (5.111)$$

e  $\mathbf{T}^*$  é uma matriz de dimensão  $2N \times 2N$ , na qual a cada  $2 \times 2N$  linhas é dada por

$$\mathbf{S}_i = [\mathbf{T}(\xi_1, \xi_i) \quad \mathbf{T}(\xi_2, \xi_i) \quad \cdots \quad \mathbf{T}(\xi_N, \xi_i)] \quad (5.112)$$

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

Aqui,

$$\mathbf{T}(\xi_k, \xi_i) = \mathbf{Q}^{*-1}(\xi_i) \mathbf{A} \mathbf{Q}^*(\xi_k) f(\xi_k, \xi_i), \quad (5.113)$$

ainda,  $\mathbf{Q}^*(\xi)$  é dada pela Eq. (3.18),  $\mathbf{A}$  é dada pela Eq. (3.24) e  $f(\xi_k, \xi_i)$  é dada pela Eq. (3.25).

Após encontrar os coeficientes  $A_1$  e  $A_j$  com  $j = 2, \dots, 2N$ , tem-se a solução geral dada pela Eq. (5.40) na forma

$$\mathbf{G}_{\pm d, k}(y) = \mathbf{G}_{\pm d, k}^p(y) + A_1 \mathbf{\Phi}_*^1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j \mathbf{\Phi}_+(\nu_j) e^{-y\varepsilon/\nu_j}. \quad (5.114)$$

A partir de agora, determina-se as grandezas físicas de interesse:

► Problema de Deslizamento Térmico.

• Perfil de velocidade: substitui-se a Eq. (5.114) na Eq. (3.40) obtendo-se

$$u_d(y) = A_1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-y\varepsilon/\nu_j} N_2^*(\nu_j). \quad (5.115)$$

• Perfil de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.114) na Eq. (3.41) obtendo-se

$$q_d(y) = -\frac{3}{8\varepsilon} + \sqrt{\frac{15}{2}} \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-y\varepsilon/\nu_j} N_1^*(\nu_j) \quad (5.116)$$

• Coeficiente de deslizamento térmico: substitui-se a Eq. (5.115) na Eq. (3.72) obtendo-se

$$A_t = A_1. \quad (5.117)$$

Aqui,  $N_1^*(\nu_j)$  e  $N_2^*(\nu_j)$  são as componentes do vetor  $\mathbf{N}^*(\nu_j)$  dado por

$$\mathbf{N}^*(\nu_j) = [\omega_1 \mathbf{\Psi}(\xi_1) \quad \omega_2 \mathbf{\Psi}(\xi_2) \quad \cdots \quad \omega_N \mathbf{\Psi}(\xi_N)] [\mathbf{\Phi}_+(\nu_j) + \mathbf{\Phi}_-(\nu_j)]. \quad (5.118)$$

► Problema de Deslizamento Viscoso.

• Perfil de velocidade: substitui-se a Eq. (5.114) na Eq. (3.40) obtendo-se

$$u_k(y) = A_1 + y + \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-y\varepsilon/\nu_j} N_2^*(\nu_j). \quad (5.119)$$



- Perfil de fluxo de calor: substitui-se a Eq. (5.114) na Eq. (3.41) obtendo-se

$$q_k(y) = \sqrt{\frac{15}{2}} \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-y/\nu_j} N_1^*(\nu_j). \quad (5.120)$$

Aqui,  $N_1^*(\nu_j)$  e  $N_2^*(\nu_j)$  são as componentes do vetor  $\mathbf{N}^*(\nu_j)$  definido pela Eq. (5.118). Neste momento, faz-se

$$u_{asy}(y) = y + A_1 \quad (5.121)$$

e define-se o coeficiente de deslizamento viscoso como

$$u_{asy}(0) = A_p \left. \frac{d}{dy} u_{asy} \right|_{y=0} \quad (5.122)$$

obtendo-se

$$A_p = A_1. \quad (5.123)$$

## 5.5 Modelo BGK - Difuso-Especular

### 5.5.1 Fluxo de Couette

Semelhante a subseção 5.3.2, resolve-se o problema homogêneo Eq. (5.33) associado as condições de contorno de Maxwell definidas pela Eq. (5.38) através do método de ordenadas discretas analítico [Barichello e Siewert, 1999]. A solução deste problema é dada pela Eq. (5.69).

Trabalhando-se com as condições de contorno de Maxwell, substitui-se a Eq. (5.69) na condição de contorno de Maxwell dada pela Eq. (5.38) para obter-se o seguinte sistema

de equações algébricas

$$B_1 \left\{ \Phi_-^2(y) - (1 - \alpha) \Phi_+^2(y) \right\} + \sum_{j=2}^{2N} A_j \left\{ \Phi_+(\nu_j) \left[ (\alpha - 1) e^{-2a/\nu_j} - 1 \right] + \Phi_-(\nu_j) \left[ 1 - \alpha + e^{-2a/\nu_j} \right] \right\} = \mathbf{R}_c^*(\xi_i). \quad (5.124)$$

Aqui, cada duas linhas do vetor  $\mathbf{R}_c^*(\xi_i)$  é do tipo

$$\mathbf{R}_c(\xi_i) = (1 - \alpha) \mathbf{H}_c^p(a, \xi_i) - \mathbf{H}_c^p(a, -\xi_i). \quad (5.125)$$

A solução fica completamente definida após resolver o sistema linear, Eq. (5.124), usando as condições de Maxwell. A seguir, encontra-se a solução  $\mathbf{H}_{\pm c}(y)$ , substituindo-se as soluções  $\mathbf{H}_{\pm c}^h(y)$  da Eq. (5.69) e  $\mathbf{H}_{\pm c}^p(y)$  da Eq. (5.30) na Eq. (5.32) para obter-se a solução  $\mathbf{H}_{\pm c}(y)$ . Assim

$$\mathbf{H}_{\pm c}(y) = \mathbf{H}_{\pm c}^p(y) + B_1 \Phi_{\pm}^2(y) + \sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)/\nu_j} - \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)/\nu_j}]. \quad (5.126)$$

As grandezas físicas são encontradas através das Eqs. (5.73), (5.74), (5.75), (5.76) e (5.77).

## 5.6 Modelo S - Difuso-Especular

### 5.6.1 Fluxo de Couette

De forma semelhante a subseção 5.4.1, resolve-se o problema homogêneo Eq. (5.41) associado as condições de contorno de Maxwell definidas pela Eq. (5.46) através do método de ordenadas discretas analítico [Barichello e Siewert, 1999]. A solução para este problema é dada pela Eq. (5.96).

Usando-se as condições de contorno de Maxwell, substitui-se a Eq. (5.96) na condição de contorno de Maxwell dada pela Eq. (5.46) obtendo-se o seguinte sistema de equações

algébricas

$$B_1 \left\{ \Phi_{*-}^2(y) - (1 - \alpha) \Phi_{*+}^2(y) \right\} + \sum_{j=2}^{2N} A_j \left\{ \Phi_+(\nu_j) \left[ (\alpha - 1) e^{-2a\varepsilon/\nu_j} - 1 \right] + \Phi_-(\nu_j) \left[ 1 - \alpha + e^{-2a\varepsilon/\nu_j} \right] \right\} = \mathbf{R}_c^*(\xi_i). \quad (5.127)$$

Aqui, cada duas linhas do vetor  $\mathbf{R}_c^*(\xi_i)$  é do tipo

$$\mathbf{R}_c(\xi_i) = (1 - \alpha) \mathbf{G}_c^p(a, \xi_i) - \mathbf{G}_c^p(a, -\xi_i). \quad (5.128)$$

Após resolvido o sistema linear algébrico, Eq. (5.127), encontra-se a solução  $\mathbf{G}_{\pm_c}(y)$ , substituindo-se a solução  $\mathbf{G}_{\pm_c}^h(y)$  da Eq. (5.96) e  $\mathbf{G}_{\pm_c}^p(y)$  da Eq. (5.31) na Eq. (5.40) para obter-se a solução  $\mathbf{G}_{\pm_c}(y)$ . Assim

$$\mathbf{G}_{\pm_c}(y) = \mathbf{G}_{\pm_c}^p(y) + B_1 \Phi_{\pm}^2(y) + \sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y)\varepsilon/\nu_j} - \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-y)\varepsilon/\nu_j}]. \quad (5.129)$$

As grandezas físicas são definidas pelas Eqs. (5.101), (5.102), (5.103), (5.104) e (5.105).

## 5.7 Problema de Salto de Temperatura

### 5.7.1 Problema de Salto de Temperatura - Modelo BGK - Cercignani-Lampis

Para o modelo BGK com condições de contorno de Cercignani-Lampis, inicia-se, multiplicando a Eq. (3.101) por

$$\mathbf{Q}_*^{-1}(\xi) = \begin{bmatrix} 0 & (2/3)^{1/2} \\ 1 & -(\xi^2 - 1/2) \end{bmatrix}, \quad (5.130)$$

obtendo-se assim, o chamado problema  $G$  [Barichello e Siewert, 2000]

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{G}(y, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(y, \xi) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi') \mathbf{G}(y, \xi') d\xi', \quad (5.131)$$

onde

$$\mathbf{G}(y, \xi) = \mathbf{Q}_*^{-1}(\xi) \mathbf{H}(y, \xi), \quad (5.132)$$

$$\mathbf{\Psi}(\xi) = \pi^{-1/2} \mathbf{Q}_*^T(\xi) \mathbf{Q}_*(\xi) e^{-\xi^2} \quad (5.133)$$

e  $\mathbf{Q}_*(\xi)$  dado pela Eq. (3.103). Para o modelo BGK tem-se  $\varepsilon = \varepsilon_t = \varepsilon_p = 1$ , assim, reescreve-se a Eq. (5.131) como

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{G}(y, \xi) + \mathbf{G}(y, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Psi}(\xi') \mathbf{G}(y, \xi') d\xi'. \quad (5.134)$$

Observa-se que a matriz característica, como definida pela Eq. (5.133), é simétrica. A solução geral em ordenadas discretas é encontrada de forma semelhante que na Eq. (5.25). Assim, tem-se

$$\mathbf{G}_{\pm}(y) = \sum_{j=1}^{2N} [A_j \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} + B_j \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_j) e^{y/\nu_j}], \quad (5.135)$$

onde as constantes arbitrárias  $\{A_j\}$  e  $\{B_j\}$  são determinadas a partir das condições do problema. Após obtido a Eq. (5.135), volta-se e usa-se a Eq. (5.132) para escrever a primeira versão da solução em ordenadas discretas para  $\mathbf{H}_{\pm}(y)$

$$\mathbf{H}_{\pm}(y) = \widehat{\mathbf{Q}}(\xi) \sum_{j=1}^{2N} [A_j \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} + B_j \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_j) e^{y/\nu_j}], \quad (5.136)$$

onde  $\widehat{\mathbf{Q}}(\xi)$  é uma matriz diagonal de dimensão  $2N \times 2N$  definida como

$$\widehat{\mathbf{Q}}(\xi) = \text{diag}\{\mathbf{Q}_*(\xi_1), \mathbf{Q}_*(\xi_2), \dots, \mathbf{Q}_*(\xi_N)\} \quad (5.137)$$

e  $\mathbf{Q}_*(\xi)$  é a matriz de dimensão  $2 \times 2$  dada pela Eq. (3.103).

Neste ponto, como o problema é conservativo, acrescenta-se um número de soluções exatas. Uma vez que dois autovalores tendem a zero quando  $N$  tende para o infinito, introduz-se assim, quatro soluções linearmente independentes, ao seja, ignora-se a contribuição na Eq. (5.136) de dois autovalores que tendem a zero, em lugar disso, inclui-se

quatro soluções exatas e reescreve-se a Eq. (5.136) na forma

$$\mathbf{H}_{\pm}(y) = \mathbf{H}_{*} \pm (y) + \widehat{\mathbf{Q}}(\xi) \sum_{j=3}^{2N} [A_j \Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} + B_j \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{y/\nu_j}] \quad (5.138)$$

onde

$$\mathbf{H}_{*} \pm (y) = [A_1 + B_1(y \mp \xi)] \Phi_1(\pm \xi) + [A_2 + B_2(y \mp \xi)] \Phi_2. \quad (5.139)$$

Tem-se para as soluções exatas:

$\Phi_{1\pm}$  de dimensão  $2N \times 1$  definida por  $N$  componentes da forma

$$\mathbf{F}_{1\pm} = (2/3)^{1/2} \begin{bmatrix} (\pm \xi_i)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (5.140)$$

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

$\Phi_2$  de dimensão  $2N \times 1$  definida por  $N$  componentes da forma

$$\mathbf{F}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (5.141)$$

$\Phi_3 \pm (y)$  de dimensão  $2N \times 1$  definida por  $N$  componentes da forma

$$\mathbf{F}_3 \pm (y) = (2/3)^{1/2} (y \mp \xi_i) \begin{bmatrix} (\pm \xi_i)^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} = (y \mp \xi) \mathbf{F}_{1\pm} \quad (5.142)$$

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

$\Phi_4 \pm (y)$  de dimensão  $2N \times 1$  definida por  $N$  componentes da forma

$$\mathbf{F}_4 \pm (y) = (y \mp \xi_i) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = (y \mp \xi) \mathbf{F}_2 \quad (5.143)$$

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

Observa-se, que ainda tem-se  $4N$  constantes arbitárias para determinar a partir das condições deste problema, Eqs. (3.87) e (3.111). Baseado no comportamento esperado da solução no infinito da Eq. (5.138), deve-se considerar  $B_j = 0$  para  $j = 3, \dots, 2N$  e

$$\mathbf{H}(y, \xi) \sim \mathbf{H}_{*}(y, \xi) \quad (5.144)$$

quando  $y \rightarrow \infty$  para valores contínuos de  $\xi$ . Para que a solução fique completamente determinada, deve-se encontrar as constantes arbitrárias. Neste sentido, nota-se que embora a Eq. (5.138) é definida somente para pontos de quadratura  $\xi_i$ , a primeira parte da solução, ou seja, a Eq. (5.139) é definida para todos os valores de  $\xi$ , assim, integra-se, quando necessário,  $\mathbf{H}_*(y)$  analiticamente e a segunda parte da Eq. (5.138) usa-se, para integrar, o esquema de quadraturas.

Então, para encontrar as constantes arbitrárias  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$  e  $B_2$ , primeiramente, substitui-se a Eq. (5.138) na condição de Welander dada pela Eq. (3.87) obtendo-se

$$B_1 = K_1(3/2)^{1/2}. \quad (5.145)$$

Por outro lado, como  $F_2$  satisfaz a condição de contorno, assim, considera-se a condição de normalização arbitrária segundo Kriese, Chang e Siewert [Kriese et al., 1974] e Onishi [Onishi, 1997]

$$\lim_{y \rightarrow \infty} [N(y) + T(y)] = 0 \quad (5.146)$$

e conclui-se que

$$A_2 = -(2/3)^{1/2}A_1 \quad (5.147)$$

e

$$B_2 = -(2/3)^{1/2}B_1. \quad (5.148)$$

Assim, reescreve-se a solução final da Eq. (5.138) como

$$\mathbf{H}_\pm(y) = [(2/3)^{1/2}A_1 + K_1(y \mp \xi_i)] \tilde{\Phi}_\pm + \hat{\mathbf{Q}}(\pm\xi) \sum_{j=2}^{2N-1} [A_j \Phi_\pm(\nu_j) e^{-y/\nu_j}] \quad (5.149)$$

onde,  $\tilde{\Phi}_\pm$  é uma matriz de dimensão  $2N \times 1$  com  $N$  componentes (vetores)

$$\mathbf{J}_{1\pm} = (2/3)^{1/2} \begin{bmatrix} (\pm\xi)^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.150)$$

para  $i = 1, \dots, N$  e  $\hat{\mathbf{Q}}(\xi)$  definido pela Eq. (5.137).

Para completar a solução do problema, substitui-se a solução dada pela Eq. (5.149) na versão em ordenadas discreta da condição de contorno da Eq. (3.111) que é dada por

$$\mathbf{H}(0, \xi_i) = \mathbf{A} \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{H}(0, -\xi_k) f(\xi_k, \xi_i), \quad (5.151)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Assim, obtém-se o sistema de equações algébricas lineares

$$A_1 \left\{ \left[ (2/3)^{1/2} \tilde{\Phi}(\xi_i) \right] - \left[ (2/3)^{1/2} \mathbf{A}_* \sum_{k=1}^N \omega_k \tilde{\Phi}(\xi_k) f(\xi_k, \xi_i) \right] \right\} + \sum_{j=2}^{2N-1} A_j \left\{ \left[ \hat{\mathbf{Q}}(\xi_i) \Phi_+(\nu_j) \right] - \left[ \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{A}_* \hat{\mathbf{Q}}(\xi_k) \Phi_-(\nu_j) \right] \right\} = \mathbf{R}(\xi_i), \quad (5.152)$$

onde

$$\mathbf{R}(\xi_i) = K_1 \left[ \xi_i \tilde{\Phi}(\xi_i) + \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{A}_* \tilde{\Phi}(\xi_k) \xi_k \right], \quad (5.153)$$

$\mathbf{A}_*$  é uma matriz diagonal de dimensão  $2N \times 2N$  definida por

$$\mathbf{A}_* = \text{diag} \left\{ 1, (1 - \alpha_t)^2, \dots, 1, (1 - \alpha_t)^2 \right\}, \quad (5.154)$$

$\hat{\mathbf{Q}}(\xi_i)$  é definida pela Eq. (5.137),  $\tilde{\Phi}_\pm$  é uma matriz de dimensão  $2N \times 1$  com  $N$  componentes (vetores) definidas pela Eq. (5.150) e  $f(\xi_k, \xi_i)$  é dada pela Eq. (3.25).

A solução  $\mathbf{H}_\pm(y)$  dada pela Eq. (5.149) fica resolvida, após encontrar os coeficientes  $A_1$  e  $\{A_j\}$ , para  $j = 2, \dots, 2N - 1$ , através do sistema linear Eq. (5.152). Este sistema, Eq. (5.152), é composto por  $2N$  equações lineares com  $2N - 1$  incógnitas  $A_1$  e  $\{A_j\}$ , para  $j = 2, \dots, 2N - 1$  e encontra-se sua solução através dos mínimos quadrados.

Então, tendo definido a solução  $\mathbf{H}_\pm(y)$ , pode-se encontrar as quantidades de interesse em ordenadas discretas.

- Desvio de temperatura: substitui-se a Eq. (5.149) na Eq. (3.114) obtendo-se

$$T(y) = K_1 y + (2/3)^{1/2} A_1 + 2/3 \sum_{j=2}^{2N-1} A_j (e^{-y/\nu_j}) M_1(\nu_j). \quad (5.155)$$

- Desvio de densidade: substitui-se a Eq. (5.149) na Eq. (3.115) obtendo-se

$$N(y) = -K_1 y - (2/3)^{1/2} A_1 + \sum_{j=2}^{2N-1} A_j (e^{-y/\nu_j}) M_2(\nu_j), \quad (5.156)$$

Tem-se que  $M_1(\nu_j)$  e  $M_2(\nu_j)$  são as componentes do vetor  $\mathbf{M}(\nu_j)$  dado por

$$\mathbf{M}(\nu_j) = [\omega_1 \widehat{\mathbf{\Lambda}}(\xi_1) \quad \omega_2 \widehat{\mathbf{\Lambda}}(\xi_2) \quad \cdots \quad \omega_N \widehat{\mathbf{\Lambda}}(\xi_N)] [\mathbf{\Phi}_+(\nu_j) + \mathbf{\Phi}_-(\nu_j)]. \quad (5.157)$$

Aqui,

$$\widehat{\mathbf{\Lambda}}(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \begin{bmatrix} (2/3)^{1/2}(\xi^4 - \xi^2 + 5/4) & (\xi^2 - 1/2) \\ (2/3)^{1/2}(\xi^2 - 1/2) & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.158)$$

Ainda, chamando

$$T^*(y) = K_1 y + (2/3)^{1/2} A_1, \quad (5.159)$$

define-se o coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$  como

$$T^*(0) = \zeta \frac{d}{dy} T^*(y) \Big|_{y=0}, \quad (5.160)$$

ou seja,

$$\zeta = (2/3)^{1/2} A_1. \quad (5.161)$$

Sem perder a generalidade, escolhe-se  $K_1 = 1$ . Assim, tem-se:

- Desvio de temperatura.

$$T(y) = y + (2/3)^{1/2} A_1 + 2/3 \sum_{j=2}^{2N-1} A_j (e^{-y/\nu_j}) M_1(\nu_j). \quad (5.162)$$

- Desvio de densidade.

$$N(y) = -y - (2/3)^{1/2} A_1 + \sum_{j=2}^{2N-1} A_j (e^{-y/\nu_j}) M_2(\nu_j). \quad (5.163)$$

- Coeficiente de salto de temperatura: a expressão é dada pela Eq. (5.161).

Tem-se que  $M_1(\nu_j)$ ,  $M_2(\nu_j)$  são as componentes do vetor definido pela Eq. (5.157).



### 5.7.2 Problema de Salto de Temperatura - Modelo S - Cercignani-Lampis

Para o modelo S, escreve-se a Eq. (3.102) em ordenadas discretas como

$$\pm \xi_i \frac{d}{dy} \mathbf{H}(y, \pm \xi_i) + \varepsilon \mathbf{H}(y, \pm \xi_i) = \varepsilon \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k^2} [ \mathbf{K}(\xi_k, \xi_i) \mathbf{H}(y, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \xi_i) \mathbf{H}(y, -\xi_k) ] \quad (5.164)$$

com  $i = 1, 2, \dots, N$ . Nas Eqs. (5.164), usa-se o esquema de quadraturas do tipo *half-range* com os  $N$  pontos de quadratura  $\{\xi_k\}$  e os  $N$  pesos  $\{\omega_k\}$  definidos no intervalo  $[0, \infty)$  para avaliar a integral neste intervalo. Para o modelo S com condições de contorno de Cercignani-Lampis, procura-se soluções elementares para a Eq. (3.102) na forma

$$\mathbf{H}(y, \xi) = \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) e^{-y\varepsilon/\nu} \quad (5.165)$$

onde a constante de separação  $\nu$  e as funções  $\mathbf{\Phi}(\nu, \xi)$  que são as componentes independentes da variável espacial das soluções elementares serão determinadas. Substituindo-se as Eqs. (5.165) nas Eqs. (3.102) encontra-se

$$\varepsilon(\nu - \xi) \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \varepsilon \nu \int_0^\infty \psi(\xi') [ \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{\Phi}(\nu, \xi') + \mathbf{K}(-\xi', \xi) \mathbf{\Phi}(\nu, -\xi') ] d\xi' \quad (5.166)$$

e

$$\varepsilon(\nu + \xi) \mathbf{\Phi}(\nu, -\xi) = \varepsilon \nu \int_0^\infty \psi(\xi') [ \mathbf{K}(\xi', -\xi) \mathbf{\Phi}(\nu, \xi') + \mathbf{K}(-\xi', -\xi) \mathbf{\Phi}(\nu, -\xi') ] d\xi'. \quad (5.167)$$

Aqui,

$$\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \quad (5.168)$$

e  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  é dado pela Eq. (3.105). Observa-se que como

$$\mathbf{K}(\xi', -\xi) = \mathbf{K}(-\xi', \xi) \quad (5.169)$$

tem-se

$$\mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \mathbf{\Phi}(-\nu, -\xi) \quad (5.170)$$

Somando-se e subtraindo-se as Eqs. (5.166) e (5.167) uma da outra, obtém-se

$$(1/\xi^2) \left[ \mathbf{V}(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi') \mathbf{P}(\xi', \xi) \mathbf{V}(\nu, \xi') d\xi' \right] = \lambda \mathbf{V}(\nu, \xi) \quad (5.171)$$

e

$$\mathbf{U}(\nu, \xi) = (\nu/\xi) \left[ \mathbf{V}(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi') [\mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{V}(\nu, \xi') - \mathbf{K}(-\xi', \xi) \mathbf{V}(\nu, \xi')] d\xi' \right] \quad (5.172)$$

onde

$$\mathbf{U}(\nu, \xi) = \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) + \mathbf{\Phi}(\nu, -\xi), \quad (5.173)$$

$$\mathbf{V}(\nu, \xi) = \mathbf{\Phi}(\nu, \xi) - \mathbf{\Phi}(\nu, -\xi), \quad (5.174)$$

$$\lambda = 1/\nu^2 \quad (5.175)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\xi', \xi) = (\xi/\xi') & \left[ [\mathbf{K}(\xi', \xi) + \mathbf{K}(-\xi', \xi)] + [\mathbf{K}(\xi', \xi) - \mathbf{K}(-\xi', \xi)] \right] - \\ & \int_0^\infty \psi(\xi'') (\xi/\xi'') [\mathbf{K}(\xi', \xi'') - \mathbf{K}(-\xi', \xi'')] [\mathbf{K}(\xi'', \xi) + \mathbf{K}(-\xi'', \xi)] d\xi'' \end{aligned} \quad (5.176)$$

Introduz-se um esquema de quadratura do tipo *half-range* e reescreve-se a Eq. (5.171) e a Eq. (5.172) avaliadas nos pontos de quadraturas como

$$(1/\xi_i^2) \left[ \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \mathbf{P}(\xi_k, \xi_i) \mathbf{V}(\nu_j, \xi_k) \right] = \lambda_j \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) \quad (5.177)$$

e

$$\mathbf{U}(\nu_j, \xi_i) = (\nu_j/\xi_i) \left[ \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \xi_i) \mathbf{V}(\nu_j, \xi_k) - \mathbf{K}(-\xi_k, \xi_i) \mathbf{V}(\nu_j, \xi_k)] \right] \quad (5.178)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Assim, a Eq. (5.177) define o problema de autovalores. Após definir os autovalores, pode-se então encontrar as soluções elementares  $\mathbf{\Phi}(\nu, \xi)$  através das relações

$$\mathbf{U}(\nu_j, \xi_i) = \mathbf{\Phi}(\nu_j, \xi_i) + \mathbf{\Phi}(\nu_j, -\xi_i) \quad (5.179)$$

e

$$\mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) = \mathbf{\Phi}(\nu_j, \xi_i) - \mathbf{\Phi}(\nu_j, -\xi_i) \quad (5.180)$$

Assim, somando-se as Eqs. (5.179) e (5.180), obtém-se

$$\mathbf{\Phi}(\nu_j, \xi_i) = (1/2) \left[ \mathbf{U}(\nu_j, \xi_i) + \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) \right] \quad (5.181)$$

e subtraindo-se as Eqs. (5.179) e (5.180), encontra-se

$$\mathbf{\Phi}(\nu_j, -\xi_i) = (1/2) \left[ \mathbf{U}(\nu_j, \xi_i) - \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) \right] \quad (5.182)$$

Observa-se que as constantes de separação  $\nu_j$  definidas pela Eq. (5.175) aparecem aos pares positivas e negativas, considerando-se apenas as raízes positivas. Assim, pode-se escrever a solução geral em ordenadas discreta para a Eq. (3.102) como

$$\mathbf{H}(y, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{2N} [A_j \mathbf{\Phi}(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y\varepsilon/\nu_j} + B_j \mathbf{\Phi}(\nu_j, \mp\xi_i) e^{y\varepsilon/\nu_j}] \quad (5.183)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . As constantes arbitrárias  $\{A_j\}$  e  $\{B_j\}$  são determinadas a partir das condições de contorno. Observa-se que no problema de autovalores dois deles vão para zero, assim, duas constantes de separação vão para o infinito. Com isto, despreza-se duas constantes de separação  $\nu_1$  e  $\nu_2$  na Eq. (5.183) e reescreve-se esta equação como

$$\mathbf{H}(y, \pm\xi_i) = \mathbf{H}^*(y, \pm\xi_i) + \sum_{j=3}^{2N} [A_j \mathbf{\Phi}(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y\varepsilon/\nu_j} + B_j \mathbf{\Phi}(\nu_j, \mp\xi_i) e^{y\varepsilon/\nu_j}], \quad (5.184)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ , onde

$$\mathbf{H}^*(y, \xi) = A_1 \mathbf{H}_1 + A_2 \mathbf{H}_2(\xi) + B_1 \mathbf{H}_3(\xi) + B_2 \mathbf{H}_4(\xi). \quad (5.185)$$

Aqui,

$$\mathbf{H}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.186)$$

$$\mathbf{H}_2(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (5.187)$$

e

$$\mathbf{H}_3(\xi) = \begin{bmatrix} \xi \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.188)$$

Ainda, escrevendo-se

$$\mathbf{G}_1(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.189)$$

que é solução da Eq. (3.102), existe uma função vetorial  $\mathbf{F}_1(\xi)$  de forma que  $\mathbf{H}_4$  pode ser escrita como

$$\mathbf{H}_4(y, \xi) = y\mathbf{G}_1(\xi) + \mathbf{F}_1(\xi) \quad (5.190)$$

que também é solução da Eq (3.102). Para encontrar a função vetorial  $\mathbf{F}_1(\xi)$ , substitui-se a Eq. (5.190) na Eq. (3.102) e encontra-se a equação integral

$$\mathbf{F}_1(\xi) = -(1/\varepsilon)\xi\mathbf{G}_1(\xi) + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi')\mathbf{K}(\xi', \xi)\mathbf{F}_1(\xi')d\xi'. \quad (5.191)$$

Neste ponto, observa-se que a função vetorial  $\mathbf{G}_1(\xi)$  foi encontrada através de uma combinação linear entre as soluções  $\mathbf{H}_1$  e  $\mathbf{H}_2(\xi)$ , sendo assim,  $\mathbf{G}_1(\xi)$  não é única e conseqüentemente a função  $\mathbf{F}_1(\xi)$  também não é única.

Observando-se o termo não-homogêneo na Eq. (5.191) e a forma explícita do núcleo de espalhamento  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$ , conclui-se que a função  $\mathbf{F}_1(\xi)$  pode ser expressa como

$$\mathbf{F}_1(\xi) = \sum_{\alpha=0}^3 P_{\alpha}(\xi)\mathbf{F}_{1,\alpha}, \quad (5.192)$$

onde os vetores  $\mathbf{F}_{1,\alpha}$  são constantes e os polinômios ortogonais  $P_{\alpha}(\xi)$  são dados por

$$P_0(\xi) = 1, \quad P_1(\xi) = \xi, \quad P_2(\xi) = \xi^2 - 1/2 \quad e \quad P_3(\xi) = \xi(\xi^2 - 3/2). \quad (5.193)$$

Agora, substitui-se a Eq. (5.192) na Eq. (5.191), multiplica-se a equação resultante por  $\psi(\xi)P_k(\xi)$ , para  $k = 0, 1, 2, 3$  e integra-se sobre todo  $\xi$ , obtém-se o sistema

$$\sum_{\alpha=0}^3 P_{\alpha}(\xi)\mathbf{F}_{1,\alpha} = -(1/\varepsilon)\xi\mathbf{G}_1(\xi) + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi')\mathbf{K}(\xi', \xi) \sum_{\alpha=0}^3 P_{\alpha}(\xi')\mathbf{F}_{1,\alpha}d\xi'. \quad (5.194)$$

Após resolver este sistema, encontra-se

$$\mathbf{F}_1(\xi) = (1/\varepsilon) \begin{bmatrix} -(3/2)\xi^3 + (9/4)\xi \\ -(3/2)\xi \end{bmatrix} \quad (5.195)$$

e substituindo-se as Eqs. (5.189) e (5.195) na Eq. (5.190) encontra-se o vetor  $\mathbf{H}_4(y, \xi)$

$$\mathbf{H}_4(y, \xi) = \begin{bmatrix} y\xi^2 - (3/2)y - (1/\varepsilon)((3/2)\xi^3 - (9/4)\xi) \\ y - (1/\varepsilon)(3/2)\xi \end{bmatrix} \quad (5.196)$$

que é a outra solução exata da Eq. (3.102), linearmente independente com as soluções  $\mathbf{H}_1$ ,  $\mathbf{H}_2(\xi)$  e  $\mathbf{H}_3(\xi)$ .

Observa-se pela Eq. (5.184) que tem-se  $4N$  constantes arbitrárias para determinar a partir das condições dadas pelas Eqs. (3.87) e (3.111) deste problema. Ainda, baseado no comportamento esperado da solução no infinito na Eq. (5.184), considera-se  $B_j = 0$  para  $j = 3, 4, \dots, 2N$  e

$$\mathbf{H}(y, \xi) \sim \mathbf{H}^*(y, \xi), \quad (5.197)$$

quando  $y \rightarrow \infty$  para valores contínuos de  $\xi$ . A solução fica completamente determinada após encontrar as constantes arbitrárias. Observa-se que embora a Eq. (5.184) é definida somente para pontos de quadratura  $\xi_i$ , a primeira parte da solução, ou seja, Eq. (5.185) é definida para todos os valores de  $\xi$ , assim, integra-se, quando necessário, a Eq. (5.185) analiticamente e a segunda parte da Eq. (5.184) usa-se, para integrar, o esquema de quadraturas. Para encontrar as constantes arbitrárias  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$  e  $B_2$ , substitui-se a Eq. (5.185) na condição de Welander dada pela Eq. (3.87) obtendo-se

$$B_2 = K_1. \quad (5.198)$$

Nota-se que  $H_1$ , como definida na Eq. (5.186) satisfaz a condição de contorno dada pela Eq. (3.111), considera-se, então, a condição de normalização arbitrária segundo Kriese, Chang e Siewert [Kriese et al., 1974] e Onishi [Onishi, 1997] dada pela Eq. (5.146), ou seja

$$\lim_{y \rightarrow \infty} [N(y) + T(y)] = 0 \quad (5.199)$$

encontrando-se

$$A_2 = -A_1. \quad (5.200)$$

Assim, reescreve-se a solução Eq. (5.184) como

$$\mathbf{H}(y, \pm \xi_i) = -A_1 \mathbf{G}_1(\pm \xi_i) + B_1 \mathbf{H}_3(\pm \xi_i) + K_1 \mathbf{H}_4(y, \pm \xi_i) + \sum_{j=3}^{2N} \left[ A_j \Phi(\nu_j, \pm \xi_i) e^{-y\varepsilon/\nu_j} \right], \quad (5.201)$$

onde  $\mathbf{G}_1(\xi)$ ,  $\mathbf{H}_3(\xi)$  e  $\mathbf{H}_4(y, \xi)$  são dadas, respectivamente, pelas Eqs. (5.189), (5.188) e (5.196).

Para completar a solução do problema, substitui-se a solução dada pela Eq. (5.201) na versão em ordenadas discretas da condição de contorno da Eq. (3.111) que é dada por

$$\mathbf{H}(0, \xi_i) = \mathbf{A} \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k^2} \mathbf{H}(0, -\xi_k) f(\xi_k, \xi_i), \quad (5.202)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Assim, obtém-se o sistema de equações algébricas lineares

$$\begin{aligned} A_1 \left\{ \mathbf{R}^*(\xi_i) - \mathbf{A}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{R}^*(-\xi_k) f(\xi_k, \xi_i) \right\} + B_1 \left\{ \mathbf{H}_3^*(\xi) - \mathbf{A}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{H}_3^*(-\xi_k) f(\xi_k, \xi_i) \right\} \\ + \sum_{j=3}^{2N} A_j \left\{ \Phi_+(\nu_j) - \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{A}^* \Phi_-(\nu_j) \right\} \\ = K_1 \left\{ -\mathbf{B}^*(\xi_i) + \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k, \xi_i) \mathbf{A}^* \mathbf{B}^*(-\xi_k) \right\}, \end{aligned} \quad (5.203)$$

onde  $\mathbf{R}^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $2N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{R}(\xi) = \begin{bmatrix} -\xi^2 + (3/2) \\ -1 \end{bmatrix}, \quad (5.204)$$

$\mathbf{A}^*$  é uma matriz diagonal de dimensão  $2N \times 2N$  dada por

$$\mathbf{A}^* = \text{diag}\left\{1, (1 - \alpha_t)^2, \dots, 1, (1 - \alpha_t)^2\right\}, \quad (5.205)$$

$\mathbf{H}_3^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $2N \times 1$  definido por  $N$  componentes dada pela Eq. (5.188),

$\mathbf{B}^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $2N \times 1$  definido por  $N$  componentes da forma

$$\mathbf{B}(\xi) = \begin{bmatrix} -(3/2\varepsilon)\xi^3 + (9/4\varepsilon)\xi \\ -(3/2\varepsilon)\xi \end{bmatrix}, \quad (5.206)$$

$\omega_k$  são os pesos de quadratura e  $f(\xi_k, \xi_i)$  é dada pela Eq. (3.25). A solução  $\mathbf{H}(y, \pm\xi_i)$  dada pela Eq. (5.201) fica resolvida, após encontrar os coeficientes  $A_1$ ,  $B_1$  e  $\{A_j\}$ , para  $j = 3, \dots, 2N$ , através do sistema linear Eq. (5.203). Este sistema, Eq. (5.203), é composto por  $2N$  equações lineares com  $2N$  incógnitas  $A_1$ ,  $B_1$  e  $\{A_j\}$ , para  $j = 3, \dots, 2N$ .

Assim, tendo definido a solução  $\mathbf{H}(y, \pm\xi_i)$ , pode-se encontrar as grandezas físicas de interesse em ordenadas discretas.

- Desvio de temperatura: substitui-se a Eq. (5.201) na Eq. (3.114) obtendo-se

$$T(y) = K_1 y - A_1 + 2/3 \sum_{j=3}^{2N} A_j (e^{-y\varepsilon/\nu_j}) M_1^*(\nu_j). \quad (5.207)$$

- Desvio de densidade: substitui-se a Eq. (5.201) na Eq. (3.115) obtendo-se

$$N(y) = -K_1 y + A_1 + \sum_{j=3}^{2N} A_j (e^{-y\varepsilon/\nu_j}) M_2^*(\nu_j). \quad (5.208)$$

Tem-se que  $M_1^*(\nu_j)$  e  $M_2^*(\nu_j)$  são as componentes do vetor  $\mathbf{M}^*(\nu_j)$  dado por

$$\mathbf{M}^*(\nu_j) = [\omega_1 \widehat{\Lambda}^*(\xi_1) \quad \omega_2 \widehat{\Lambda}^*(\xi_2) \quad \dots \quad \omega_N \widehat{\Lambda}^*(\xi_N)] [\Phi_+(\nu_j) + \Phi_-(\nu_j)]. \quad (5.209)$$

Aqui,

$$\widehat{\Lambda}^*(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \begin{bmatrix} (\xi^2 - 1/2) & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.210)$$

Ainda, chamando

$$T^*(y) = K_1 y - A_1, \quad (5.211)$$

define-se o coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$  como

$$T^*(0) = \zeta \frac{d}{dy} T^*(y) \Big|_{y=0}, \quad (5.212)$$

ou seja,

$$\zeta = -A_1. \quad (5.213)$$

Sem perder a generalidade, escolhe-se  $K_1 = 1$ . Assim, tem-se

- Desvio de temperatura.

$$T(y) = y - A_1 + 2/3 \sum_{j=3}^{2N} A_j (e^{-y\varepsilon/\nu_j}) M_1^*(\nu_j). \quad (5.214)$$

- Desvio de densidade.

$$N(y) = -y + A_1 + \sum_{j=3}^{2N} A_j (e^{-y\varepsilon/\nu_j}) M_2^* \nu_j. \quad (5.215)$$

- Coeficiente de salto de temperatura: a expressão é dada pela Eq. (5.213). Aqui,  $M_1(\nu_j)$  e  $M_2(\nu_j)$  são as componentes do vetor dado pela Eq. (5.209).

### 5.7.3 Problema de Salto de Temperatura - Modelo S - Difuso-Especular

Para o modelo S com condições de contorno difuso-especular segue-se o desenvolvimento como feito na sub-seção anterior até a Eq. (5.201). A partir desta equação, tem-se o que segue.

Para completar a solução do problema, substitui-se a solução dada pela Eq. (5.201) na versão em ordenadas discreta da condição de contorno da Eq. (3.110) que é dada por

$$\mathbf{H}(0, \xi_i) = (1 - \alpha) \mathbf{H}(0, -\xi_i) + \mathbf{A}' \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k e^{-\xi_k^2} \mathbf{H}(0, -\xi_k), \quad (5.216)$$



para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Aqui,  $\mathbf{A}'$  é dada pela Eq. (3.112). Assim, obtém-se o sistema de equações algébricas lineares

$$A_1 \mathbf{M}^*(\xi_i) + B_1 \mathbf{N}^*(\xi_i) + \sum_{j=3}^{2N} A_j \left\{ \Phi_+(\nu_j) - \left[ (1 - \alpha) + \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k^2} \xi_k \mathbf{A}_* \right] \Phi_-(\nu_j) \right\} = K_1 \mathbf{S}^*(\xi_i), \quad (5.217)$$

onde  $\mathbf{M}^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $2N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{M}(\xi) = -\alpha \begin{bmatrix} \xi^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (5.218)$$

$\mathbf{N}^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $2N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{N}(\xi) = \begin{bmatrix} 2\xi - \alpha\xi + (\alpha/2)\sqrt{\pi} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.219)$$

$\mathbf{A}_*$  é uma matriz diagonal de dimensão  $2N \times 2N$  dada por

$$\mathbf{A}_* = \text{diag}\{2\alpha, 0, \dots, 2\alpha, 0\}, \quad (5.220)$$

e

$$\mathbf{S}^*(\xi_i) = (3/\varepsilon) \begin{bmatrix} \xi_i^3 - (3/2)\xi_i - (1/2)\alpha\xi_i^3 + (3/4)\alpha\xi_i \\ \xi_i - (1/2)\alpha\xi_i \end{bmatrix}. \quad (5.221)$$

O sistema linear dado pela Eq. (5.217) é composto por  $2N$  equações e  $2N$  incógnitas, a saber,  $A_1$ ,  $B_1$  e  $\{A_j\}$ , para  $j = 3, \dots, 2N$ . Após encontrar os coeficientes  $A_1$ ,  $B_1$  e  $\{A_j\}$ , para  $j = 3, \dots, 2N$  através do sistema dado pela Eq. (5.217), a solução  $\mathbf{H}(y, \pm\xi_i)$  dada pela Eq. (5.201) fica resolvida.

Tendo definido a solução  $\mathbf{H}(y, \pm\xi_i)$ , pode-se agora encontrar as quantidades de interesse em ordenadas discretas.

- Desvio de temperatura: substitui-se a Eq. (5.201) na Eq. (3.114) obtendo-se

$$T(y) = K_1 y - A_1 + 2/3 \sum_{j=3}^{2N} A_j (e^{-y\varepsilon/\nu_j}) M_1^*(\nu_j). \quad (5.222)$$

- Desvio de densidade: substitui-se a Eq. (5.201) na Eq. (3.115) obtendo-se

$$N(y) = -K_1 y + A_1 + \sum_{j=3}^{2N} A_j (e^{-y\varepsilon/\nu_j}) M_2^*(\nu_j). \quad (5.223)$$

Aqui,  $M_1^*(\nu_j)$  e  $M_2^*(\nu_j)$  são as componentes do vetor  $\mathbf{M}^*(\nu_j)$  dado pela Eq. (5.209). Ainda, chamando

$$T^*(y) = K_1 y - A_1, \quad (5.224)$$

define-se o coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$  como

$$T^*(0) = \zeta \frac{d}{dy} T^*(y) \Big|_{y=0}, \quad (5.225)$$

ou seja,

$$\zeta = -A_1. \quad (5.226)$$

Sem perder a generalidade, escolhe-se  $K_1 = 1$ . Assim, tem-se:

- Desvio de temperatura:

$$T(y) = y - A_1 + 2/3 \sum_{j=3}^{2N} A_j (e^{-y\varepsilon/\nu_j}) M_1^*(\nu_j), \quad (5.227)$$

- Desvio de densidade:

$$N(y) = -y + A_1 + \sum_{j=3}^{2N} A_j (e^{-y\varepsilon/\nu_j}) M_2^*(\nu_j). \quad (5.228)$$

- Coeficiente de salto de temperatura: a expressão é dada pela Eq. (5.226). Tem-se que  $M_1^*(\nu_j)$  e  $M_2^*(\nu_j)$  são as componentes do vetor  $\mathbf{M}^*(\nu_j)$  dado pela Eq. (5.209).

Após, encontrar-se as soluções para os problemas de dinâmica de gases rarefeitos, com movimento do gás entre placas paralelas e no semi-espaco, através do método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO), segue-se, no próximo capítulo, o mesmo método (ADO) [Barichello e Siewert, 1999] para resolver problemas que envolvem mistura de gases.

## CAPÍTULO 6

---

### SOLUÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS - MISTURA DE GASES

Neste capítulo, de forma análoga aos problemas relativos ao caso de um único gás, uma versão analítica do método de Ordenadas Discretas (ADO) [Barichello e Siewert, 1999] será usada na busca de soluções para os problemas de mistura de gases (problema de Salto de Temperatura, Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso). Para isso, define-se o esquema de quadratura do tipo *half-range* associado ao método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO), encontra-se o problema de autovalores (constantes de separação), determina-se as soluções elementares numéricas e reescreve-se as quantidades físicas usando a solução em ordenadas discretas.

#### 6.1 Modelo de McCormack - Cercignani-Lampis

Inicialmente, considera-se a seguinte notação:  $\mathbf{K}_p(\xi', \xi)$ ,  $p = 1, 2$ . Aqui,  $p = 1$  denota o núcleo requerido na Eq. (4.94) para o problema de Salto de Temperatura e  $p = 2$  denota o núcleo requerido na Eq. (4.132) para os problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso.

Para o modelo de McCormack, escreve-se a Eq. (4.94) e a Eq. (4.132) em ordenadas discretas como

$$\begin{aligned} \pm \xi_i \frac{d}{dy} \mathbf{G}(y, \pm \xi_i) + \Sigma \mathbf{G}(y, \pm \xi_i) \\ = \Sigma \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k^2} [ \mathbf{K}_p(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}(y, \xi_k) + \mathbf{K}_p(-\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}(y, -\xi_k) ]. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Procura-se soluções básicas para as equações homogêneas, assim, estabelece-se, em termos do método de ordenadas discreta, as soluções elementares de

$$\xi \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{G}(y, \xi) + \Sigma \mathbf{G}(y, \xi) = \Sigma \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}_p(\xi', \xi) \mathbf{G}(y, \xi') d\xi'. \quad (6.2)$$

Procura-se soluções elementares da Eq. (6.2) na forma

$$\mathbf{G}(y, \xi) = \Phi(\nu, \xi) e^{-y/\nu} \quad (6.3)$$

onde a constante de separação  $\nu$  e as funções  $\Phi(\nu, \xi)$  que são as componentes independentes da variável espacial das soluções elementares serão determinadas. Substituindo-se a Eq. (6.3) na Eq. (6.2), obtém-se

$$(\nu \Sigma - \xi \mathbf{I}) \Phi(\nu, \xi) = \nu \Sigma \int_0^{\infty} \psi(\xi') [\mathbf{K}_p(\xi', \xi) \Phi(\nu, \xi') + \mathbf{K}_p(-\xi', \xi) \Phi(\nu, -\xi')] d\xi' \quad (6.4)$$

e

$$(\nu \Sigma + \xi \mathbf{I}) \Phi(\nu, -\xi) = \nu \Sigma \int_0^{\infty} \psi(\xi') [\mathbf{K}_p(\xi', -\xi) \Phi(\nu, \xi') + \mathbf{K}_p(-\xi', -\xi) \Phi(\nu, -\xi')] d\xi'. \quad (6.5)$$

Observa-se que como

$$\mathbf{K}_p(\xi', -\xi) = \mathbf{K}_p(-\xi', \xi) \quad (6.6)$$

tem-se

$$\Phi(\nu, \xi) = \Phi(-\nu, -\xi). \quad (6.7)$$

Somando-se e subtraindo-se as Eqs. (6.4) e (6.5) uma da outra, obtém-se

$$(1/\xi^2) \left[ \Sigma^2 \mathbf{V}(\nu, \xi) - \int_0^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{P}(\xi', \xi) \mathbf{V}(\nu, \xi') d\xi' \right] = \lambda \mathbf{V}(\nu, \xi) \quad (6.8)$$

e

$$\mathbf{U}(\nu, \xi) = (\nu/\xi) \Sigma \left[ \mathbf{V}(\nu, \xi) - \int_0^{\infty} \psi(\xi') [\mathbf{K}_p(\xi', \xi) \mathbf{V}(\nu, \xi') - \mathbf{K}_p(-\xi', \xi) \mathbf{V}(\nu, \xi')] d\xi' \right], \quad (6.9)$$

onde

$$\mathbf{U}(\nu, \xi) = \Phi(\nu, \xi) + \Phi(\nu, -\xi), \quad (6.10)$$

$$\mathbf{V}(\nu, \xi) = \Phi(\nu, \xi) - \Phi(\nu, -\xi), \quad (6.11)$$

$$\lambda = 1/\nu^2 \quad (6.12)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\xi', \xi) = & (\xi/\xi')\Sigma[\mathbf{K}_p(\xi', \xi) + \mathbf{K}_p(-\xi', \xi)]\Sigma + \Sigma^2[\mathbf{K}_p(\xi', \xi) - \mathbf{K}_p(-\xi', \xi)] \\ & - \int_0^\infty \psi(\xi'')(\xi/\xi'')\Sigma[\mathbf{K}_p(\xi'', \xi) + \mathbf{K}_p(-\xi'', \xi)]\Sigma[\mathbf{K}_p(\xi', \xi'') - \mathbf{K}_p(-\xi', \xi'')]d\xi''. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Introduz-se um esquema de quadratura do tipo *half-range* e reescreve-se a Eq. (6.8) e a Eq. (6.9) avaliadas nos pontos de quadraturas como

$$(1/\xi_i^2) \left[ \Sigma^2 \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \mathbf{P}(\xi_k, \xi_i) \mathbf{V}(\nu_j, \xi_k) \right] = \lambda_j \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) \quad (6.14)$$

e

$$\mathbf{U}(\nu_j, \xi_i) = (\nu_j/\xi_i)\Sigma \left[ \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}_p(\xi_k, \xi_i) \mathbf{V}(\nu_j, \xi_k) - \mathbf{K}_p(-\xi_k, \xi_i) \mathbf{V}(\nu_j, \xi_k)] \right] \quad (6.15)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Assim, a Eq. (6.14) define o problema de autovalores. Após definir os autovalores, pode-se então encontrar as soluções elementares  $\Phi(\nu, \xi)$ , através das relações

$$\mathbf{U}(\nu_j, \xi_i) = \Phi(\nu_j, \xi_i) + \Phi(\nu_j, -\xi_i) \quad (6.16)$$

e

$$\mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) = \Phi(\nu_j, \xi_i) - \Phi(\nu_j, -\xi_i). \quad (6.17)$$

Assim, somando-se as Eqs. (6.16) e (6.17), obtém-se

$$\Phi(\nu_j, \xi_i) = (1/2) \left[ \mathbf{U}(\nu_j, \xi_i) + \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) \right] \quad (6.18)$$

e subtraindo-se as Eqs. (6.16) e (6.17), encontra-se

$$\Phi(\nu_j, -\xi_i) = (1/2) \left[ \mathbf{U}(\nu_j, \xi_i) - \mathbf{V}(\nu_j, \xi_i) \right]. \quad (6.19)$$

As constantes de separação  $\nu_j$  definidas pela Eq. (6.12) aparecem aos pares positivas e negativas, considera-se apenas as raízes positivas. Assim, pode-se escrever a solução geral em ordenadas discreta para a Eq. (4.94) como

$$\mathbf{G}(y, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{y/\nu_j}] \quad (6.20)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Tem-se que as constantes arbitrárias  $\{A_j\}$  e  $\{B_j\}$  são determinadas a partir da condição de contorno dada pela Eq. (4.99) para o problema de Salto de Temperatura e dada pela Eq. (4.137) para os problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso.

A partir daqui, devido ao comportamento dos autovalores degenerados que não acontece da mesma forma em todos os casos, tratar-se-á, separadamente, o desenvolvimento dos três problemas, ou seja, Salto de Temperatura, Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso. No problema de autovalores dado pela Eq. (6.14), para o problema de Salto de Temperatura, três autovalores  $\lambda$  tendem para zero quando  $N$  tender ao infinito, isto significa que três constantes de separação  $\nu$  tendem ao infinito, enquanto que no problema de autovalores dado pela Eq. (6.14), para os problemas de Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso um autovalor  $\lambda$  tende para zero quando  $N$  tender para o infinito, conseqüentemente uma constante de separação  $\nu$  tende ao infinito.

### 6.1.1 Problema de Salto de Temperatura

Para o problema de Salto de Temperatura, a Eq. (6.20) é a solução geral em ordenadas discretas, este resultado pode ser melhorado, pois o problema de autovalores, Eq. (6.14) gera três constantes de separação, por exemplo,  $\nu_1$ ,  $\nu_2$  e  $\nu_3$  que tornam-se ilimitadas quando  $N$  tende ao infinito. Por este fato, despreza-se três constantes de separação  $\nu_1$ ,  $\nu_2$  e

$\nu_3$  na Eq. (6.20) e reescreve-se esta equação como

$$\mathbf{G}(y, \pm\xi_i) = \mathbf{G}^*(y, \pm\xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{y/\nu_j}], \quad (6.21)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ , onde

$$\mathbf{G}^*(y, \xi) = A_1 \mathbf{G}_1 + A_2 \mathbf{G}_2 + A_3 \mathbf{G}_3 + B_1 \mathbf{G}_4(\xi) + B_2 [y \mathbf{H}_1(\xi) + \mathbf{F}_1(\xi)] + B_3 [y \mathbf{H}_2(\xi) + \mathbf{F}_2(\xi)]. \quad (6.22)$$

Aqui,

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (6.23)$$

$$\mathbf{G}_3(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad e \quad \mathbf{G}_4(\xi) = \begin{bmatrix} r\xi \\ 0 \\ \xi \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.24)$$

são soluções exatas linearmente independentes da Eq. (6.2). Ainda, escrevendo-se

$$\mathbf{H}_1(\xi) = \begin{bmatrix} -1 + c_1(\xi^2 - 1/2) \\ c_1 \\ c_1(\xi^2 - 1/2) \\ c_1 \end{bmatrix} \quad e \quad \mathbf{H}_2(\xi) = \begin{bmatrix} c_2(\xi^2 - 1/2) \\ c_2 \\ -1 + c_2(\xi^2 - 1/2) \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (6.25)$$

com

$$c_1 = (n_1/n), \quad c_2 = (n_2/n) \quad e \quad n = n_1 + n_2, \quad (6.26)$$

então existem funções vetoriais  $\mathbf{F}_1(\xi)$  e  $\mathbf{F}_2(\xi)$  de forma que

$$\mathbf{G}_5(y, \xi) = y \mathbf{H}_1(\xi) + \mathbf{F}_1(\xi) \quad e \quad \mathbf{G}_6(y, \xi) = y \mathbf{H}_2(\xi) + \mathbf{F}_2(\xi) \quad (6.27)$$

também são soluções da Eq. (6.2). Para encontrar as funções vetoriais  $\mathbf{F}_1(\xi)$  e  $\mathbf{F}_2(\xi)$ , substitui-se as Eqs. (6.27) na Eq. (6.2) e usa-se o fato que  $\mathbf{H}_1(\xi)$  e  $\mathbf{H}_2(\xi)$  são soluções exatas da equação, encontra-se, então, a equação integral

$$\mathbf{F}_\beta(\xi) = -\xi \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{H}_\beta(\xi) + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{F}_\beta(\xi') d\xi', \quad (6.28)$$

para  $\beta = 1, 2$  e  $\xi \in (-\infty, \infty)$ . Neste ponto, observa-se que as funções vetoriais  $\mathbf{H}_1(\xi)$  e  $\mathbf{H}_2(\xi)$  foram encontradas através de combinações lineares entre as soluções  $\mathbf{G}_1$  e  $\mathbf{G}_3(\xi)$  e  $\mathbf{G}_2$  e  $\mathbf{G}_3(\xi)$ , respectivamente, sendo assim,  $\mathbf{H}_\beta(\xi)$  não são únicas e conseqüentemente as funções  $\mathbf{F}_\beta(\xi)$  também não são definidas unicamente. Observando-se o termo não-homogêneo na Eq. (6.28) e a forma explícita do núcleo de espalhamento  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$ , conclui-se que as funções  $\mathbf{F}_1(\xi)$  e  $\mathbf{F}_2(\xi)$  podem ser expressas como

$$\mathbf{F}_\beta(\xi) = \sum_{\alpha=0}^3 P_\alpha(\xi) \mathbf{F}_{\beta,\alpha}, \quad (6.29)$$

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

$$P_0(\xi) = 1, \quad P_1(\xi) = \xi, \quad P_2(\xi) = \xi^2 - 1/2 \quad \text{e} \quad P_3(\xi) = \xi(\xi^2 - 3/2). \quad (6.30)$$

Agora, substitui-se a Eq. (6.29) na Eq. (6.28), multiplica-se a equação resultante por  $\psi(\xi)P_k(\xi)$ , para  $k = 0, 1, 2, 3$  e integra-se sobre todo  $\xi$  para encontrar um sistema de 16 equações algébricas lineares, com posto 12, que pode ser resolvido para encontrar as componentes dos vetores  $\mathbf{F}_{\beta,\alpha}$  solicitadas na Eq. (6.29). A Eq. (6.29) pode ser escrita de uma forma mais explícita, usando-se o software MAPLE V conclui-se que a Eq. (6.29) pode ser escrita como

$$\mathbf{F}_\beta(\xi) = \mathbf{U}_\beta P_1(\xi) + \mathbf{V}_\beta P_3(\xi) \quad (6.31)$$

onde os vetores constantes  $\mathbf{U}_\beta$  e  $\mathbf{V}_\beta$  são soluções do sistema linear definido por

$$(\mathbf{I} - \mathbf{A}_1^*) \mathbf{U}_1 - \mathbf{C}_1^* \mathbf{V}_1 = \left[ (c_2/\sigma_1) \quad - (c_1/\sigma_1) \quad - (c_1/\sigma_2) \quad - (c_1/\sigma_2) \right]^T \quad (6.32)$$

$$(\mathbf{I} - \mathbf{D}_1^*) \mathbf{V}_1 - \mathbf{B}_1^* \mathbf{U}_1 = \left[ - (c_1/\sigma_1) \quad 0 \quad - (c_1/\sigma_2) \quad 0 \right]^T \quad (6.33)$$



e

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{U}_1 = 0 \quad (6.34)$$

para  $\beta = 1$  e por

$$(\mathbf{I} - \mathbf{A}_1^*) \mathbf{U}_2 - \mathbf{C}_1^* \mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} -(c_2/\sigma_1) & -(c_2/\sigma_1) & (c_1/\sigma_2) & -(c_2/\sigma_2) \end{bmatrix}^T \quad (6.35)$$

$$(\mathbf{I} - \mathbf{D}_1^*) \mathbf{V}_2 - \mathbf{B}_1^* \mathbf{U}_2 = \begin{bmatrix} -(c_2/\sigma_1) & 0 & -(c_2/\sigma_2) & 0 \end{bmatrix}^T \quad (6.36)$$

e

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{U}_2 = 0 \quad (6.37)$$

para  $\beta = 2$ . Observa-se que ao acrescentar as Eqs. (6.34) e (6.37), o sistema passa de um sistema quadrado ( $8 \times 8$ ) para um sistema ( $9 \times 8$ ). Estas equações são introduzidas para que o sistema tenha uma única solução. Aqui,

$$\mathbf{U}_1 = \begin{bmatrix} u_1^1 \\ u_1^2 \\ u_1^3 \\ u_1^4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U}_2 = \begin{bmatrix} u_2^1 \\ u_2^2 \\ u_2^3 \\ u_2^4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}_1 = \begin{bmatrix} v_1^1 \\ v_1^2 \\ v_1^3 \\ v_1^4 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} v_2^1 \\ v_2^2 \\ v_2^3 \\ v_2^4 \end{bmatrix}. \quad (6.38)$$

Ainda, nos sistemas, Eqs. (6.32)-(6.34) e Eqs. (6.35)-(6.37), tem-se que  $\mathbf{I}$  representa a matriz identidade, o índice  $T$  denota a operação transposta e as matrizes

$$\mathbf{A}_1^* = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \psi(\xi) \mathbf{K}(\xi', \xi) P_1(\xi') P_1(\xi) d\xi' d\xi, \quad (6.39)$$

$$\mathbf{B}_1^* = (4/3) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \psi(\xi) \mathbf{K}(\xi', \xi) P_1(\xi') P_3(\xi) d\xi' d\xi, \quad (6.40)$$

$$\mathbf{C}_1^* = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \psi(\xi) \mathbf{K}(\xi', \xi) P_3(\xi') P_1(\xi) d\xi' d\xi \quad (6.41)$$

e

$$\mathbf{D}_1^* = (4/3) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \psi(\xi) \mathbf{K}(\xi', \xi) P_3(\xi') P_3(\xi) d\xi' d\xi. \quad (6.42)$$

Avaliando-se as integrais dadas pelas Eqs. (6.39)-(6.42), tem-se como resultados

$$\mathbf{A}_1^* = \begin{bmatrix} 1 - \eta_{1,2}^{(1)} & -(1/2)\eta_{1,2}^{(2)} & r\eta_{1,2}^{(1)} & (r^3/2)\eta_{1,2}^{(2)} \\ -(1/2)\eta_{1,2}^{(2)} & (2/5)\beta_1 & (r/2)\eta_{1,2}^{(2)} & (2/5)\eta_{1,2}^{(6)} \\ s\eta_{2,1}^{(1)} & (s^3/2)\eta_{2,1}^{(2)} & 1 - \eta_{2,1}^{(1)} & -(1/2)\eta_{2,1}^{(2)} \\ (s/2)\eta_{2,1}^{(2)} & (2/5)\eta_{2,1}^{(6)} & -(1/2)\eta_{2,1}^{(2)} & (2/5)\beta_2 \end{bmatrix}, \quad (6.43)$$

$$\mathbf{B}_1^* = \begin{bmatrix} -(1/2)\eta_{1,2}^{(2)} & (2/5)\beta_1 & (r/2)\eta_{1,2}^{(2)} & (2/5)\eta_{1,2}^{(6)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ (s/2)\eta_{2,1}^{(2)} & (2/5)\eta_{2,1}^{(6)} & -(1/2)\eta_{2,1}^{(2)} & (2/5)\beta_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (6.44)$$

$$\mathbf{C}_1^* = \begin{bmatrix} -(3/4)\eta_{1,2}^{(2)} & 0 & (3r^3/4)\eta_{1,2}^{(2)} & 0 \\ (3/5)\beta_1 & 0 & (3/5)\eta_{1,2}^{(6)} & 0 \\ (3s^3/4)\eta_{2,1}^{(2)} & 0 & -(3/4)\eta_{2,1}^{(2)} & 0 \\ (3/5)\eta_{2,1}^{(6)} & 0 & (3/5)\beta_2 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.45)$$

e

$$\mathbf{D}_1^* = \begin{bmatrix} (3/5)\beta_1 & 0 & (3/5)\eta_{1,2}^{(6)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ (3/5)\eta_{2,1}^{(6)} & 0 & (3/5)\beta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.46)$$

Com isto, tem-se seis soluções exatas para a Eq. (6.2), isto é, as soluções  $\mathbf{G}_1$  e  $\mathbf{G}_2$  dadas pela Eq. (6.23),  $\mathbf{G}_3(\xi)$  e  $\mathbf{G}_4(\xi)$  dadas pela Eq. (6.24) e  $\mathbf{G}_5(y, \xi)$  e  $\mathbf{G}_6(y, \xi)$  dadas pela Eq. (6.27). Observa-se que a solução dada pela Eq. (6.21) diverge exponencialmente quando  $y$  tende ao infinito, então, isto sugere que deve-se considerar  $B_j = 0$ , para  $j = 4, 5, \dots, N$ .

Com isto, tem-se

$$\mathbf{G}(y, \pm\xi_i) = \mathbf{G}^*(y, \pm\xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j}, \quad (6.47)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Ainda,  $\mathbf{G}^*(y, \pm\xi_i)$  é dada pela Eq. (6.22).

Nota-se que  $\mathbf{G}_1$  e  $\mathbf{G}_2$ , como definidas na Eq. (6.23), satisfazem a condição de contorno dada na Eq. (4.99), assim, as constantes  $A_1$  e  $A_2$  não podem ser determinadas a partir da condição de contorno. Para isto, considera-se a condição de normalização arbitrária segundo Kriese, Chang e Siewert [Kriese et al., 1974] e Onishi [Onishi, 1997]

$$\lim_{y \rightarrow \infty} [N_\alpha(y) + T_\alpha(y)] = 0, \text{ para } \alpha = 1, 2. \quad (6.48)$$

Observa-se também que, quando  $y \rightarrow \infty$ , tem-se

$$\mathbf{G}(y, \xi) \sim \mathbf{G}^*(y, \xi) \quad (6.49)$$

e, após utilizar-se a relação dada pela Eq. (6.49), avalia-se analiticamente as integrais das Eqs. (4.104) e (4.105) e conclui-se que o desvio de densidade e temperatura podem ser escritos como

$$N_1^*(y) = A_1 - B_2 y, \quad (6.50)$$

$$N_2^*(y) = A_2 - B_3 y, \quad (6.51)$$

$$T_1^*(y) = A_3 + (c_1 B_2 + c_2 B_3) y \quad (6.52)$$

e

$$T_2^*(y) = A_3 + (c_1 B_2 + c_2 B_3) y. \quad (6.53)$$

Então, usando-se a condição dada pela Eq. (6.48) e a condição (generalizada) de normalização de Welander dada pela Eq. (4.58), conclui-se que

$$A_1 = -A_3, \quad (6.54)$$

$$A_2 = -A_3 \quad (6.55)$$

e

$$c_1 B_2 + c_2 B_3 = K \quad (6.56)$$

onde  $K$  é uma constante de normalização.

Escolhendo-se, na Eq. (6.56), isolar-se  $B_3$

$$B_3 = \frac{K}{c_2} - \frac{c_1}{c_2} B_2. \quad (6.57)$$

tem-se que a solução da Eq. (6.2) é escrita como

$$\mathbf{G}(y, \pm \xi_i) = \mathbf{G}_*(y, \pm \xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} A_j \Phi(\nu_j, \pm \xi_i) e^{-y/\nu_j}, \quad (6.58)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_*(y, \xi) = & A_3 \mathbf{R}(\xi) + B_1 \mathbf{G}_4(\xi) + B_2 \left[ [y \mathbf{H}_1(\xi) + \mathbf{F}_1(\xi)] \right. \\ & \left. - (c_1/c_2) [y \mathbf{H}_2(\xi) + \mathbf{F}_2(\xi)] \right] + (K/c_2) [y \mathbf{H}_2(\xi) + \mathbf{F}_2(\xi)]. \end{aligned} \quad (6.59)$$

Aqui,

$$\mathbf{R}(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \\ \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (6.60)$$

$$\mathbf{G}_4(\xi) = \begin{bmatrix} r\xi \\ 0 \\ \xi \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (6.61)$$

$$\mathbf{H}_1(\xi) = \begin{bmatrix} -1 + c_1(\xi^2 - 1/2) \\ c_1 \\ c_1(\xi^2 - 1/2) \\ c_1 \end{bmatrix}, \quad (6.62)$$

$$\mathbf{F}_1(\xi) = \xi \begin{bmatrix} u_1^1 \\ u_1^2 \\ u_1^3 \\ u_1^4 \end{bmatrix} + \xi(\xi^2 - 3/2) \begin{bmatrix} v_1^1 \\ v_1^2 \\ v_1^3 \\ v_1^4 \end{bmatrix}, \quad (6.63)$$

$$\mathbf{H}_2(\xi) = \begin{bmatrix} c_2(\xi^2 - 1/2) \\ c_2 \\ -1 + c_2(\xi^2 - 1/2) \\ c_2 \end{bmatrix}, \quad (6.64)$$

$$\mathbf{F}_2(\xi) = \xi \begin{bmatrix} u_2^1 \\ u_2^2 \\ u_2^3 \\ u_2^4 \end{bmatrix} + \xi(\xi^2 - 3/2) \begin{bmatrix} v_2^1 \\ v_2^2 \\ v_2^3 \\ v_2^4 \end{bmatrix}, \quad (6.65)$$

$$c_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2}, \quad (6.66)$$

$$c_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2}, \quad (6.67)$$

ainda,  $u_1^1, u_1^2, u_1^3, u_1^4, v_1^1, v_1^2, v_1^3$  e  $v_1^4$  são soluções do sistema dado pelas Eqs. (6.32)-(6.34) e  $u_2^1, u_2^2, u_2^3, u_2^4, v_2^1, v_2^2, v_2^3$  e  $v_2^4$  são soluções do sistema dado pelas Eqs. (6.35)-(6.37). Para completar a solução do problema, substitui-se a Eq. (6.58) na versão em ordenadas discreta

da condição de contorno da Eq. (4.99) que é dada por

$$\mathbf{G}(0, \xi_i) = \mathbf{D} \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}(0, -\xi_k), \quad (6.68)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Sendo  $\mathbf{D}$  dada pela Eq. (4.100) e  $\mathbf{F}(\xi_k, \xi_i)$  dada pela Eq. (4.101). Assim, obtém-se um sistema com  $4N$  equações algébricas lineares e  $4N$  incógnitas,  $A_3$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  e  $\{A_j\}$  para  $j = 4, \dots, 4N$ , como segue

$$\begin{aligned} & A_3 \left\{ \mathbf{R}^*(\xi_i) - \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{R}^*(-\xi_k) \right\} \\ & + B_1 \left\{ \mathbf{G}_4^*(\xi_i) - \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}_4^*(-\xi_k) \right\} \\ & + B_2 \left\{ \mathbf{K}_1^*(\xi_i) - \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{K}_1^*(-\xi_k) \right\} \\ & + \sum_{j=4}^{4N} A_j \left\{ \Phi_+(\nu_j) - \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \Phi_-(\nu_j) \right\} \\ & = K \left\{ -\mathbf{J}_1^*(\xi_i) + \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{J}_1^*(-\xi_k) \right\}, \end{aligned} \quad (6.69)$$

onde,  $\mathbf{R}^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{R}(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \\ \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (6.70)$$

$\mathbf{D}^*$  é uma matriz diagonal de dimensão  $4N \times 4N$  dada por

$$\mathbf{D}^* = \text{diag} \left\{ 1, (1 - a_{t1})^2, 1, (1 - a_{t2})^2, \dots, 1, (1 - a_{t1})^2, 1, (1 - a_{t2})^2 \right\}, \quad (6.71)$$

$\mathbf{F}^*(\xi_k, \xi)$  é uma matriz diagonal de dimensão  $4N \times 4N$  dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi) = \text{diag} \{ & f_1(\xi, \xi_1), f_1(\xi, \xi_1), f_2(\xi, \xi_1), f_2(\xi, \xi_1), \dots, \\ & f_1(\xi, \xi_N), f_1(\xi, \xi_N), f_2(\xi, \xi_N), f_2(\xi, \xi_N) \}, \end{aligned} \quad (6.72)$$

$\mathbf{G}_4^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{G}_4(\xi) = \begin{bmatrix} r\xi \\ 0 \\ \xi \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (6.73)$$

$\mathbf{K}_1^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{K}_1(\xi) = \begin{bmatrix} -\frac{c_1}{c_2}(u_2^1\xi + v_2^1\xi^3 - \frac{3}{2}v_2^1\xi) + u_1^1\xi + v_1^1\xi^3 - \frac{3}{2}v_1^1\xi \\ -\frac{c_1}{c_2}(u_2^2\xi + v_2^2\xi^3 - \frac{3}{2}v_2^2\xi) + u_1^2\xi + v_1^2\xi^3 - \frac{3}{2}v_1^2\xi \\ -\frac{c_1}{c_2}(u_2^3\xi + v_2^3\xi^3 - \frac{3}{2}v_2^3\xi) + u_1^3\xi + v_1^3\xi^3 - \frac{3}{2}v_1^3\xi \\ -\frac{c_1}{c_2}(u_2^4\xi + v_2^4\xi^3 - \frac{3}{2}v_2^4\xi) + u_1^4\xi + v_1^4\xi^3 - \frac{3}{2}v_1^4\xi \end{bmatrix} \quad (6.74)$$

e  $\mathbf{J}_1^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{J}_1(\xi) = \frac{1}{c_2} \begin{bmatrix} (u_2^1\xi + v_2^1\xi^3 - \frac{3}{2}v_2^1\xi) \\ (u_2^2\xi + v_2^2\xi^3 - \frac{3}{2}v_2^2\xi) \\ (u_2^3\xi + v_2^3\xi^3 - \frac{3}{2}v_2^3\xi) \\ (u_2^4\xi + v_2^4\xi^3 - \frac{3}{2}v_2^4\xi) \end{bmatrix}. \quad (6.75)$$

Após encontrar os coeficientes  $A_3$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  e  $\{A_j\}$ , para  $j = 4, \dots, 4N$  através do sistema acima ( $4N \times 4N$ ) dado pela Eq. (6.69), a solução  $\mathbf{G}(y, \pm\xi_i)$  dada pela Eq. (6.58) fica, então, resolvida.

Neste momento, encontra-se as quantidades de interesse em ordenadas discretas.

• Desvio de densidade  $\mathbf{N}(y)$ , com componentes  $N_\alpha(y)$  para  $\alpha = 1, 2$ , substitui-se a Eq. (6.58) na Eq. (4.104) para obter-se

$$\mathbf{N}(y) = - \begin{bmatrix} A_3 + B_2 y \\ A_3 + (\frac{K}{c_2} - \frac{c_1}{c_2} B_2) y \end{bmatrix} + \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-y/\nu_j} \mathbf{M}_1(\nu_j), \quad (6.76)$$

onde

$$\mathbf{M}_1(\nu_j) = \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (6.77)$$

- Desvio de temperatura  $\mathbf{T}(y)$ , com componentes  $T_\alpha(y)$  para  $\alpha = 1, 2$ , substitui-se a Eq. (6.58) na Eq. (4.105) para obter-se

$$\mathbf{T}(y) = (A_3 + Ky) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{3} \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-y/\nu_j} \mathbf{M}_2(\nu_j), \quad (6.78)$$

onde

$$\mathbf{M}_2(\nu_j) = \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k^2} \begin{bmatrix} \xi_k^2 - 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_k^2 - 1/2 & 1 \end{bmatrix} [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (6.79)$$

Escolhendo-se, na Eq. (6.56), isolar-se  $B_2$ ,

$$B_2 = \frac{K}{c_1} - \frac{c_2}{c_1} B_3, \quad (6.80)$$

tem-se que a solução da Eq. (6.2) é escrita como

$$\mathbf{G}(y, \pm\xi_i) = \mathbf{G}_{**}(y, \pm\xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j}, \quad (6.81)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{**}(y, \xi) &= A_3 \mathbf{R}(\xi) + B_1 \mathbf{G}_4(\xi) + \\ &+ B_3 \left[ -\frac{c_2}{c_1} [y\mathbf{H}_1(\xi) + \mathbf{F}_1(\xi)] + [y\mathbf{H}_2(\xi) + \mathbf{F}_2(\xi)] \right] + \frac{K}{c_1} [y\mathbf{H}_1(\xi) + \mathbf{F}_1(\xi)]. \end{aligned} \quad (6.82)$$

onde,  $\mathbf{R}(\xi)$ ,  $\mathbf{G}_4(\xi)$ ,  $\mathbf{H}_1(\xi)$ ,  $\mathbf{F}_1(\xi)$ ,  $\mathbf{H}_2(\xi)$ ,  $\mathbf{F}_2(\xi)$ ,  $c_1$  e  $c_2$  são dados, respectivamente, pelas Eqs. (6.60)-(6.67). Ainda,  $u_1^1, u_1^2, u_1^3, u_1^4, v_1^1, v_1^2, v_1^3$  e  $v_1^4$  são soluções do sistema dado pelas Eqs. (6.32)-(6.34) e  $u_2^1, u_2^2, u_2^3, u_2^4, v_2^1, v_2^2, v_2^3$  e  $v_2^4$  são soluções do sistema dado pelas Eqs. (6.35)-(6.37).

Para completar a solução do problema, substitui-se a Eq. (6.81) na versão em ordenadas discreta da condição de contorno da Eq. (4.99) que é dada pela Eq. (6.68). Assim, encontra-se um sistema algébrico linear com  $4N$  equações e  $4N$  incógnitas,  $A_3, B_1,$



$B_3$  e  $\{A_j\}$  para  $j = 4, \dots, 4N$ , como segue

$$\begin{aligned}
& A_3 \left\{ \mathbf{R}^*(\xi_i) - \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{R}^*(-\xi_k) \right\} \\
& + B_1 \left\{ \mathbf{G}_4^*(\xi_i) - \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}_4^*(-\xi_k) \right\} \\
& + B_3 \left\{ \mathbf{K}_2^*(\xi_i) - \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{K}_2^*(-\xi_k) \right\} \\
& + \sum_{j=4}^{4N} A_j \left\{ \mathbf{\Phi}_+(\nu_j) - \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{\Phi}_-(\nu_j) \right\} \\
& = K \left\{ -\mathbf{J}_2^*(\xi_i) + \mathbf{D}^* \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{J}_2^*(-\xi_k) \right\}, \tag{6.83}
\end{aligned}$$

onde,  $\mathbf{R}^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes que são dadas pela Eq. (6.70),  $\mathbf{D}^*$  é uma matriz diagonal de dimensão  $4N \times 4N$  definida pela Eq. (6.71),  $\mathbf{F}^*(\xi_k, \xi)$  é uma matriz diagonal de dimensão  $4N \times 4N$  definida pela Eq. (6.72),  $\mathbf{G}_4^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo da Eq. (6.73),  $\mathbf{K}_2^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{K}_2(\xi) = \begin{bmatrix} -\frac{c_2}{c_1}(u_1^1 \xi + v_1^1 \xi^3 - \frac{3}{2} v_1^1 \xi) + u_2^1 \xi + v_2^1 \xi^3 - \frac{3}{2} v_2^1 \xi \\ -\frac{c_2}{c_1}(u_1^2 \xi + v_1^2 \xi^3 - \frac{3}{2} v_1^2 \xi) + u_2^2 \xi + v_2^2 \xi^3 - \frac{3}{2} v_2^2 \xi \\ -\frac{c_2}{c_1}(u_1^3 \xi + v_1^3 \xi^3 - \frac{3}{2} v_1^3 \xi) + u_2^3 \xi + v_2^3 \xi^3 - \frac{3}{2} v_2^3 \xi \\ -\frac{c_2}{c_1}(u_1^4 \xi + v_1^4 \xi^3 - \frac{3}{2} v_1^4 \xi) + u_2^4 \xi + v_2^4 \xi^3 - \frac{3}{2} v_2^4 \xi \end{bmatrix} \tag{6.84}$$

e  $\mathbf{J}_2^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{J}_2(\xi) = \frac{1}{c_1} \begin{bmatrix} (u_1^1 \xi + v_1^1 \xi^3 - \frac{3}{2} v_1^1 \xi) \\ (u_1^2 \xi + v_1^2 \xi^3 - \frac{3}{2} v_1^2 \xi) \\ (u_1^3 \xi + v_1^3 \xi^3 - \frac{3}{2} v_1^3 \xi) \\ (u_1^4 \xi + v_1^4 \xi^3 - \frac{3}{2} v_1^4 \xi) \end{bmatrix}. \tag{6.85}$$

Assim, após avaliar-se os coeficientes  $A_3$ ,  $B_1$ ,  $B_3$  e  $\{A_j\}$ , para  $j = 4, \dots, 4N$  através do sistema acima ( $4N \times 4N$ ) dado pela Eq. (6.83), a solução  $\mathbf{G}(y, \pm \xi_i)$  dada pela Eq. (6.81) fica, então, resolvida.

Agora, pode-se encontrar as quantidades de interesse em ordenadas discretas.

- Desvio de densidade  $\mathbf{N}(y)$ , com componentes  $N_\alpha(y)$  para  $\alpha = 1, 2$ , substitui-se a Eq. (6.81) na Eq. (4.104) para obter-se

$$\mathbf{N}(y) = - \begin{bmatrix} A_3 + \left(\frac{K}{c_1} - \frac{c_2}{c_1} B_3\right)y \\ A_3 + B_3 y \end{bmatrix} + \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-y/\nu_j} \mathbf{M}_1(\nu_j), \quad (6.86)$$

onde

$$\mathbf{M}_1(\nu_j) = \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (6.87)$$

- Desvio de temperatura  $\mathbf{T}(y)$ , com componentes  $T_\alpha(y)$  para  $\alpha = 1, 2$ , substitui-se a Eq. (6.81) na Eq. (4.105) para obter-se

$$\mathbf{T}(y) = (A_3 + Ky) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{3} \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-y/\nu_j} \mathbf{M}_2(\nu_j), \quad (6.88)$$

onde

$$\mathbf{M}_2(\nu_j) = \pi^{-1/2} \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k^2} \begin{bmatrix} \xi_k^2 - 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_k^2 - 1/2 & 1 \end{bmatrix} [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (6.89)$$

Ainda, para completar esta seção, chama-se

$$T_\alpha^*(y) = A_3 + Ky, \quad \text{para } \alpha = 1, 2 \quad (6.90)$$

e define-se o coeficiente de salto de temperatura  $\zeta_\alpha$ , para cada espécie, como

$$T_\alpha^*(0) = \zeta_\alpha \frac{d}{dy} T_\alpha^*(y) \Big|_{y=0}. \quad (6.91)$$

Assim, tem-se

$$\zeta_\alpha = A_3, \quad \alpha = 1, 2. \quad (6.92)$$

Sem perder a generalidade, escolhe-se  $K = 1$ . Assim, a Eq (6.76) que define o desvio de densidade quando

$$B_3 = \frac{1}{c_2} - \frac{c_1}{c_2} B_2, \quad (6.93)$$

resulta em

$$\mathbf{N}(y) = - \begin{bmatrix} A_3 + B_2 y \\ A_3 + \left(\frac{1}{c_2} - \frac{c_1}{c_2} B_2\right) y \end{bmatrix} + \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-y/\nu_j} \mathbf{M}_1(\nu_j) \quad (6.94)$$

e a Eq. (6.78) para o desvio de temperatura  $\mathbf{T}(y)$  resulta

$$\mathbf{T}(y) = (A_3 + y) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{3} \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-y/\nu_j} \mathbf{M}_2(\nu_j). \quad (6.95)$$

Ainda, quando

$$B_2 = \frac{1}{c_1} - \frac{c_2}{c_1} B_3, \quad (6.96)$$

tem-se para o desvio de densidade  $\mathbf{N}(y)$ , Eq. (6.88),

$$\mathbf{N}(y) = - \begin{bmatrix} A_3 + \left(\frac{1}{c_1} - \frac{c_2}{c_1} B_3\right) y \\ A_3 + B_3 y \end{bmatrix} + \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-y/\nu_j} \mathbf{M}_1(\nu_j), \quad (6.97)$$

para desvio de temperatura  $\mathbf{T}(y)$ , Eq. (6.88),

$$\mathbf{T}(y) = (A_3 + y) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{3} \sum_{j=4}^{4N} A_j e^{-y/\nu_j} \mathbf{M}_2(\nu_j) \quad (6.98)$$

e o coeficiente de salto de temperatura é dado pela Eq. (6.92). Observa-se, pela Eq. (6.95) ou pela Eq. (6.98) ou ainda, pela Eq. (6.90), que o coeficiente de salto de temperatura é o mesmo para ambas as espécies. Ainda, tem-se que  $\mathbf{M}_1(\nu_j)$  e  $\mathbf{M}_2(\nu_j)$  são dadas, respectivamente, pelas Eqs. (6.87) e (6.89).

### 6.1.2 Problema de Deslizamento Viscoso

No problema de autovalores para o problema de Deslizamento Viscoso, Eq. (6.14), tem-se um autovalor  $\lambda$  que vai para zero, assim, uma constante de separação vai para o infinito, então, deve-se desprezar esta constante de separação  $\nu_1$  na Eq. (6.20) e reescrever

a equação como

$$\mathbf{G}(y, \pm\xi_i) = A_1 \mathbf{G}_1 + B_1 \mathbf{G}_2(y, \pm\xi_i) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{y/\nu_j}], \quad (6.99)$$

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

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ s \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.100)$$

e

$$\mathbf{G}_2(y, \pm\xi) = \begin{bmatrix} \sigma_1 y \mp \xi \\ 0 \\ \sigma_1 s (y \mp \xi / \sigma_2) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.101)$$

são soluções exatas linearmente independentes da Eq. (6.2). Tem-se que  $s$  é dada pela Eq. (4.24).

Nesse problema, não há o termo não-homogêneo na Eq. (4.132) e a solução é construída da Eq. (6.99). Uma vez que não há esse termo, a solução diverge quando  $y$  tende ao infinito, mas ao mesmo tempo a velocidade da mistura satisfaz

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \frac{d}{dy} u(y) = K_p, \quad (6.102)$$

onde  $K_p$  é uma constante de normalização. Devido a condição dada pela Eq. (6.102) encontra-se, na Eq. (6.99),  $B_j = 0$ ,  $j = 2, \dots, 2N$  e

$$B_1 = K_p / \sigma_1. \quad (6.103)$$

Tem-se então a solução

$$\mathbf{G}(y, \pm\xi_i) = A_1 \mathbf{G}_1 + (K_p / \sigma_1) \mathbf{G}_2(y, \pm\xi_i) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j}], \quad (6.104)$$

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

Para completar a solução do problema, substitui-se a Eq. (6.104) na versão em ordenadas discreta da condição de contorno da Eq. (4.137) que é dada por

$$\mathbf{G}(0, \xi_i) = \mathbf{D} \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}(0, -\xi_k), \quad (6.105)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Sendo  $\mathbf{D}$  dada pela Eq. (4.138) e  $\mathbf{F}(\xi_k, \xi_i)$  dada pela Eq. (4.101). Com isto, obtém-se um sistema com  $4N$  equações algébricas lineares e  $4N$  incógnitas,  $\{A_j\}$  para  $j = 1, \dots, 4N$ , como segue

$$\begin{aligned} A_1 \left\{ \mathbf{G}_1^* - \mathbf{D}^{**} \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}_1^* \right\} \\ + \sum_{j=2}^{4N} A_j \left\{ \Phi_+(\nu_j) - \mathbf{D}^{**} \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \Phi_-(\nu_j) \right\} \\ = \mathbf{J}_1^{**}(\xi_i) + \mathbf{D}^{**} \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{J}_1^{**}(\xi_k), \end{aligned} \quad (6.106)$$

onde  $\mathbf{G}_1^*$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ s \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (6.107)$$

$\mathbf{D}^{**}$  é uma matriz diagonal de dimensão  $4N \times 4N$  dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{**} = \text{diag} \left\{ (1 - a_{t1}), (1 - a_{t1})^3, (1 - a_{t2}), (1 - a_{t2})^3, \dots, \right. \\ \left. (1 - a_{t1}), (1 - a_{t1})^3, (1 - a_{t2}), (1 - a_{t2})^3 \right\}, \end{aligned} \quad (6.108)$$

$\mathbf{J}_1^{**}(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo

$$\mathbf{J}_1(\xi) = k_p/\sigma_1 \begin{bmatrix} \xi \\ 0 \\ s\sigma_1\xi/\sigma_2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.109)$$

e  $\mathbf{F}^*(\xi_k, \xi)$  é uma matriz diagonal de dimensão  $4N \times 4N$  que é dada pela Eq. (6.72).

Após encontrar os coeficientes  $\{A_j\}$ , para  $j = 1, \dots, 4N$  através do sistema  $(4N \times 4N)$  dado acima pela Eq. (6.106), a solução  $\mathbf{G}(y, \pm\xi_i)$  dada pela Eq. (6.104) fica, então, resolvida.

Neste momento, encontra-se as grandezas físicas em ordenadas discretas.

- Perfil de Velocidade: substitui-se a Eq. (6.104) na Eq. (4.139) obtendo-se

$$v_1(y) = A_1 + K_p y + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{v,1}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} \quad (6.110)$$

e

$$v_2(y) = s(A_1 + K_p y) + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{v,2}(\nu_j) e^{-y/\nu_j}. \quad (6.111)$$

- Perfil da tensão de cisalhamento: substitui-se a Eq. (6.104) na Eq. (4.140) obtendo-se

$$p_1(y) = (-K_p/2\sigma_1) + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{p,1}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} \quad (6.112)$$

e

$$p_2(y) = s(-K_p/2\sigma_2) + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{p,2}(\nu_j) e^{-y/\nu_j}. \quad (6.113)$$

- Perfil de Fluxo de Calor: substitui-se a Eq. (6.104) na Eq. (4.141) obtendo-se, para  $\alpha = 1, 2$ , as expressões

$$q_\alpha(y) = \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{q,\alpha}(\nu_j) e^{-y/\nu_j}. \quad (6.114)$$

Aqui, tem-se

$$N_{v,\alpha}(\nu_j) = \mathbf{F}_\alpha^T \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (6.115)$$

$$N_{p,\alpha}(\nu_j) = \mathbf{F}_\alpha^T \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \xi_k [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (6.116)$$

e

$$N_{q,\alpha}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \mathbf{F}_{q,\alpha}^T(\xi_k) [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (6.117)$$

onde o sobrescrito  $T$  significa a operação transposta,

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (6.118)$$

$$\mathbf{F}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (6.119)$$

$$\mathbf{F}_{q,1} = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.120)$$

e

$$\mathbf{F}_{q,2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (6.121)$$

Fazendo  $v_{asy}$  denotar a parte assintótica (a parte que exclui o fator exponencial) de  $v(y)$  tem-se

$$v_{1,asy} = A_1 + K_p y \quad (6.122)$$

e

$$v_{2,asy} = s(A_1 + K_p y). \quad (6.123)$$

Usando a definição

$$\zeta_p = \frac{v_{asy}(0)}{v'_{asy}(0)}, \quad (6.124)$$

encontra-se o coeficiente de deslizamento viscoso

$$\zeta_p = \frac{A_1}{K_p}. \quad (6.125)$$

Sem perder a generalidade, escolhe-se  $K_p = 1$ . Assim, as Eqs. (6.110) e (6.111) que definem o perfil de velocidade resultam em

$$v_1(y) = A_1 + y + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{v,1}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} \quad (6.126)$$

e

$$v_2(y) = s(A_1 + y) + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{v,2}(\nu_j) e^{-y/\nu_j}. \quad (6.127)$$

As Eqs. (6.128) e (6.129) que definem o perfil da tensão de cisalhamento resultam em

$$p_1(y) = (-1/2\sigma_1) + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{p,1}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} \quad (6.128)$$

e

$$p_2(y) = s(-1/2\sigma_2) + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{p,2}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} \quad (6.129)$$

e o coeficiente de deslizamento viscoso, Eq. (6.130), resulta em

$$\zeta_p = A_1. \quad (6.130)$$

### 6.1.3 Problema de Deslizamento Térmico



A equação (4.146) que define o problema de Deslizamento Térmico não é homogênea, sendo assim, a solução geral é dada por

$$\mathbf{G}(y, \pm\xi_i) = \mathbf{G}^p(y, \pm\xi_i) + \mathbf{G}^h(y, \pm\xi_i). \quad (6.131)$$

Considerando-se  $K_\eta = 1$ , segundo Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2004a] encontra-se a solução particular  $\mathbf{G}^p(y, \pm\xi)$  como

$$\mathbf{G}^p(y, \pm\xi) = \begin{bmatrix} E(\xi^2 - 1/2 - s\omega) \\ 2E \\ F(\xi^2 - 1/2 - r\omega) \\ 2F \end{bmatrix} \quad (6.132)$$

com  $r$  e  $s$  dadas pela Eq. (4.24),  $\omega$  dada por

$$\omega = \frac{5r \nu_{1,2}^{(2)}}{4 \nu_{1,2}^{(1)}}. \quad (6.133)$$

Aqui,  $\nu_{1,2}^{(1)}$  e  $\nu_{1,2}^{(2)}$  são definidas, respectivamente, pelas Eqs. (4.31) e (4.32). Ainda, as constantes  $E$  e  $F$  são definidas pelo sistema de equações algébricas lineares escrito como

$$N \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1/\sigma_1 \\ 1/\sigma_2 \end{bmatrix}, \quad (6.134)$$

onde os elementos de  $N$  são dados por

$$n_{1,1} = -\phi_1 + \frac{5}{8} \frac{[\eta_{1,2}^{(2)}]^2}{\eta_{1,2}^{(1)}}, \quad (6.135)$$

$$n_{1,2} = \eta_{1,2}^{(6)} - \frac{5}{8} r^3 \frac{[\eta_{1,2}^{(2)}]^2}{\eta_{1,2}^{(1)}}, \quad (6.136)$$

$$n_{2,1} = \eta_{2,1}^{(6)} - \frac{5}{8} s^3 \frac{[\eta_{2,1}^{(2)}]^2}{\eta_{2,1}^{(1)}} \quad (6.137)$$

e

$$n_{2,2} = -\phi_2 + \frac{5}{8} \frac{[\eta_{2,1}^{(2)}]^2}{\eta_{2,1}^{(1)}} \quad (6.138)$$

com

$$\phi_1 = \eta_{1,1}^{(5)} + \eta_{1,2}^{(5)} - \eta_{1,1}^{(6)} \quad (6.139)$$

e

$$\phi_2 = \eta_{1,2}^{(5)} + \eta_{2,1}^{(5)} - \eta_{2,2}^{(6)}. \quad (6.140)$$

A solução da equação homogênea  $\mathbf{G}^h(y, \pm\xi_i)$ , em ordenadas discretas, é definida como

$$\mathbf{G}^h(y, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{y/\nu_j}], \quad (6.141)$$

para  $i = 1, \dots, N$ . No entanto, sabe-se que no problema de autovalores, Eq. (6.14), tem-se um autovalor  $\lambda$  que vai para zero, assim, uma constante de separação vai para o infinito, então, deve-se desprezar esta constante de separação  $\nu_1$  na Eq. (6.141) e reescrevê-la como

$$\mathbf{G}^h(y, \pm\xi_i) = A_1 \mathbf{G}_1 + B_1 \mathbf{G}_2(y, \pm\xi_i) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{y/\nu_j}], \quad (6.142)$$

onde  $\mathbf{G}_1$  e  $\mathbf{G}_2(y, \pm\xi_i)$  são definidas, respectivamente, pelas Eqs. (6.100) e (6.101).

Como a linearização foi feita sobre uma Maxwelliana local, necessita-se que a solução para a Eq. (4.146) seja limitada quando  $y$  tender para o infinito, sendo assim, escreve-se a solução homogênea como

$$\mathbf{G}^h(y, \pm\xi_i) = A_1 \mathbf{G}_1 + \sum_{j=2}^{4N} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j}. \quad (6.143)$$

Com isto, a solução geral fica assim definida

$$\mathbf{G}(y, \pm\xi_i) = \mathbf{G}^p(y, \pm\xi_i) + A_1 \mathbf{G}_1 + \sum_{j=2}^{4N} A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-y/\nu_j}. \quad (6.144)$$

Para completar a solução do problema, substitui-se a Eq. (6.144) na versão em ordenadas discretas da condição de contorno da Eq. (4.137) que é definida pela Eq. (6.105). Assim, obtém-se um sistema de equações algébricas lineares dado por

$$\begin{aligned}
A_1 \left\{ \mathbf{G}_1^* - \mathbf{D}^{**} \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}_1^* \right\} \\
+ \sum_{j=2}^{4N} A_j \left\{ \Phi_+(\nu_j) - \mathbf{D}^{**} \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \Phi_-(\nu_j) \right\} \\
= -\mathbf{L}_1^*(\xi_i) + \mathbf{D}^{**} \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{F}^*(\xi_k, \xi_i) \mathbf{L}_1^*(\xi_k), \tag{6.145}
\end{aligned}$$

onde  $\mathbf{G}_1^*$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes que são dadas pela Eq. (6.107),  $\mathbf{D}^{**}$  é uma matriz diagonal de dimensão  $4N \times 4N$  que é dada pela Eq. (6.108),  $\mathbf{F}^*(\xi_k, \xi)$  é uma matriz diagonal de dimensão  $4N \times 4N$  que é dada pela Eq. (6.72) e  $\mathbf{L}_1^*(\xi)$  é um vetor de dimensão  $4N \times 1$  definido por  $N$  componentes do tipo da Eq. (6.132). A partir do sistema acima, Eq. (6.145), encontra-se os coeficientes  $\{A_j\}$ , para  $j = 1, \dots, 4N$ . Assim, tem-se a solução  $\mathbf{G}(y, \pm\xi_i)$  dada pela Eq. (6.144).

Neste momento, encontra-se as grandezas físicas em ordenadas discretas.

- Perfil de Velocidade: substitui-se a Eq. (6.144) na Eq. (4.139) obtendo-se

$$v_1(y) = A_1 - s\omega E + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{v,1}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} \tag{6.146}$$

e

$$v_2(y) = sA_1 - r\omega F + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{v,2}(\nu_j) e^{-y/\nu_j}. \tag{6.147}$$

- Perfil da tensão de cisalhamento: substitui-se a Eq. (6.144) na Eq. (4.140) obtendo-se

$$p_\alpha(y) = \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{p,\alpha}(\nu_j) e^{-y/\nu_j}. \tag{6.148}$$

- Perfil de Fluxo de Calor: substitui-se a Eq. (6.144) na Eq. (4.141) obtendo-se

$$q_1(y) = \frac{5}{2}E + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{q,1}(\nu_j) e^{-y/\nu_j} \tag{6.149}$$

e

$$q_2(y) = \frac{5}{2}F + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{q,2}(\nu_j) e^{-y/\nu_j}, \quad (6.150)$$

onde ainda usa-se as definições dadas pelas Eqs. (6.115) - (6.121). O coeficiente de deslizamento térmico é dado por

$$\zeta_1 = A_1 - s\omega E \quad (6.151)$$

e

$$\zeta_2 = sA_1 - r\omega F. \quad (6.152)$$

Conforme apresentado neste capítulo, as grandezas físicas de interesse para os problemas de mistura de gases foram avaliadas através do método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO). A seguir, no capítulo 7, apresenta-se os resultados numéricos para os problemas propostos neste trabalho.

### ASPECTOS COMPUTACIONAIS E RESULTADOS NUMÉRICOS

#### 7.1 Considerações Gerais

A implementação computacional, para avaliar os resultados numéricos, foi desenvolvida através de programas em linguagem FORTRAN.

Para implementar as soluções, inicialmente, define-se o esquema de quadratura associado ao método de ordenadas discretas analítico (ADO). Neste sentido, para muitos problemas na dinâmica de gases rarefeitos, a utilização do procedimento a seguir, tem se mostrado adequado [Siewert, 2002a; Siewert, 2002c; Siewert, 2002d; Barichello et al., 2001; Camargo e Barichello, 2004; Cabrera e Barichello, 2004]: Objetivando-se calcular integrais no intervalo  $[0, \infty)$ , usa-se a transformação não-linear

$$u(\xi) = \exp\{-\xi\} \tag{7.1}$$

para mapear  $\xi \in [0, \infty)$  sob  $u \in [0, 1]$ , e então usa-se o esquema de quadratura de Gauss-Legendre [Burden e Faires, 1997] mapeado linearmente no intervalo  $[0, 1]$ .

Tendo definido o esquema de quadratura, o próximo passo é a determinação dos autovalores (constantes de separação) e autovetores definidos pela Eq. (5.18) para os problemas Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico, Fluxo de Couette, Deslizamento Térmico, Deslizamento Viscoso e Salto de Temperatura (modelo BGK), pela Eq. (5.177) para o problema de Salto de Temperatura (modelo S) e pela Eq. (6.14) para os problemas de mistura de gases (Salto de Temperatura, Deslizamento Viscoso e Deslizamento Térmico). Para isto, utilizou-se, neste

trabalho, a subrotina RG, do pacote matemático EISPACK [Smith et al., 1976]. A seguir, determina-se as funções elementares definidas pelas Eqs. (5.21) e (5.22) para os problemas Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico, Fluxo de Couette, Deslizamento Térmico, Deslizamento Viscoso e Salto de Temperatura (modelo BGK), pelas Eqs. (5.181) e (5.182) para o problema de Salto de Temperatura (modelo S) e pelas Eqs. (6.18) e (6.19) para os problemas de mistura de gases (Salto de Temperatura, Deslizamento Viscoso e Deslizamento Térmico). Para resolver o sistema algébrico linear que determina as constantes arbitrárias para a solução em ordenadas discretas, usa-se as subrotinas DGECO e DGESL do pacote matemático LINPACK [Dongarra et al., 1979], onde esses sistemas são dados por:

► Modelo BGK, condições de contorno de Cercignani-Lampis.

- Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico  $\rightarrow$  Eq. (5.52)  $\rightarrow A_j, j = 1, 2, \dots, 2N$ .
- Fluxo de Couette  $\rightarrow$  Eq. (5.70)  $\rightarrow B_1$  e  $A_j, j = 2, \dots, 2N$ .
- Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso  $\rightarrow$  Eq. (5.82)  $\rightarrow A_j, j = 1, 2, \dots, 2N$ .

► Modelo S, condições de contorno de Cercignani-Lampis.

- Fluxo de Couette  $\rightarrow$  Eq. (5.97)  $\rightarrow B_1$  e  $A_j, j = 2, \dots, 2N$ .
- Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso  $\rightarrow$  Eq. (5.110)  $\rightarrow A_j, j = 1, 2, \dots, 2N$ .
- Salto de Temperatura  $\rightarrow$  Eq. (5.203)  $\rightarrow A_1, B_1$  e  $A_j, j = 3, \dots, 2N$ .

► Modelo BGK, condições de contorno difuso-especular.

- Fluxo de Couette  $\rightarrow$  Eq. (5.124)  $\rightarrow B_1$  e  $A_j, j = 2, \dots, 2N$ .

► Modelo S, condições de contorno difuso-especular.

- Fluxo de Couette  $\rightarrow$  Eq. (5.127)  $\rightarrow B_1$  e  $A_j, j = 2, \dots, 2N$ .
- Salto de Temperatura  $\rightarrow$  Eq. (5.217)  $\rightarrow A_1, B_1$  e  $A_j, j = 3, \dots, 2N$ .

► Modelo McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis.

- Salto de Temperatura  $\rightarrow$  Eq. (6.69)  $\rightarrow A_3, B_1, B_2$  e  $A_j, j = 4, \dots, 4N$  ou Eq. (6.83)  $\rightarrow A_3, B_1, B_3$  e  $A_j, j = 4, \dots, 4N$ .
- Deslizamento Viscoso  $\rightarrow$  Eq. (6.106)  $\rightarrow A_j, j = 1, \dots, 4N$ .
- Deslizamento Térmico  $\rightarrow$  Eq. (6.145)  $\rightarrow A_j, j = 1, \dots, 4N$ .

Para resolver o sistema algébrico linear do problema de Salto de Temperatura, modelo BGK, condições de contorno de Cercignani-Lampis, Eq. (5.152), no sentido de mínimos quadrados, usa-se a subrotina DQRDC e DQRSL do pacote matemático LINPACK [Dongarra et al., 1979], para encontrar as constantes arbitrárias  $A_j, j = 1, \dots, 2N - 1$ .

Neste trabalho, usa-se as seguintes notações: BGK-DE e BGK-CL, para representar, respectivamente, o modelo BGK com condições de contorno (difuso-especular) de Maxwell e condições de contorno de Cercignani-Lampis. Analogamente, as notações utilizadas para o modelo S com condições de contorno (difuso-especular) de Maxwell e condições de contorno de Cercignani-Lampis são S-DE e S-CL, respectivamente. Ainda, LBE-DE e LBE-CL representam, respectivamente, a equação linearizada de Boltzmann com condições de contorno de Maxwell e condições de contorno de Cercignani-Lampis. Nas tabelas, as notações  $(-1)$ ,  $(-2)$ ,  $(1)$  e  $(2)$  representam, respectivamente,  $10^{-1}$ ,  $10^{-2}$ ,  $10^1$  e  $10^2$ .

A seguir, apresenta-se resultados numéricos para as quantidades de interesse para cada problema proposto neste trabalho e, quando disponíveis, comparações com outros trabalhos já existentes na literatura.

## 7.2 Resultados das Soluções em Ordenadas Discretas

A confiabilidade dos resultados numéricos obtidos neste trabalho foi considerada através dos seguintes aspectos:

- a convergência nos resultados apresentados (sempre mais que cinco dígitos) é obtida a partir de  $N = 60$  na implementação do número de pontos de quadratura.
- a comparação dos resultados numéricos obtidos com resultados de outros modelos encontrados na literatura é considerada satisfatória.
- a relação de Onsager  $Q_p = U_t$  [Loyalka, 1971; Sharipov, 1994a; Sharipov, 1994b; Cabrera, 2003] é verificada, conforme observa-se na comparação dos resultados das tabelas 7.5 e 7.9.

Para completar este trabalho, apresenta-se nas tabelas 7.1-7.41 alguns resultados numéricos para as grandezas físicas de interesse dos problemas relativos ao movimento de um gás rarefeito em um canal de placas paralelas (Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico e Fluxo de Couette) e no semi-espço (Salto de Temperatura, Deslizamento Térmico e Deslizamento Viscoso). Nas tabelas 7.42-7.57 tem-se resultados para as grandezas físicas relacionadas aos problemas que envolvem mistura de gases (Salto de Temperatura, Deslizamento Viscoso e Deslizamento Térmico).

### 7.2.1 Fluxo de Poiseuille

Na tabela 7.1, são dados os resultados numéricos para o perfil de velocidade para o caso baseado nas condições de contorno de Cercignani-Lampis usando o modelo S e o modelo BGK, com dois valores distintos para o coeficiente de acomodação normal ( $\alpha_n$ ) e largura do canal  $2a = 1$ , a fim de comparar com os resultados numéricos obtidos na Ref. [Siewert, 2002a]. Observa-se nesta tabela, que as grandezas coincidem em 1 dígito com os resultados obtidos no Modelo S [Siewert, 2002a]. Ainda, nesta tabela, são comparados os resultados numéricos obtidos neste trabalho com os resultados numéricos do perfil de velocidade obtidos para o Modelo BGK na Ref. [Camargo, 2003]. Nota-se que os resultados aproximam-se em 2 dígitos e que a concordância é, como se esperaria, ainda, maior quando o coeficiente de acomodação normal ( $\alpha_n$ ) aproxima-se de zero.

Na tabela 7.2 apresenta-se os resultados numéricos para o perfil de velocidade para um canal de largura  $2a = 2$ , com o objetivo de comparar com os resultados obtidos na Ref. [Barichello et al., 2001]. Nesta tabela, quando o coeficiente de acomodação normal ( $\alpha_n$ ) é próximo de zero, os resultados numéricos obtidos neste trabalho se aproximam em 2 dígitos dos resultados da Ref. [Barichello et al., 2001].

Na tabela 7.3 é apresentado resultados numéricos obtidos para a taxa de fluxo de partículas para comparar com os resultados das Refs. [Siewert, 2002a] e [Barichello et al., 2001]. Para esta tabela, os resultados obtidos concordam com os obtidos no modelo S [Siewert, 2002a] e no modelo BGK [Barichello et al., 2001]. Nesta tabela, observa-se que para uma variação expressiva do coeficiente de acomodação normal  $\alpha_n$ , tem-se, também, uma variação considerável na taxa de fluxo de partículas ( $U_p$ ).

Apresenta-se na tabela 7.4 os resultados para perfil de fluxo de calor e quando comparados com os resultados das Refs. [Siewert, 2002a] e [Camargo, 2003], mostram uma aproximação nos resultados considerados satisfatórios.

Os resultados numéricos para a taxa de fluxo de calor são apresentados na tabela 7.5 e comparados com o modelo S [Siewert, 2002a] e o modelo BGK [Camargo, 2003]. Observa-se que apenas em alguns valores de  $y/a$  tem-se 1 dígito de precisão dos resultados desse trabalho comparados com o modelo S [Siewert, 2002a] e o modelo BGK [Knackfuss e Barichello, 2003a].



A tabela 7.6 mostra os resultados numéricos obtidos neste trabalho para o perfil de velocidade e perfil de fluxo de calor para o problema de Fluxo de Poiseuille, usando o modelo BGK e condições de contorno de Cercignani-Lampis e compara com os resultados obtidos, diretamente, da equação linearizada de Boltzmann com as condições de contorno difuso-especular [Siewert, 2003b].

Tabela 7.1 – Fluxo de Poiseuille: perfil de velocidade  $u_p$ ,  $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y/a$	S-CL <sup>a</sup>	S-CL	S-DE <sup>a</sup>	BGK-CL	BGK-CL	BGK-DE <sup>b</sup>
	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.5$ ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	$\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$	$\alpha = \alpha_t$
0.0	-1.77759	-1.78245	-1.79254	-1.76674	-1.77900	-1.77883
0.1	-1.77490	-1.77922	-1.78999	-1.76410	-1.77649	-1.77631
0.2	-1.76680	-1.76949	-1.78228	-1.75614	-1.76889	-1.76873
0.3	-1.75314	-1.75310	-1.76930	-1.74272	-1.75609	-1.75506
0.4	-1.73368	-1.72978	-1.75081	-1.72359	-1.73786	-1.73776
0.5	-1.70799	-1.69908	-1.72642	-1.69834	-1.71382	-1.71376
0.6	-1.67544	-1.66028	-1.69555	-1.66633	-1.68337	-1.68335
0.7	-1.63494	-1.61219	-1.65717	-1.62648	-1.64551	-1.64554
0.8	-1.58454	-1.55263	-1.60946	-1.57685	-1.59845	-1.59850
0.9	-1.51992	-1.47666	-1.54827	-1.51314	-1.53814	-1.53812
1.0	-1.41902	-1.35862	-1.45199	-1.41346	-1.44388	-1.44292

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2002a]      Ref<sup>b</sup> = [Camargo, 2003]

Tabela 7.2 – Fluxo de Poiseuille: perfil de velocidade  $u_p$ ,  $2a = 2$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y/a$	BGK-CL	BGK-CL	BGK-DE <sup>a</sup>
	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$	$\alpha = \alpha_t$
0.0	-3.647834	-3.653676	-3.652222
0.1	-3.640383	-3.646286	-3.644836
0.2	-3.617928	-3.624011	-3.622577
0.3	-3.580145	-3.586524	-3.585117
0.4	-3.526441	-3.533223	-3.531852
0.5	-3.455844	-3.463117	-3.461789
0.6	-3.366792	-3.374602	-3.373321
0.7	-3.256671	-3.264970	-3.263728
0.8	-3.120647	-3.129168	-3.127917
0.9	-2.947672	-2.955481	-2.954020
1.0	-2.678901	-2.680443	-2.676407

Ref<sup>a</sup> = [Barichello et al., 2001]

Tabela 7.3 – Fluxo de Poiseuille: taxa de fluxo de partículas  $U_p$ ,  
 $\alpha_t = 0.5$ .

$2a$	S-CL <sup>a</sup>	S-DE <sup>a</sup>	BGK-CL	BGK-CL	BGK-DE <sup>b</sup>
	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$	$\alpha = \alpha_t$
1.0(-2)	-5.014219	-7.210007	-5.011569	-6.491368	-
2.0(-2)	-4.668298	-6.298270	-4.664196	-5.909004	-
3.0(-2)	-4.474712	-5.808061	-4.469520	-5.550575	-
4.0(-2)	-4.342079	-5.482139	-4.335982	-5.293481	-
5.0(-2)	-4.242237	-5.242765	-4.235359	-5.095217	-5.223297
7.0(-2)	-4.097278	-4.905303	-4.089094	-4.802865	-
9.0(-2)	-3.993879	-4.672567	-3.984625	-4.593247	-
1.0(-1)	-3.951889	-4.580089	-3.942165	-4.508329	-4.556407
3.0(-1)	-3.573656	-3.806140	-3.558721	-3.770488	-3.778472
5.0(-1)	-3.447263	-3.571767	-3.430280	-3.541575	-3.544371
7.0(-1)	-3.388287	-3.464010	-3.370373	-3.436681	-3.437669
9.0(-1)	-3.359841	-3.409028	-3.341530	-3.383783	-3.383887
1.0	-3.352483	-3.392769	-3.334088	-3.368405	-3.368218
3.0	-3.499791	-3.503677	-3.483401	-3.488489	-
3.5	-3.565466	-3.569734	-3.549687	-3.555699	-
4.0	-3.634859	-3.640058	-3.619647	-3.626974	-
5.0	-3.780735	-3.788425	-3.766531	-3.776820	-3.774402
6.0	-3.932453	-3.942771	-3.919108	-3.932276	-
7.0	-4.087720	-4.100498	-4.075113	-4.090881	-4.088108
9.0	-4.404578	-4.421533	-4.393176	-4.413231	-4.410190
1.0(1)	-4.565036	-4.583722	-4.554131	-4.575935	-
1.0(2)	-19.50102	-19.53951	-19.49650	-19.53765	-

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2002a]

Ref<sup>b</sup> = [Barichello et al., 2001]

Tabela 7.4 – Fluxo de Poiseuille: perfil de fluxo de calor  $q_p$ ,  $2a = 1$ ,  
 $\alpha_t = 0.5$ .

$y/a$	S-CL <sup>a</sup>	S-DE <sup>a</sup>	BGK-CL	BGK-CL	BGK-DE <sup>b</sup>
	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$	$\alpha = \alpha_t$
0.0	2.40629(-1)	2.76699(-1)	1.91854(-1)	2.09741(-1)	2.10798(-1)
0.1	2.39761(-1)	2.75924(-1)	1.91160(-1)	2.09107(-1)	2.10167(-1)
0.2	2.37134(-1)	2.73578(-1)	1.89055(-1)	2.07185(-1)	2.08251(-1)
0.3	2.32674(-1)	2.69595(-1)	1.85470(-1)	2.03911(-1)	2.04989(-1)
0.4	2.26248(-1)	2.63856(-1)	1.80281(-1)	1.99171(-1)	2.00264(-1)
0.5	2.17640(-1)	2.56164(-1)	1.73281(-1)	1.92774(-1)	1.93887(-1)
0.6	2.06511(-1)	2.46210(-1)	1.64148(-1)	1.84423(-1)	1.85559(-1)
0.7	1.92299(-1)	2.33480(-1)	1.52348(-1)	1.73622(-1)	1.74779(-1)
0.8	1.73992(-1)	2.17035(-1)	1.36911(-1)	1.59466(-1)	1.60635(-1)
0.9	1.49341(-1)	1.94755(-1)	1.15681(-1)	1.39934(-1)	1.41067(-1)
1.0	1.06894(-1)	1.55516(-1)	7.77162(-2)	1.04677(-1)	1.05346(-1)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2002a]    Ref<sup>b</sup> = [Camargo, 2003]

Tabela 7.5 – Fluxo de Poiseuille: taxa de fluxo de calor  $Q_p$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$2a$	S-CL <sup>a</sup>	S-DE <sup>a</sup>	BGK-CL	BGK-CL	BGK-DE <sup>b</sup>
	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$	
1.0(-2)	1.423000	2.770617	1.408981	2.352043	–
2.0(-2)	1.249702	2.311215	1.228046	2.038897	–
3.0(-2)	1.151878	2.060542	1.124381	1.841613	–
4.0(-2)	1.084182	1.891307	1.051862	1.697491	–
5.0(-2)	1.032667	1.765080	9.962174(-1)	1.584570	–
7.0(-2)	9.566156(-1)	1.583132	9.133327(-1)	1.414610	–
9.0(-2)	9.010436(-1)	1.453788	8.522460(-1)	1.289586	–
1.0(-1)	8.780440(-1)	1.401214	8.268522(-1)	1.238012	1.2664
3.0(-1)	6.471470(-1)	9.094469(-1)	5.712674(-1)	7.507963(-1)	–
5.0(-1)	5.444746(-1)	7.155058(-1)	4.607790(-1)	5.663927(-1)	–
7.0(-1)	4.786409(-1)	6.004731(-1)	3.926452(-1)	4.619360(-1)	–
9.0(-1)	4.307185(-1)	5.216112(-1)	3.448332(-1)	3.929745(-1)	–
1.0	4.110242(-1)	4.904286(-1)	3.256784(-1)	3.663468(-1)	3.6854(-1)
3.0	2.272407(-1)	2.349312(-1)	1.627443(-1)	1.629235(-1)	–
3.5	2.056379(-1)	2.091089(-1)	1.455576(-1)	1.438762(-1)	–
4.0	1.879290(-1)	1.885784(-1)	1.317739(-1)	1.289338(-1)	–
5.0	1.604938(-1)	1.578737(-1)	1.109510(-1)	1.069215(-1)	–
6.0	1.401296(-1)	1.359157(-1)	9.589976(-2)	9.142776(-2)	–
7.0	1.243653(-1)	1.193805(-1)	8.447597(-2)	7.989805(-2)	–
9.0	1.014953(-1)	9.606501(-2)	6.823850(-2)	6.384237(-2)	–
1.0(1)	9.292892(-2)	8.752351(-2)	6.225335(-2)	5.801937(-2)	5.8364(-2)
1.0(2)	1.065782(-2)	9.670226(-3)	6.945731(-3)	6.283500(-3)	–

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2002a]Ref<sup>b</sup> = [Camargo, 2003]

Tabela 7.6 – Fluxo de Poiseuille: perfil de velocidade  $u_p$  e perfil de fluxo de calor  $q_p$ ,  $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y/a$	LBE-DE <sup>a</sup>		BGK-CL	
	$\alpha = \alpha_t$		$\alpha_n = 0.5$	
	$u_p(y)$	$q_p(y)$	$u_p(y)$	$q_p(y)$
0.0	-1.7574	2.8922(-1)	-1.7667	1.9185(-1)
0.1	-1.7549	2.8860(-1)	-1.7641	1.9116(-1)
0.2	-1.7475	2.8673(-1)	-1.7561	1.8905(-1)
0.3	-1.7350	2.8355(-1)	-1.7427	1.8547(-1)
0.4	-1.7172	2.7899(-1)	-1.7236	1.8028(-1)
0.5	-1.6936	2.7288(-1)	-1.6983	1.7328(-1)
0.6	-1.6635	2.6501(-1)	-1.6663	1.6415(-1)
0.7	-1.6258	2.5499(-1)	-1.6265	1.5235(-1)
0.8	-1.5785	2.4212(-1)	-1.5768	1.3691(-1)
0.9	-1.5167	2.2482(-1)	-1.5131	1.1568(-1)
1.0	-1.4143	1.9460(-1)	-1.4135	7.7716(-2)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003b]

### 7.2.2 Problema *Creep* Térmico

Os resultados numéricos para o problema *Creep* Térmico são apresentados nas tabelas 7.7 - 7.13. Na tabela 7.7 apresenta-se os resultados para o perfil de velocidade baseados nas condições de contorno de Cercignani-Lampis com dois valores para o coeficiente de acomodação normal ( $\alpha_n$ ) e largura do canal  $2a = 1$ , também mostra-se resultados para uma formulação genérica no que se refere ao parâmetro de adimensionalização. Observa-se que, nesta tabela, os resultados obtidos pela derivação do modelo BGK apresentam concordância para alguns valores de  $y/a$  se comparados com os do modelo S [Siewert, 2002a] com o parâmetro de adimensionalização relacionado a viscosidade, ou seja, ( $\varepsilon = \varepsilon_p = 1$ ) e aproximam-se dos obtidos no modelo S, quando o parâmetro de adimensionalização é relacionado com a condutividade térmica ( $\varepsilon = \varepsilon_t = 3/2$ ).

Na tabela 7.8, compara-se os resultados obtidos com os existentes na Ref. [Barichello et al., 2001], com a largura do canal  $2a = 2$ . Nota-se a concordância de 1 a 2 dígitos entre eles.

Os resultados numéricos para a taxa de fluxo de partículas são apresentados na tabela 7.9. Aqui, nota-se que em alguns casos, tem-se uma concordância dos resultados entre o modelo BGK, desse trabalho, e o modelo S [Siewert, 2002a], considerada satisfatória. Na tabela 7.10, nota-se uma aproximação considerável do perfil de fluxo de calor, quando comparados com os do modelo S, com condições generalizadas e com condições de contorno difuso-especular [Siewert, 2002a], principalmente quando comparados com os do modelo S com o coeficiente de adimensionalização relacionado a condutividade térmica ( $\varepsilon = \varepsilon_t = 3/2$ ). Os resultados mostrados na tabela 7.11 são comparados com os resultados obtidos na Ref. [Camargo, 2003], novamente, observa-se uma aproximação nos resultados a medida que o coeficiente de acomodação normal ( $\alpha_n$ ) se aproxima de zero. Comparando as tabelas 7.5 e 7.9 verifica-se que os resultados mostram que a relação de Onsager [Loyalka, 1971; Sharipov, 1994a; Sharipov, 1994b; Cabrera, 2003],  $Q_p = U_t$ , é verificada.

Finalmente, resultados obtidos nesse trabalho e comparações com resultados da própria equação linearizada de Boltzmann são apresentados nas tabelas 7.12 e 7.13. Na tabela 7.13, a relação de Onsager, novamente, é verificada.

Tabela 7.7 – *Creep* Térmico: perfil de velocidade  $u_t$ ,  $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y/a$	S-CL <sup>a</sup>	S-CL	S-DE <sup>a</sup>	S-DE	BGK-CL	<i>BGK - CL</i>
	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha_n = 0.5$	( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ) $\alpha_n = 0.5$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha = \alpha_t$	( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ) $\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$
0.0	2.308391(-1)	1.919736(-1)	2.637228(-1)	2.072228(-1)	1.817431(-1)	1.964317(-1)
0.1	2.302050(-1)	1.914082(-1)	2.632585(-1)	2.068150(-1)	1.812832(-1)	1.961068(-1)
0.2	2.282867(-1)	1.896966(-1)	2.618543(-1)	2.055803(-1)	1.798898(-1)	1.951227(-1)
0.3	2.250342(-1)	1.867894(-1)	2.594743(-1)	2.034830(-1)	1.775206(-1)	1.934508(-1)
0.4	2.203564(-1)	1.825971(-1)	2.560532(-1)	2.004582(-1)	1.740981(-1)	1.910384(-1)
0.5	2.141065(-1)	1.769753(-1)	2.514854(-1)	1.964009(-1)	1.694970(-1)	1.878008(-1)
0.6	2.060530(-1)	1.696965(-1)	2.456037(-1)	1.911447(-1)	1.635198(-1)	1.836038(-1)
0.7	1.958173(-1)	1.603891(-1)	2.381337(-1)	1.844162(-1)	1.558426(-1)	1.782275(-1)
0.8	1.827199(-1)	1.483853(-1)	2.285787(-1)	1.757189(-1)	1.458836(-1)	1.712760(-1)
0.9	1.652605(-1)	1.322075(-1)	2.158304(-1)	1.639392(-1)	1.323593(-1)	1.618736(-1)
1.0	1.358984(-1)	1.043407(-1)	1.941861(-1)	1.432429(-1)	1.088709(-1)	1.456356(-1)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2002a]Tabela 7.8 – *Creep* Térmico: perfil de velocidade  $u_t$ ,  $2a = 2$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y/a$	BGK-CL	BGK-CL	BGK-DE <sup>a</sup>
	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$	$\alpha = \alpha_t$
0.0	2.426222(-1)	2.427729(-1)	2.439084(-1)
0.1	2.419790(-1)	2.423235(-1)	2.434617(-1)
0.2	2.400252(-1)	2.409587(-1)	2.421049(-1)
0.3	2.366844(-1)	2.386258(-1)	2.397858(-1)
0.4	2.318170(-1)	2.352282(-1)	2.364086(-1)
0.5	2.251967(-1)	2.306091(-1)	2.318176(-1)
0.6	2.164632(-1)	2.245185(-1)	2.257644(-1)
0.7	2.050225(-1)	2.165425(-1)	2.178377(-1)
0.8	1.897959(-1)	2.059261(-1)	2.072854(-1)
0.9	1.683751(-1)	1.909713(-1)	1.924101(-1)
1.0	1.284482(-1)	1.628985(-1)	1.643019(-1)

Ref<sup>a</sup> = [Barichello et al., 2001]



Tabela 7.9 – *Creep* Térmico: taxa de fluxo de partículas  $U_t$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$2a$	S-CL <sup>a</sup>	S-CL	BGK-CL	BGK-CL	S-DE <sup>a</sup>	S-DE
	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha_n = 0.5$	( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ) $\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha = \alpha_t$	( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ) $\alpha = \alpha_t$
1.0(-2)	1.423000	1.320745	1.408981	2.352043	2.770617	2.497349
2.0(-2)	1.249702	1.151878	1.228046	2.038897	2.311215	2.060542
3.0(-2)	1.151878	1.056882	1.124381	1.841613	2.060542	1.824128
4.0(-2)	1.084182	9.912180(-1)	1.051862	1.697491	1.891307	1.665237
5.0(-2)	1.032667	9.412572(-1)	9.962175(-1)	1.584570	1.765080	1.547068
7.0(-2)	9.566156(-1)	8.674508(-1)	9.133328(-1)	1.414610	1.583132	1.377196
9.0(-2)	9.010436(-1)	8.134370(-1)	8.522460(-1)	1.289586	1.453788	1.256738
1.0(-1)	8.780440(-1)	7.910534(-1)	8.268522(-1)	1.238012	1.401214	1.207846
3.0(-1)	6.471470(-1)	5.654077(-1)	5.712674(-1)	7.507963(-1)	9.094469(-1)	7.536494(-1)
5.0(-1)	5.444746(-1)	4.653643(-1)	4.607790(-1)	5.663927(-1)	7.155058(-1)	5.782057(-1)
7.0(-1)	4.786409(-1)	4.019945(-1)	3.926452(-1)	4.619360(-1)	6.004731(-1)	4.763739(-1)
9.0(-1)	4.307185(-1)	3.565106(-1)	3.448332(-1)	3.929745(-1)	5.216112(-1)	4.079183(-1)
1.0	4.110242(-1)	3.380171(-1)	3.256784(-1)	3.663468(-1)	4.904286(-1)	3.812105(-1)
3.0	2.272407(-1)	1.731066(-1)	1.627443(-1)	1.629235(-1)	2.349312(-1)	1.718261(-1)
3.5	2.056379(-1)	1.548620(-1)	1.455576(-1)	1.438762(-1)	2.091089(-1)	1.517318(-1)
4.0	1.879290(-1)	1.401296(-1)	1.317739(-1)	1.289338(-1)	1.885784(-1)	1.359157(-1)
5.0	1.604938(-1)	1.177398(-1)	1.109510(-1)	1.069215(-1)	1.578737(-1)	1.125463(-1)
6.0	1.401296(-1)	1.014953(-1)	9.589977(-2)	9.142776(-2)	1.359157(-1)	9.606501(-2)
7.0	1.243653(-1)	8.916100(-2)	8.447597(-2)	7.989805(-2)	1.193805(-1)	8.379770(-2)
9.0	1.014953(-1)	7.167271(-2)	6.823851(-2)	6.384237(-2)	9.606501(-2)	6.673920(-2)
1.0(1)	9.292892(-2)	6.525259(-2)	6.225335(-2)	5.801937(-2)	8.752351(-2)	6.056759(-2)
1.0(2)	1.065782(-2)	7.139401(-3)	6.945732(-3)	6.283500(-3)	9.670226(-3)	6.469820(-3)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2002a]

Tabela 7.10 – *Creep* Térmico: perfil de fluxo de calor  $q_t$ ,  $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y/a$	S-CL <sup>a</sup>	S-CL	S-DE <sup>a</sup>	S-DE	BGK-CL	BGK-CL
	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha_n = 0.5$	( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ) $\alpha_n = 0.5$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha = \alpha_t$	( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ) $\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$
0.0	-1.054961	-8.406252(-1)	-1.288279	-9.699612(-1)	-8.324107(-1)	-8.581441(-1)
0.1	-1.052822	-8.388598(-1)	-1.286901	-9.688383(-1)	-8.308898(-1)	-8.567083(-1)
0.2	-1.046342	-8.335008(-1)	-1.282727	-9.654309(-1)	-8.262728(-1)	-8.523496(-1)
0.3	-1.035317	-8.243511(-1)	-1.275633	-9.596181(-1)	-8.183888(-1)	-8.449075(-1)
0.4	-1.019378	-8.110515(-1)	-1.265393	-9.511789(-1)	-8.069264(-1)	-8.340890(-1)
0.5	-9.979281(-1)	-7.930222(-1)	-1.251644	-9.397570(-1)	-7.913820(-1)	-8.194206(-1)
0.6	-9.700305(-1)	-7.693464(-1)	-1.233812	-9.247884(-1)	-7.709593(-1)	-8.001538(-1)
0.7	-9.341567(-1)	-7.385250(-1)	-1.210963	-9.053494(-1)	-7.443553(-1)	-7.750640(-1)
0.8	-8.875782(-1)	-6.978693(-1)	-1.181426	-8.797795(-1)	-7.092343(-1)	-7.419569(-1)
0.9	-8.243358(-1)	-6.414761(-1)	-1.141540	-8.444161(-1)	-6.604821(-1)	-6.960297(-1)
1.0	-7.153601(-1)	-5.403023(-1)	-1.073270	-7.810084(-1)	-5.732521(-1)	-6.139726(-1)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2002a]Tabela 7.11 – *Creep* Térmico: perfil de fluxo de calor  $q_t$ ,  $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 0.1$ .

$y/a$	BGK-DE <sup>a</sup>	BGK-CL	BGK-CL
	$\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$
0.0	-1.17929	-1.04123	-1.11177
0.1	-1.17908	-1.04057	-1.11129
0.2	-1.17847	-1.03857	-1.10986
0.3	-1.17743	-1.03516	-1.10743
0.4	-1.17592	-1.03020	-1.10389
0.5	-1.17388	-1.02350	-1.09911
0.6	-1.17121	-1.01472	-1.09285
0.7	-1.16778	-1.00332	-1.08474
0.8	-1.16329	-9.88329(-1)	-1.07412
0.9	-1.15715	-9.67637(-1)	-1.05951
1.0	-1.14642	-9.30924(-1)	-1.03384

Ref<sup>a</sup> = [Camargo, 2003]

Tabela 7.12 – *Creep* Térmico: perfil de velocidade  $u_t$  e perfil de fluxo de calor  $q_t$ ,  $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y/a$	LBE-DE <sup>a</sup>		BGK-CL	
	$\alpha = \alpha_t$		$\alpha_n = 0.5$	
	$u_t(y)$	$q_t(y)$	$u_t(y)$	$q_t(y)$
0.0	2.8169(-1)	-1.3193	1.8174(-1)	-8.3241(-1)
0.1	2.8126(-1)	-1.3178	1.8128(-1)	-8.3089(-1)
0.2	2.7996(-1)	-1.3132	1.7989(-1)	-8.2627(-1)
0.3	2.7775(-1)	-1.3054	1.7752(-1)	-8.1839(-1)
0.4	2.7457(-1)	-1.2942	1.7410(-1)	-8.0693(-1)
0.5	2.7032(-1)	-1.2790	1.6950(-1)	-7.9138(-1)
0.6	2.6484(-1)	-1.2593	1.6352(-1)	-7.7096(-1)
0.7	2.5785(-1)	-1.2340	1.5584(-1)	-7.4435(-1)
0.8	2.4886(-1)	-1.2011	1.4588(-1)	-7.0923(-1)
0.9	2.3677(-1)	-1.1561	1.3236(-1)	-6.6048(-1)
1.0	2.1573(-1)	-1.0763	1.0887(-1)	-5.7325(-1)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003b]

Tabela 7.13 – Poiseuille e *Creep* Térmico: comparação de resultados,  $\alpha = \alpha_t = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

$2a$	$U_p$		$Q_p = U_t$		$Q_t$	
	LBE-DE <sup>a</sup>	BGK-CL	LBE-DE <sup>a</sup>	BGK-CL	LBE-DE <sup>a</sup>	BGK-CL
0.10	-4.3868	-3.9421	1.5680	8.2685(-1)	-7.7797	-4.3580
1.00	-3.3264	-3.3341	5.2876(-1)	3.2568(-1)	-2.5138	-1.5347
10.0	-4.5346	-4.5541	8.4299(-2)	6.2253(-1)	-3.6167(-1)	-2.3609(-1)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003b]

### 7.2.3 Fluxo de Couette

Para gerar os resultados mostrados nas tabelas 7.14 - 7.22, para o Fluxo de Couette, considera-se a velocidade das placas  $u_w = 1$ .

Nas tabelas 7.14 e 7.15, os resultados para o perfil de velocidade e o perfil de fluxo de calor, encontrados neste trabalho, para o caso do modelo BGK e condições de contorno de Cercignani-Lampis, são comparados com resultados encontrados nas Refs. [Cabrera, 2003; Siewert, 2002c]. Os resultados para a componente do tensor de pressão é apresentado nas tabelas 7.16 e 7.17 e comparados com os resultados encontrados nas Refs. [Barichello et al., 2001; Cabrera, 2003]. Na tabela 7.17, apresenta-se os resultados da componente do tensor de pressão para as quatro variações do Fluxo de Couette apresentadas neste trabalho, ou seja, modelo BGK e modelo S com condições de contorno difuso-especular e Cercignani-Lampis, observa-se, nesta tabela, que quando  $\alpha_t = 1.0$ , o modelo de Cercignani-Lampis recai no modelo de Maxwell considerando  $\alpha = 1.0$ , isto é, o coeficiente  $\alpha_n$  não influencia na interação gás-superfície. Aqui, novamente, ressalta-se que a formulação matemática apresentada neste trabalho, para o Fluxo de Couette, é diferente da formulação apresentada nas Refs [Barichello et al., 2001; Siewert, 2002c; Camargo, 2003; Cabrera, 2003]. Utilizando-se resultados apresentados nas Refs. [Siewert, 2002c; Cabrera, 2003] para os modelos BGK e S, compara-se nas tabelas 7.18 e 7.19, respectivamente, a taxa de fluxo de partículas e a taxa de fluxo de calor para diferentes coeficientes de acomodação da energia  $\alpha_n$ .

Na tabela 7.20 apresenta-se os resultados para o perfil de velocidade e perfil de fluxo de calor, usando-se o modelo BGK com condições de contorno de Cercignani-Lampis. Observa-se que para pequenos valores do coeficiente de acomodação da energia  $\alpha_n$ , há uma aproximação nos resultados quando é usada a condição de Maxwell.

Nas tabelas 7.21 e 7.22, apresenta-se os resultados encontrados neste trabalho para as grandezas físicas, perfil de velocidade e perfil de fluxo de calor, podendo, assim, comparar entre si, os resultados encontrados usando os dois modelos ( BGK e S) e as duas condições de contorno (Maxwell e Cercignani-Lampis).

Tabela 7.14 – Fluxo de Couette com  $u_w = 1$ : perfil de velocidade  $u_c$ ,  
 $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

	BGK-CL	BGK-CL	S-CL	S-DE <sup>a</sup>	CES-DE <sup>b</sup>
	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha_n = 0.5$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha = \alpha_t$	$\alpha = \alpha_t$
$y/a$					
0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.1	-2.082788(-2)	-2.180447(-2)	-2.093477(-2)	-2.19712(-2)	-2.10475(-2)
0.2	-4.173979(-2)	-4.372158(-2)	-4.195212(-2)	-4.40546(-2)	-4.22286(-2)
0.3	-6.282658(-2)	-6.587207(-2)	-6.314130(-2)	-6.63718(-2)	-6.36889(-2)
0.4	-8.419431(-2)	-8.839885(-2)	-8.460648(-2)	-8.90658(-2)	-8.56013(-2)
0.5	-1.059769(-1)	-1.114833(-1)	-1.064793(-1)	-1.12319(-1)	-1.08189(-1)
0.6	-1.283585(-1)	-1.353764(-1)	-1.289403(-1)	-1.36383(-1)	-1.31765(-1)
0.7	-1.516183(-1)	-1.604616(-1)	-1.522640(-1)	-1.61646(-1)	-1.56821(-1)
0.8	-1.762423(-1)	-1.874103(-1)	-1.769277(-1)	-1.88791(-1)	-1.84230(-1)
0.9	-2.033003(-1)	-2.177064(-1)	-2.039830(-1)	-2.19337(-1)	-2.15983(-1)
1.0	-2.383022(-1)	-2.589842(-1)	-2.388559(-1)	-2.61279(-1)	-2.62841(-1)

Ref<sup>a</sup> = [Cabrera, 2003]    Ref<sup>b</sup> = [Siewert, 2002c]

Tabela 7.15 – Fluxo de Couette com  $u_w = 1$ : perfil de fluxo de calor  
 $q_c$ ,  $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

	BGK-CL	BGK-CL	S-CL	S-DE <sup>a</sup>	CES-DE <sup>b</sup>
	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.01$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha_n = 0.5$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha = \alpha_t$	$\alpha = \alpha_t$
$y/a$					
0.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.1	2.747698(-3)	3.290843(-3)	3.172930(-3)	3.86036(-3)	3.25143(-3)
0.2	5.537417(-3)	6.637746(-3)	6.383073(-3)	7.77360(-3)	6.53651(-3)
0.3	8.414572(-3)	1.010147(-2)	9.6705149(-3)	1.17969(-2)	9.89106(-3)
0.4	1.143220(-2)	1.375334(-2)	1.308180(-2)	1.59974(-2)	1.33558(-2)
0.5	1.465727(-2)	1.768404(-2)	1.667532(-2)	2.04597(-2)	1.69806(-2)
0.6	1.818182(-2)	2.201906(-2)	2.053075(-2)	2.53011(-2)	2.08311(-2)
0.7	2.214549(-2)	2.695015(-2)	2.476839(-2)	3.07006(-2)	2.50037(-2)
0.8	2.679122(-2)	3.281295(-2)	2.959705(-2)	3.69732(-2)	2.96616(-2)
0.9	3.265398(-2)	4.034949(-2)	3.547748(-2)	4.48226(-2)	3.51587(-2)
1.0	4.248871(-2)	5.337687(-2)	4.481701(-2)	5.80004(-2)	4.33653(-2)

Ref<sup>a</sup> = [Cabrera, 2003]    Ref<sup>b</sup> = [Siewert, 2002c]

Tabela 7.16 – Fluxo de Couette com  $u_w = 1$ : componente do tensor de pressão  $P_{xy}$ ,  $\alpha_t = 1.0$ .

	BGK-CL	BGK-DE <sup>a</sup>	S-CL	S-DE <sup>b</sup>	BGK-CL
	$\alpha_n = 0.001$	$\alpha = \alpha_t$	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$ $\alpha_n = 0.5$	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$ $\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$
$2a$					
1.0(-2)	9.913980(-1)	9.9139801(-1)	9.913980(-1)	9.9139796(-1)	9.913980(-1)
2.0(-2)	9.831755(-1)	9.8317550(-1)	9.811753(-1)	9.8117529(-1)	9.831755(-1)
1.0(-1)	9.257968(-1)	9.2579682(-1)	9.257894(-1)	9.257894(-1)	9.257968(-1)
1.0	6.007292(-1)	6.0072919(-1)	6.005436(-1)	6.005436(-1)	6.007292(-1)
2.0	4.436467(-1)	4.4364669(-1)	4.434197(-1)	4.4341971(-1)	4.436467(-1)
3.0	3.535337(-1)	3.5353372(-1)	3.533315(-1)	3.5333149(-1)	3.535337(-1)
1.0(1)	1.473125(-1)	1.4731246(-1)	1.472598(-1)	1.472598(-1)	1.473125(-1)
2.0(1)	8.044769(-2)	8.0447692(-2)	8.043177(-2)	8.0431772(-2)	8.044769(-2)
1.0(3)	1.768859(-3)	1.7688589(-3)	1.768851(-2)	1.768851(-2)	1.768859(-3)
1.0(7)	1.772453(-7)	1.7724535(-7)	1.772453(-7)	1.772453(-7)	1.772453(-7)

Ref<sup>a</sup> = [Barichello et al., 2001]    Ref<sup>b</sup> = [Cabrera, 2003]

Tabela 7.17 – Fluxo de Couette com  $u_w = 1$ : componente do tensor de pressão  $P_{xy}$ ,  $\alpha_t = 1.0$ .

	BGK-CL	BGK-DE	S-CL	S-DE	BGK-CL
	$\alpha_n = 0.001$	$\alpha = \alpha_t$	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$ $\alpha_n = 0.5$	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$ $\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$
$2a$					
1.0(-2)	9.913980(-1)	9.913980(-1)	9.913980(-1)	9.913980(-1)	9.913980(-1)
2.0(-2)	9.831755(-1)	9.831755(-1)	9.811753(-1)	9.811753(-1)	9.831755(-1)
1.0(-1)	9.257968(-1)	9.257968(-1)	9.257894(-1)	9.257894(-1)	9.257968(-1)
1.0	6.007292(-1)	6.007292(-1)	6.005436(-1)	6.005436(-1)	6.007292(-1)
2.0	4.436467(-1)	4.436467(-1)	4.434197(-1)	4.434197(-1)	4.436467(-1)
3.0	3.535337(-1)	3.535337(-1)	3.533315(-1)	3.533315(-1)	3.535337(-1)
1.0(1)	1.473125(-1)	1.473125(-1)	1.472598(-1)	1.472598(-1)	1.473125(-1)
2.0(1)	8.044769(-2)	8.044769(-2)	8.043177(-2)	8.043177(-2)	8.044769(-2)
1.0(3)	1.768859(-3)	1.768859(-3)	1.768851(-2)	1.768851(-2)	1.768859(-3)
1.0(7)	1.772453(-7)	1.772453(-7)	1.772453(-7)	1.772453(-7)	1.772453(-7)

Tabela 7.18 – Fluxo de Couette com  $u_w = 1$ : taxa de fluxo de partículas  $U_c$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

	BGK-CL	BGK-DE <sup>a</sup>	S-CL	S-DE <sup>b</sup>	BGK-CL
	$\alpha_n = 0.001$	$\alpha = \alpha_t$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha_n = 0.5$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$
<i>2a</i>					
1.0(-1)	-2.643973(-1)	-2.74926(-1)	-2.447809(-1)	-2.75239(-1)	-2.445556(-1)
1.0	-1.056692(-1)	-1.16120(-1)	-1.096461(-1)	-1.16739(-1)	-1.092005(-1)
1.0(1)	-2.764398(-2)	-3.26636(-2)	-3.270622(-2)	-3.27074(-2)	-3.267069(-2)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2002c]    Ref<sup>b</sup> = [Cabrera, 2003]

Tabela 7.19 – Fluxo de Couette com  $u_w = 1$ : taxa de fluxo de calor  $Q_c$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

	BGK-CL	BGK-DE <sup>a</sup>	S-CL	S-DE <sup>b</sup>	BGK-CL
	$\alpha_n = 0.001$	$\alpha = \alpha_t$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha_n = 0.5$	( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$
<i>2a</i>					
1.0(-1)	9.980679(-2)	9.17172(-2)	7.750149(-2)	9.31118(-2)	7.649576(-2)
1.0	2.610433(-2)	1.99715(-2)	1.809911(-2)	2.25189(-2)	1.626907(-2)
1.0(1)	9.127214(-4)	4.29861(-4)	4.890106(-4)	6.09261(-4)	3.537455(-4)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2002c]    Ref<sup>b</sup> = [Cabrera, 2003]

Tabela 7.20 – Fluxo de Couette com  $u_w = 1$ : perfil de velocidade  $u_c$  e perfil de fluxo de calor  $q_c$ ,  $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 1.0$ .

	$u_c$		$q_c$	
	BGK-CL	BGK-DE <sup>a</sup>	BGK-CL	BGK-DE <sup>a</sup>
	$\alpha_n = 0.001$	$\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.001$	$\alpha = \alpha_t$
<i>y/a</i>				
0.0	0.00	0.00	0.00	0.00
0.1	-4.444980(-2)	-4.44498(-2)	5.278643(-3)	5.27864(-3)
0.2	-8.906388(-2)	-8.90639(-2)	1.063943(-2)	1.06394(-2)
0.3	-1.340199(-1)	-1.34020(-1)	1.617119(-2)	1.61712(-2)
0.4	-1.795258(-1)	-1.79526(-1)	2.197786(-2)	2.19779(-2)
0.5	-2.258445(-1)	-2.25845(-1)	2.819096(-2)	2.81910(-2)
0.6	-2.733383(-1)	-2.73338(-1)	3.499163(-2)	3.49916(-2)
0.7	-3.225586(-1)	-3.22559(-1)	4.265551(-2)	4.26555(-2)
0.8	-3.744672(-1)	-3.74467(-1)	5.166358(-2)	5.16636(-2)
0.9	-4.311896(-1)	-4.31190(-1)	6.307849(-2)	6.30785(-2)
1.0	-5.037226(-1)	-5.03723(-1)	8.239876(-2)	8.23988(-2)

Ref<sup>a</sup> = [Camargo, 2003]

Tabela 7.21 – Fluxo de Couette com  $u_w = 1$ : perfil de velocidade  $u_c$ ,  
 $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 1.0$ ,  $N = 60$ .

	BGK-DE	BGK-CL	S-DE	S-CL
	$\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$ $\alpha = \alpha_t$	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$ $\alpha_n = 0.5$
$y/a$				
0.0	0.00	0.00	0.00	0.00
0.1	-4.444980(-2)	-4.444980(-2)	-4.464054(-2)	-4.464054(-2)
0.2	-8.906388(-2)	-8.906388(-2)	-8.944244(-2)	-8.944244(-2)
0.3	-1.340199(-1)	-1.340199(-1)	-1.345802(-1)	-1.345802(-1)
0.4	-1.795258(-1)	-1.795258(-1)	-1.802581(-1)	-1.802581(-1)
0.5	-2.258445(-1)	-2.258445(-1)	-2.267341(-1)	-2.267341(-1)
0.6	-2.733383(-1)	-2.733383(-1)	-2.743641(-1)	-2.743641(-1)
0.7	-3.225586(-1)	-3.225586(-1)	-3.236894(-1)	-3.236894(-1)
0.8	-3.744672(-1)	-3.744672(-1)	-3.756547(-1)	-3.756547(-1)
0.9	-4.311896(-1)	-4.311896(-1)	-4.323489(-1)	-4.323489(-1)
1.0	-5.037226(-1)	-5.037226(-1)	-5.045992(-1)	-5.045992(-1)

Tabela 7.22 – Fluxo de Couette com  $u_w = 1$ : perfil de fluxo de calor  
 $q_c$ ,  $2a = 1$ ,  $\alpha_t = 1.0$ .

	S-DE	S-CL	BGK-DE	BGK-CL
	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$ $\alpha = \alpha_t$	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$ $\alpha_n = 0.5$	$\alpha = \alpha_t$	$\alpha_n = 0.5$
$y/a$				
0.0	0.00	0.00	0.00	0.00
0.1	6.075741(-3)	6.075741(-3)	5.278643(-3)	5.278643(-3)
0.2	1.222416(-2)	1.222416(-2)	1.063943(-2)	1.063943(-2)
0.3	1.852364(-2)	1.852364(-2)	1.617119(-2)	1.617119(-2)
0.4	2.506532(-2)	2.506532(-2)	2.197786(-2)	2.197786(-2)
0.5	3.196381(-2)	3.196381(-2)	2.819096(-2)	2.819096(-2)
0.6	3.937594(-2)	3.937594(-2)	3.499163(-2)	3.499163(-2)
0.7	4.753920(-2)	4.753920(-2)	4.265551(-2)	4.265551(-2)
0.8	5.686717(-2)	5.686717(-2)	5.166358(-2)	5.166358(-2)
0.9	6.827561(-2)	6.827561(-2)	6.307849(-2)	6.307849(-2)
1.0	8.657217(-2)	8.657217(-2)	8.239876(-2)	8.239876(-2)

A seguir, apresenta-se figuras relacionadas com os problemas Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico e Fluxo de Couette. Nas figuras 7.1 - 7.4 mostra-se a influência da largura do canal no perfil de velocidade e no perfil de fluxo de calor. Constata-se, a partir da observação das figuras 7.5 - 7.16, a influência dos coeficientes de acomodação  $\alpha_n$  e  $\alpha_t$  na interação gás-



parede e, conseqüentemente, nas grandezas físicas dos problemas. Comparando as figuras 7.5 e 7.6, 7.11 e 7.12, 7.13 e 7.14, 7.15 e 7.16, observa-se que a influência do coeficiente de acomodação tangencial  $\alpha_t$  é mais expressiva do que a influência do coeficiente de acomodação normal  $\alpha_n$ , na interação gás-parede. Por outro lado, as figuras 7.7 e 7.8, 7.9 e 7.10 mostram que a influência do coeficiente de acomodação tangencial  $\alpha_t$  é semelhante a influência do coeficiente de acomodação normal  $\alpha_n$  na interação gás-parede.

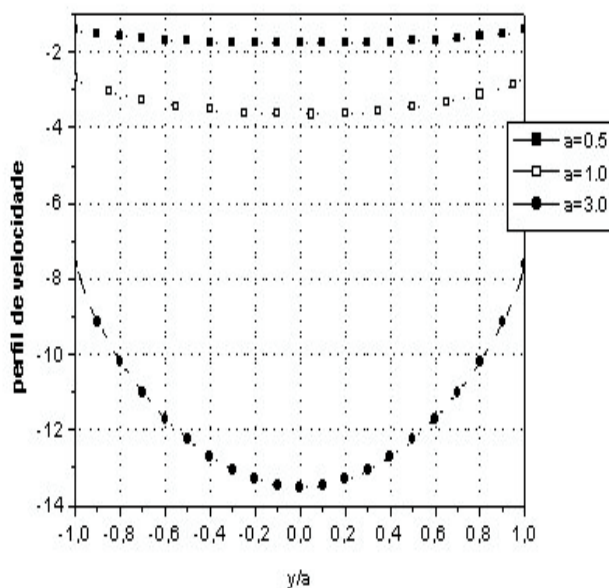


Figura 7.1 – Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade,  $\alpha_t = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

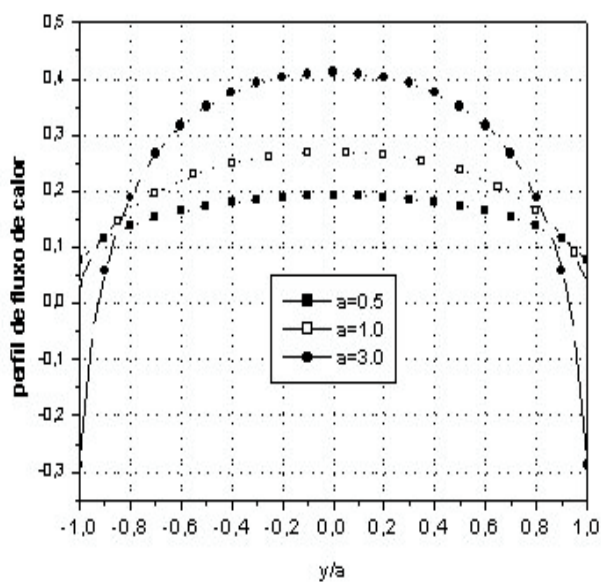


Figura 7.2 – Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor,  $\alpha_t = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

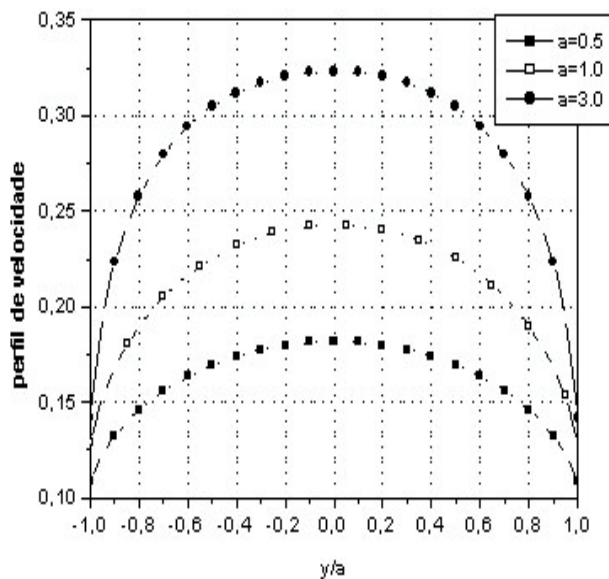


Figura 7.3 – *Creep* Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade,  $\alpha_t = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

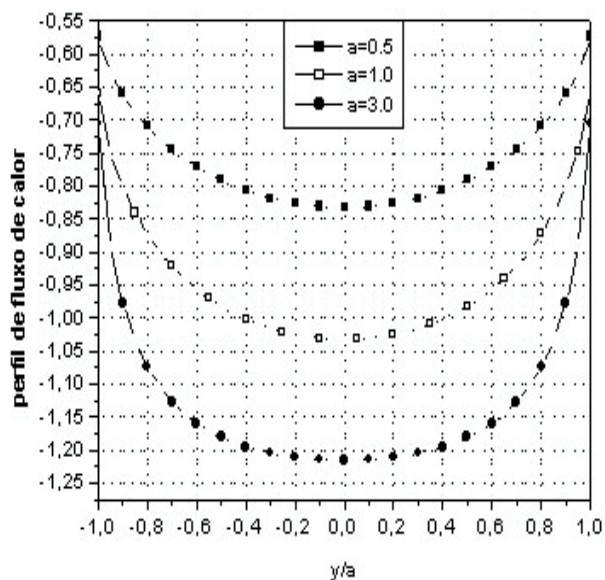


Figura 7.4 – *Creep* Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor,  $\alpha_t = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

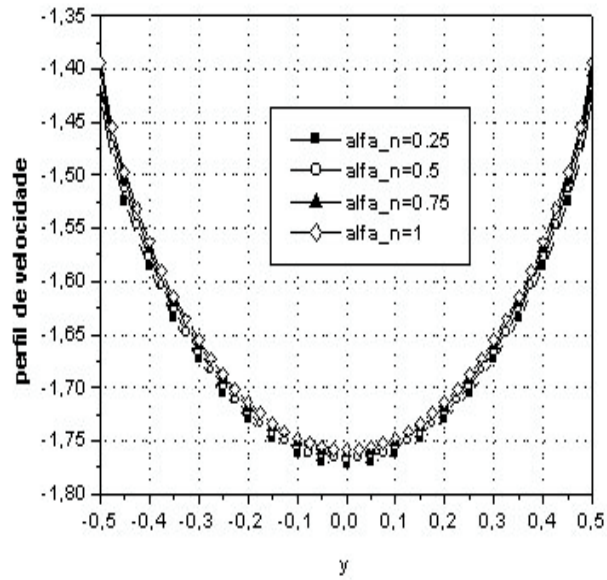


Figura 7.5 – Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade,  $a = 0.5$  e  $\alpha_t = 0.5$ .

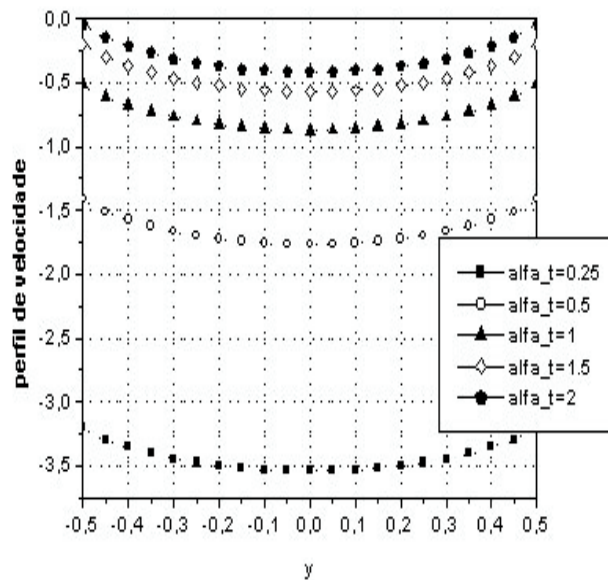


Figura 7.6 – Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade,  $a = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

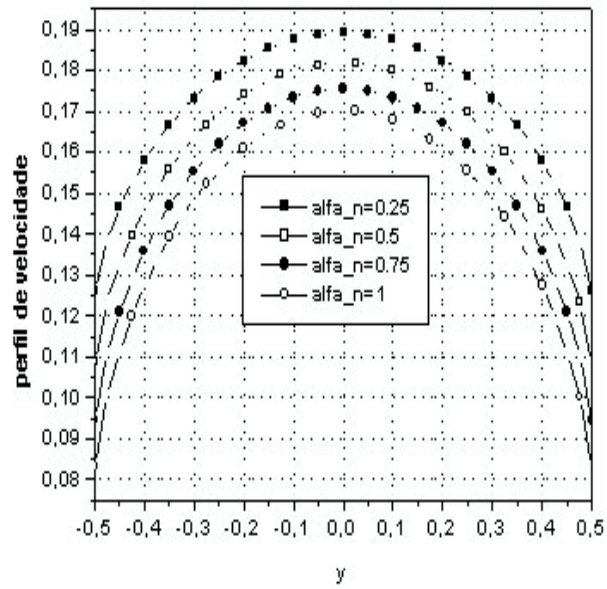


Figura 7.7 – *Creep* Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade,  $a = 0.5$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

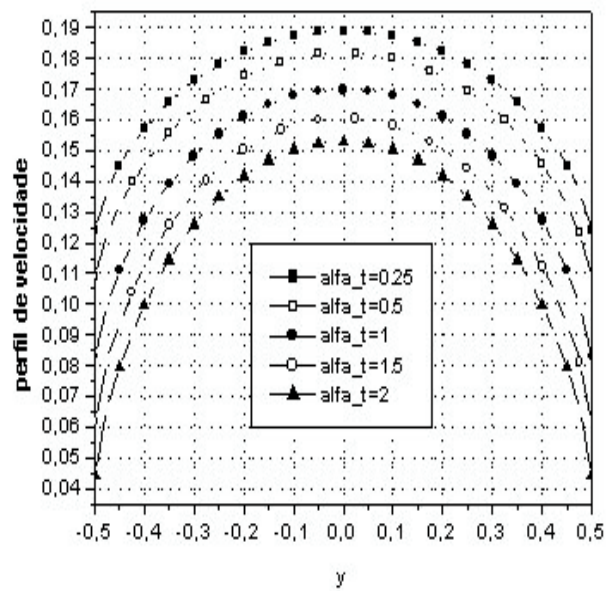


Figura 7.8 – *Creep* Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade,  $a = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

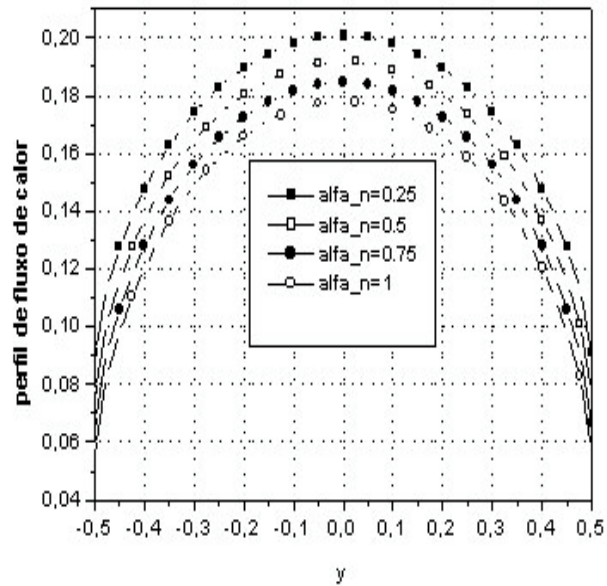


Figura 7.9 – Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor,  $a = 0.5$  e  $\alpha_t = 0.5$ .

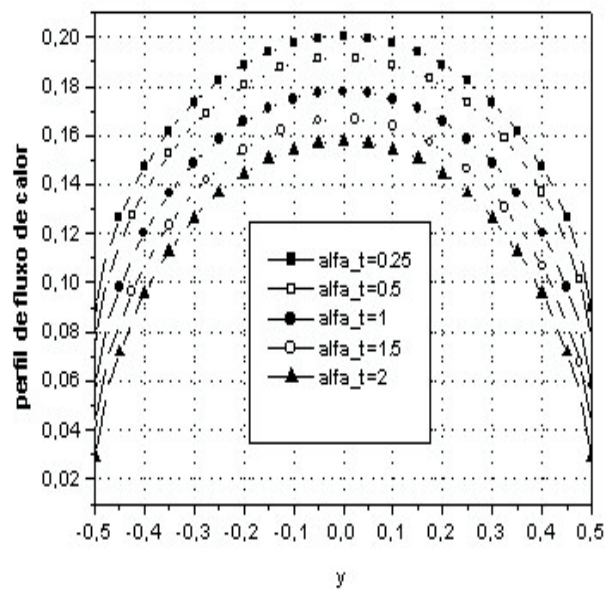


Figura 7.10 – Fluxo de Poiseuille - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor,  $a = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

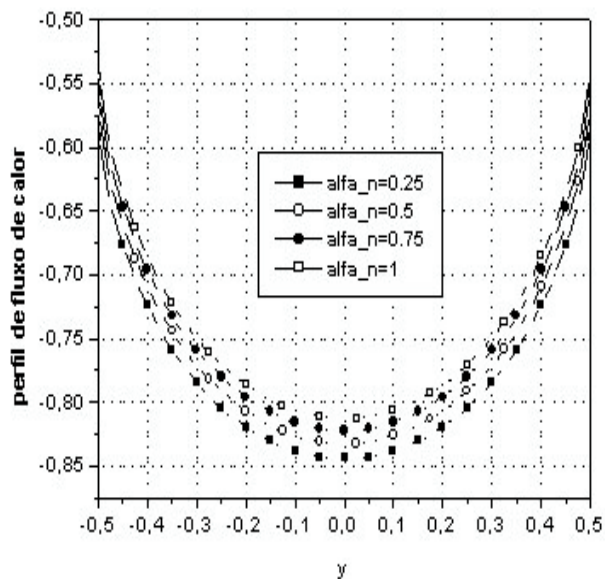


Figura 7.11 – *Creep* Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor,  $a = 0.5$  e  $\alpha_t = 0.5$ .

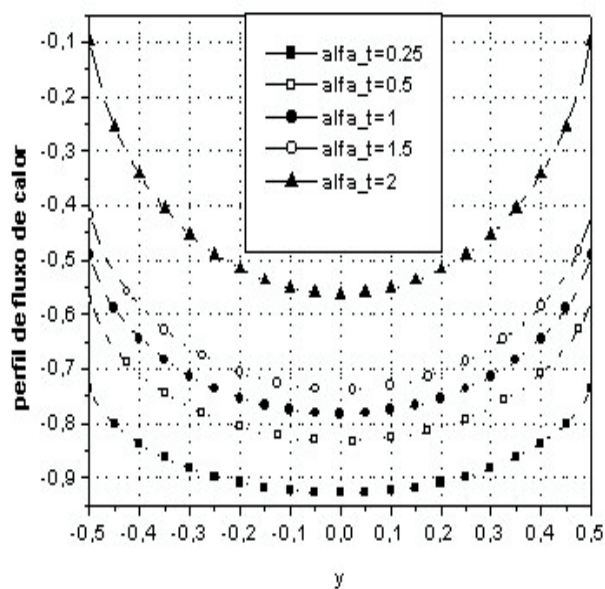


Figura 7.12 – *Creep* Térmico - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor,  $a = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

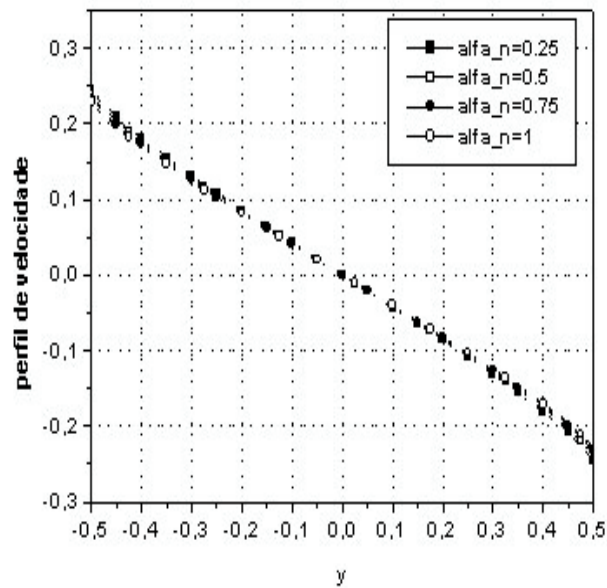


Figura 7.13 – Fluxo de Couette - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade,  $a = 0.5$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

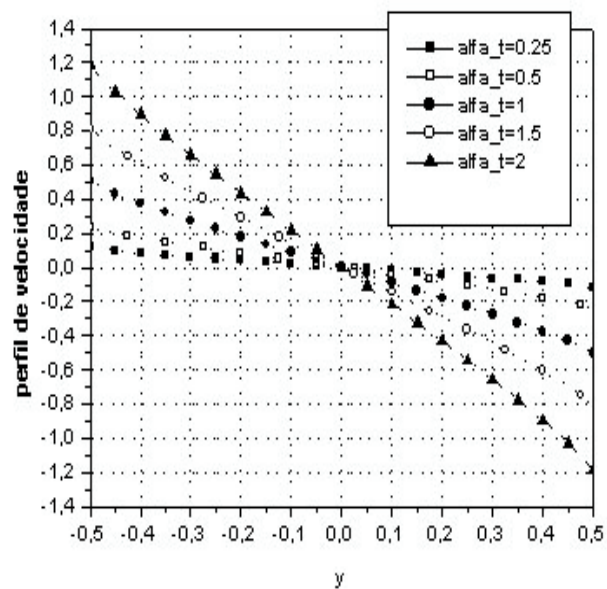


Figura 7.14 – Fluxo de Couette - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Velocidade,  $a = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .



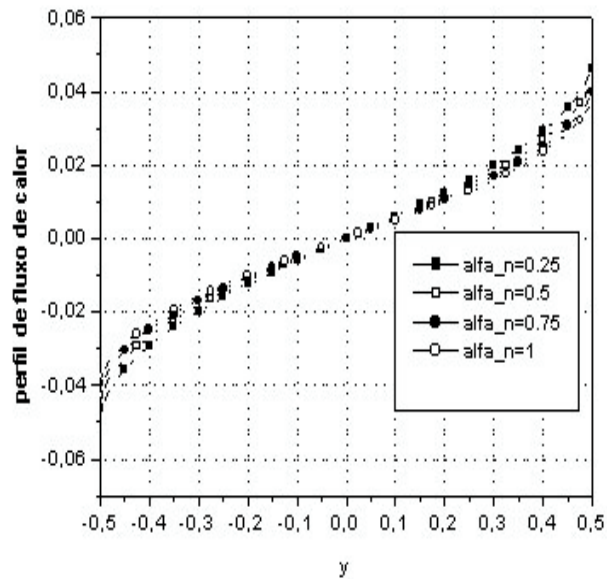


Figura 7.15 – Fluxo de Couette - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor,  $a = 0.5$  e  $\alpha_t = 0.5$ .

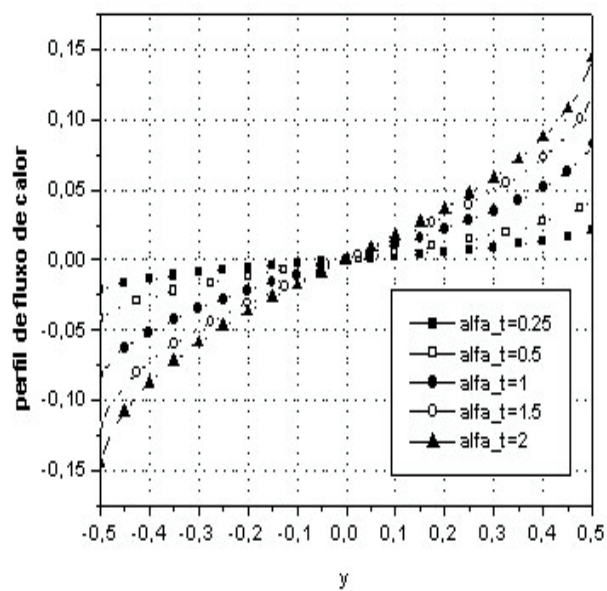


Figura 7.16 – Fluxo de Couette - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Perfil de Fluxo de Calor,  $a = 0.5$  e  $\alpha_n = 0.5$ .

Nas seções 7.2.4, 7.2.5 e 7.2.6 salienta-se que para um número de Knudsen com valor moderado, isto é,  $0.01 < Kn < 0.1$ , as equações da hidrodinâmica podem ser usadas com condições de contorno de salto de temperatura e velocidade de deslizamento para considerar a rarefação do gás. Assim, nas expressões destas condições [Sharipov, 2003a], estão presentes os chamados coeficientes de deslizamento térmico  $\zeta_t$ , de deslizamento viscoso  $\zeta_p$  e o de salto de temperatura  $\zeta$  que serão avaliados a seguir.

#### 7.2.4 Problema de Deslizamento Térmico

Na tabela 7.23, tem-se os resultados para o perfil de velocidade para o problema de Deslizamento Térmico, que apresentam uma boa aproximação quando comparados com os resultados encontrados nas Refs. [Siewert, 2003b; Siewert, 2002e]. Uma comparação dos valores do coeficiente de deslizamento térmico para dois valores do coeficiente de acomodação da energia  $\alpha_n = 0.25$  e  $\alpha_n = 0.75$  e vários valores do coeficiente de acomodação tangencial  $\alpha_t$ , com outros valores do coeficiente de deslizamento térmico encontrados na literatura, [Siewert, 2003c], é mostrada na tabela 7.24.

Tabela 7.23 – Problema de Deslizamento Térmico: perfil de velocidade  $u_d$ ,  $\alpha_t = 0.1$ .

	BGK-CL	LBE-DE <sup>a</sup>	S-CL ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ) $\alpha_n = 0.01$	CES-DE <sup>b</sup>
$y$				
0.0	2.176172(-1)	2.3877(-1)	2.122635(-1)	2.36503(-1)
0.1	2.241664(-1)	2.4634(-1)	2.209868(-1)	2.45367(-1)
0.2	2.277115(-1)	2.5011(-1)	2.258687(-1)	2.50014(-1)
0.3	2.303137(-1)	2.5279(-1)	2.295285(-1)	2.53327(-1)
0.4	2.323701(-1)	2.5484(-1)	2.324551(-1)	2.55849(-1)
0.5	2.340582(-1)	2.5648(-1)	2.348709(-1)	2.57831(-1)
0.6	2.354775(-1)	2.5782(-1)	2.369037(-1)	2.59418(-1)
0.7	2.366910(-1)	2.5892(-1)	2.386367(-1)	2.60706(-1)
0.8	2.377412(-1)	2.5985(-1)	2.401283(-1)	2.61760(-1)
0.9	2.386589(-1)	2.6064(-1)	2.414215(-1)	2.62628(-1)
1.0	2.394671(-1)	2.6131(-1)	2.425493(-1)	2.63348(-1)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003b]    Ref<sup>b</sup> = [Siewert, 2002e]

Tabela 7.24 – Problema de Deslizamento Térmico: coeficiente de deslizamento térmico  $\zeta_d$ .

$\alpha_t$	$\alpha_n = 0.25$			$\alpha_n = 0.75$		
	BGK-CL	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	LBE-CL <sup>a</sup>	BGK-CL	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	LBE-CL <sup>a</sup>
0.25	3.103473(-1)	3.179912(-1)	2.9049(-1)	3.593360(-1)	3.659777(-1)	3.2950(-1)
0.5	3.351889(-1)	3.448837(-1)	3.0221(-1)	3.673334(-1)	3.757197(-1)	3.2748(-1)
0.75	3.594527(-1)	3.689663(-1)	3.1834(-1)	3.752749(-1)	3.839875(-1)	3.3068(-1)
1	3.831612(-1)	3.915748(-1)	3.3628(-1)	3.831613(-1)	3.915748(-1)	3.3628(-1)
1.25	4.063360(-1)	4.134960(-1)	3.5369(-1)	3.909929(-1)	3.990827(-1)	3.4183(-1)
1.5	4.289974(-1)	4.350791(-1)	3.6813(-1)	3.987706(-1)	4.069661(-1)	3.4491(-1)
1.75	4.511646(-1)	4.562730(-1)	3.7723(-1)	4.064948(-1)	4.155176(-1)	3.4323(-1)
2	4.728560(-1)	4.766765(-1)	3.7904(-1)	4.141660(-1)	4.248237(-1)	3.3502(-1)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003c]

### 7.2.5 Problema de Deslizamento Viscoso

Os resultados para as grandezas físicas de interesse para o problema de Deslizamento Viscoso são apresentados nas tabelas 7.25 - 7.32. Nas tabelas 7.25 e 7.26 lista-se resultados para o perfil de velocidade e perfil de fluxo de calor, respectivamente, para comparar com resultados da literatura para o modelo CES [Siewert, 2002e] e equação de Boltzmann linearizada (LBE) [Siewert, 2003b].

Os resultados para o coeficiente de deslizamento viscoso ( $\zeta_p$ ) são apresentados nas tabelas 7.27 e 7.28, que são comparados com resultados encontrados nas Refs. [Siewert, 2003c; Sharipov, 2003a]. Na tabela 7.29 é apresentado resultados do coeficiente de deslizamento viscoso ( $\zeta_p$ ) para alguns modelos cinéticos. Observa-se nas tabelas 7.30 - 7.32 os valores do coeficiente de deslizamento viscoso ( $\zeta_p$ ) considerando vários coeficientes de acomodação tangencial ( $\alpha_t$ ) e normal ( $\alpha_n$ ) e nota-se que a dependência do coeficiente de deslizamento viscoso ( $\zeta_p$ ) é fraca em relação ao coeficiente de acomodação da energia ( $\alpha_n$ ).

Tabela 7.25 – Problema de Deslizamento Viscoso: perfil de velocidade  
 $u_k, \alpha_t = 0.1$ .

	BGK-CL $\alpha_n = 0.01$	LBE-DE <sup>a</sup>	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ) $\alpha_n = 0.01$	CES-DE <sup>b</sup>
$y$				
0.0	1.658891(1)	1.6472(1)	1.657638(1)	1.64798(1)
0.1	1.685912(1)	1.6771(1)	1.684665(1)	1.67830(1)
0.2	1.704207(1)	1.6956(1)	1.703032(1)	1.69694(1)
0.3	1.719993(1)	1.7111(1)	1.718907(1)	1.71254(1)
0.4	1.734403(1)	1.7252(1)	1.733412(1)	1.72656(1)
0.5	1.747922(1)	1.7383(1)	1.747028(1)	1.73960(1)
0.6	1.760815(1)	1.7507(1)	1.760015(1)	1.75198(1)
0.7	1.773243(1)	1.7627(1)	1.772534(1)	1.76388(1)
0.8	1.785311(1)	1.7743(1)	1.784691(1)	1.77543(1)
0.9	1.797093(1)	1.7857(1)	1.796559(1)	1.78671(1)
1.0	1.808645(1)	1.7968(1)	1.808192(1)	1.79777(1)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003b]    Ref<sup>b</sup> = [Siewert, 2002e]

Tabela 7.26 – Problema de Deslizamento Viscoso: perfil de fluxo de calor  $q_k$ ,  $\alpha_t = 0.1$ .

$y$	BGK-CL	LBE-DE <sup>a</sup>	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	CES-DE <sup>b</sup>
	$\alpha_n = 0.01$		$\alpha_n = 0.01$	
0.0	3.254432(-1)	2.3959(-1)	3.894012(-1)	2.83332(-1)
0.1	2.403406(-1)	1.9023(-1)	3.052167(-1)	2.24002(-1)
0.2	1.988665(-1)	1.6365(-1)	2.614302(-1)	1.89829(-1)
0.3	1.699351(-1)	1.4360(-1)	2.294938(-1)	1.63704(-1)
0.4	1.478871(-1)	1.2735(-1)	2.042410(-1)	1.42510(-1)
0.5	1.302883(-1)	1.1373(-1)	1.834326(-1)	1.24821(-1)
0.6	1.158229(-1)	1.0206(-1)	1.658432(-1)	1.09808(-1)
0.7	1.036864(-1)	9.1923(-2)	1.507120(-1)	9.69236(-2)
0.8	9.334704(-2)	8.3039(-2)	1.375275(-1)	8.57773(-2)
0.9	8.443298(-2)	7.5193(-2)	1.259252(-1)	7.60772(-2)
1.0	7.667371(-2)	6.8224(-2)	1.156353(-1)	6.75962(-2)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003b]    Ref<sup>b</sup> = [Siewert, 2002e]

Tabela 7.27 – Problema de Deslizamento Viscoso: a. Coeficiente de deslizamento viscoso  $\zeta_k$ .

$\alpha_t$	$\alpha_n = 0.25$			$\alpha_n = 0.75$		
	BGK-CL	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	LBE-CL <sup>a</sup>	BGK-CL	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	LBE-CL <sup>a</sup>
0.25	6.412097	6.417960	6.3645	6.357832	6.361016	6.3232
0.5	2.840346	2.844690	2.7985	2.804774	2.807569	2.7715
0.75	1.632538	1.635681	1.5970	1.615045	1.617514	1.5838
1	1.016191	1.018372	9.8733(-1)	1.016191	1.018372	9.8733(-1)
1.25	6.367920(-1)	6.382056(-1)	6.1452(-1)	6.537217(-1)	6.556345(-1)	6.2721(-1)
1.5	3.761520(-1)	3.769738(-1)	3.6006(-1)	4.094717(-1)	4.111267(-1)	3.8497(-1)
1.75	1.836073(-1)	1.840043(-1)	1.7290(-1)	2.327993(-1)	2.342025(-1)	2.0964(-1)
2	3.381592(-2)	3.394790(-2)	2.7335(-2)	9.838301(-2)	9.954176(-2)	7.5624(-2)

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003c]

Tabela 7.28 – Problema de Deslizamento Viscoso: b. Coeficiente de deslizamento viscoso  $\zeta_k$ .

$\alpha_t$	$\alpha_n = 0.25$			$\alpha_n = 0.75$		
	BGK-CL	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	S-CL <sup>a</sup>	BGK-CL	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	S-CL <sup>a</sup>
0.25	6.412097	6.417960	6.418	6.357832	6.361016	6.361
0.5	2.840346	2.844690	2.845	2.804774	2.807569	2.807
0.75	1.632538	1.635681	1.636	1.615045	1.617514	1.617
1	1.016191	1.018372	1.018	1.016191	1.018372	1.018
1.25	6.367920(-1)	6.382056(-1)	6.382(-1)	6.537217(-1)	6.556345(-1)	6.556(-1)
1.5	3.761520(-1)	3.769738(-1)	3.770(-1)	4.094717(-1)	4.111267(-1)	4.111(-1)
1.75	1.836073(-1)	1.840043(-1)	1.840(-1)	2.327993(-1)	2.342025(-1)	2.342(-1)
2	3.381592(-2)	3.394790(-2)	3.40(-2)	9.838301(-2)	9.954176(-2)	9.95(-2)

Ref<sup>a</sup> = [Sharipov, 2003a]

Tabela 7.29 – Problema de Deslizamento Viscoso: coeficiente de deslizamento viscoso  $\zeta_k$ ,  $\alpha_t = 0.5$ ,  $\alpha_n = 0.5$ , condições de contorno de Cercignani-Lampis.

Modelo	$\zeta_p$
BGK	2.821884
S ( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	2.825386
S ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	1.883590
S	2.825 <sup>a</sup>

Ref<sup>a</sup>=[Sharipov, 2003a]

Tabela 7.30 – Problema de Deslizamento Viscoso: coeficiente de deslizamento viscoso  $\zeta_k$ , modelo BGK, condições de contorno de Cercignani-Lampis.

$\alpha_t$	$\alpha_n = 0.25$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.75$	$\alpha_n = 1$
0.25	6.412097	6.383780	6.357832	6.333553
0.5	2.840346	2.821884	2.804774	2.788645
0.75	1.632538	1.623502	1.615045	1.607009
1	1.016191	1.016191	1.016191	1.016191
1.5	3.761520(-1)	3.931230(-1)	4.094717(-1)	4.253735(-1)
1.75	1.836073(-1)	2.085491(-1)	2.327993(-1)	2.565683(-1)
2	3.381592(-2)	6.640688(-2)	9.838306(-2)	1.299645(-1)

Tabela 7.31 – Problema de Deslizamento Viscoso: coeficiente de deslizamento viscoso  $\zeta_k$ , modelo S ( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ), condições de contorno de Cercignani-Lampis.

$\alpha_t$	$\alpha_n = 0.25$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.75$	$\alpha_n = 1$
0.25	6.417960	6.388167	6.361016	6.335791
0.5	2.844690	2.825386	2.807569	2.790843
0.75	1.635681	1.626289	1.617514	1.609192
1	1.018372	1.018372	1.018372	1.018372
1.5	3.769738(-1)	3.943302(-1)	4.111267(-1)	4.275378(-1)
1.75	1.840042(-1)	2.093756(-1)	2.342025(-1)	2.586945(-1)
2	3.394790(-2)	6.692557(-2)	9.954176(-2)	1.320200(-1)

Tabela 7.32 – Problema de Deslizamento Viscoso: coeficiente de deslizamento viscoso  $\zeta_k$ , modelo S ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ), condições de contorno de Cercignani-Lampis.

$\alpha_t$	$\alpha_n = 0.25$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.75$	$\alpha_n = 1$
0.25	4.278640	4.258778	4.240677	4.223861
0.5	1.896460	1.883590	1.871712	1.860562
0.75	1.090454	1.084193	1.078343	1.072795
1	6.789149(-1)	6.789149(-1)	6.789149(-1)	6.789149(-1)
1.5	2.513159(-1)	2.628868(-1)	2.740845(-1)	2.850252(-1)
1.75	1.226695(-1)	1.395837(-1)	1.561350(-1)	1.724630(-1)
2	2.263193(-2)	4.461705(-2)	6.636117(-2)	8.801336(-2)

### 7.2.6 Problema de Salto de Temperatura

Os resultados para as grandezas de interesse do problema de Salto de Temperatura são apresentados nas tabelas 7.33 - 7.42. Nas tabelas 7.33 - 7.37 são apresentados resultados para coeficiente de salto de temperatura e nas tabelas 7.38 - 7.42 resultados para o desvio de temperatura e densidade.

Observa-se na tabela 7.33 uma concordância nos resultados obtidos para o coeficiente de salto de temperatura usando o modelo S e o coeficiente de adimensionalização baseado na condutividade térmica  $\varepsilon = \varepsilon_t$  com os resultados apresentados nas Refs. [Barichello e Siewert, 2000; Siewert, 2003a], enquanto, nas tabelas 7.34, 7.35 e 7.36, a concordância com a Ref. [Sharipov, 2003a] ocorre quando a adimensionalização é baseada na viscosidade  $\varepsilon = \varepsilon_p$ . Ainda, nestas tabelas, os valores do coeficiente de salto de temperatura para o modelo BGK e modelo S (com adimensionalização baseada na condutividade térmica  $\varepsilon = \varepsilon_t$ ) e condições de contorno de Cercignani-Lampis aproximam-se dos valores encontrados através da própria equação de linearizada de Boltzmann [Siewert, 2003c]. Na tabela 7.37 ressalta-se o resultado encontrado para o coeficiente de salto de temperatura avaliado através do modelo S com condições de contorno de Cercignani-Lampis para diversos valores dos coeficientes de acomodação.

Tabela 7.33 – Salto de Temperatura: a. Coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ .

$\alpha$	BGK-DE <sup>a</sup>	S-DE( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	S-DE( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	LBE-DE <sup>b</sup>
0.1	21.45012	32.17519	21.45012	21.349
0.2	10.34747	15.52120	10.34747	10.251
0.3	6.630514	9.94577	6.63051	6.5396
0.4	4.760333	7.14050	4.76033	4.6745
0.5	3.629125	5.44369	3.62912	3.5485
0.6	2.867615	4.30142	2.86761	2.7922
0.7	2.317534	3.47630	2.31753	2.2474
0.8	1.899741	2.84961	1.89974	1.8349
0.9	1.570264	2.35540	1.57026	1.5108
1.0	1.302716	1.95407	1.30272	1.2486

Ref<sup>a</sup> = [Barichello e Siewert, 2000]      Ref<sup>b</sup> = [Siewert, 2003a]



Tabela 7.34 – Salto de Temperatura: b. Coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ ,  $\alpha_t = 0.25$ .

	BGK-CL	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	S-CL <sup>a</sup>	LBE-CL <sup>b</sup>
$\alpha_n$					
0.25	5.78950	8.68426	5.78950	8.684	5.7318
0.5	3.84176	5.76263	3.84176	5.763	3.7707
0.75	2.72408	4.08612	2.72408	4.087	2.6655
1.0	2.00553	3.00830	2.00553	3.009	1.9609

Ref<sup>a</sup> = [Sharipov, 2003a]    Ref<sup>b</sup> = [Siewert, 2003c]Tabela 7.35 – Salto de Temperatura: c. Coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

	BGK-CL	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	S-CL <sup>a</sup>	LBE-CL <sup>b</sup>
$\alpha_n$					
0.25	3.88593	5.82890	3.88593	5.828	3.8696
0.5	2.78041	4.17061	2.78041	4.170	2.7282
0.75	2.05839	3.08759	2.05839	3.088	2.0010
1.0	1.55658	2.33487	1.55658	2.335	1.5015

Ref<sup>a</sup> = [Sharipov, 2003a]    Ref<sup>b</sup> = [Siewert, 2003c]Tabela 7.36 – Salto de Temperatura: d. Coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ ,  $\alpha_t = 1.0$ .

	BGK-CL	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	S-CL( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	S-CL <sup>a</sup>	LBE-CL <sup>b</sup>
$\alpha_n$					
0.25	3.04475	4.56713	3.04475	4.567	3.0524
0.5	2.25090	3.37635	2.25090	3.376	2.2161
0.75	1.70032	2.55048	1.70032	2.551	1.6514
1.0	1.30272	1.95407	1.30272	1.954	1.2486

Ref<sup>a</sup> = [Sharipov, 2003a]    Ref<sup>b</sup> = [Siewert, 2003c]Tabela 7.37 – Salto de Temperatura: e. Coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ , Modelo S - CL,  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

$\alpha_t = 0.1$	$\alpha_t = 0.3$	$\alpha_t = 0.4$	$\alpha_t = 0.5$	$\alpha_t = 0.7$	$\alpha_t = 0.8$	$\alpha_t = 0.9$	$\alpha_t = 1.0$
$\alpha_n = 0.1$	$\alpha_n = 0.3$	$\alpha_n = 0.4$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.7$	$\alpha_n = 0.8$	$\alpha_n = 0.9$	$\alpha_n = 1.0$
22.06522	7.185093	5.303377	4.170615	2.881395	2.486020	2.185796	1.954073

Apresenta-se, ainda, nas tabelas 7.38, 7.41 e 7.42 resultados para o desvio de temperatura e densidade para os modelos deste trabalho em comparação com resultados da

literatura para o modelo BGK [Barichello e Siewert, 2000] e resultados da equação de Boltzmann linearizada (LBE) [Siewert, 2003a]. Destaca-se nas tabelas 7.39 e 7.40 alguns resultados encontrados neste trabalho para o desvio de temperatura e densidade com variações no modelo utilizado, no coeficiente de adimensionalização, nos coeficientes de acomodação e na condição de contorno. Através dos resultados obtidos na tabela 7.40 pode-se concluir que há uma pequena diferença nos resultados para o modelo BGK e o modelo S (baseado na condutividade térmica  $\varepsilon = \varepsilon_t$ ) para o desvio de temperatura e densidade do gás.

Tabela 7.38 – Salto de Temperatura: a. Desvio de temperatura  $T(y)$  e densidade  $N(y)$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y$	BGK-DE <sup>a</sup>		BGK-CL			
	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$
	$\alpha = \alpha_t$		$\alpha_n = 0.5$		$\alpha_n = 1$	
0.0	2.91597	-3.07437	2.10157	-2.56938	1.18961	-1.08900
0.1	3.18042	-3.31664	2.34143	-2.71400	1.37629	-1.30803
0.2	3.36278	-3.48323	2.51598	-2.83371	1.51921	-1.46634
0.3	3.52167	-3.62947	2.67076	-2.94749	1.64968	-1.60728
0.4	3.66754	-3.76478	2.81423	-3.05829	1.77328	-1.73864
0.5	3.80489	-3.89310	2.95014	-3.16724	1.89241	-1.86377
0.6	3.93615	-4.01653	3.08054	-3.27491	2.00837	-1.98451
0.7	4.06283	-4.13633	3.20674	-3.38167	2.12194	-2.10196
0.8	4.18593	-4.25334	3.32960	-3.48770	2.23367	-2.21686
0.9	4.30614	-4.36814	3.44976	-3.59315	2.34391	-2.32975
1.0	4.42400	-4.48113	3.56767	-3.69812	2.45293	-2.44099
2.0	5.52928	-5.55674	4.67538	-4.73195	3.50592	-3.50413
3.0	6.57466	-6.58912	5.72288	-5.75046	4.52874	-4.52919
4.0	7.59758	-7.60560	6.74708	-6.76147	5.54032	-5.54115
5.0	8.61013	-8.61476	7.76037	-7.76823	6.54671	-6.54745
6.0	9.61737	-9.62011	8.76804	-8.77248	7.55042	-7.55099
7.0	10.6217	-10.6234	9.77261	-9.77519	8.55266	-8.55307
8.0	11.6243	-11.6254	10.7754	-10.7769	9.55404	-9.55433
9.0	12.6260	-12.6267	11.7772	-11.7781	10.5549	-10.5551
10.0	13.6271	-13.6275	12.7783	-12.7788	11.5555	-11.5556
20.0	23.6291	-23.6291	22.7804	-22.7804	21.5565	-21.5566

Ref<sup>a</sup> = [Barichello e Siewert, 2000]

Tabela 7.39 – Salto de Temperatura: b. Desvio de temperatura  $T(y)$  e densidade  $N(y)$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y$	S-DE				S-CL			
	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$		$(\varepsilon = \varepsilon_t)$		$(\varepsilon = \varepsilon_p)$		$(\varepsilon = \varepsilon_t)$	
	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$
	$\alpha = \alpha_t$				$\alpha_n = 0.5$			
0.0	4.37396	-4.61156	2.91597	-3.07437	3.15236	-3.85407	2.10157	-2.56938
0.1	4.72063	-4.92495	3.22570	-3.35355	3.46214	-4.02100	2.38212	-2.72494
0.2	4.94416	-5.12484	3.42167	-3.52947	3.67398	-4.15056	2.57076	-2.84749
0.3	5.13250	-5.29421	3.58709	-3.67966	3.85614	-4.27124	2.73298	-2.96295
0.4	5.30131	-5.44717	3.73615	-3.81653	4.02135	-4.38743	2.88054	-3.07492
0.5	5.45733	-5.58965	3.87478	-3.94514	4.17520	-4.50085	3.01854	-3.18477
0.6	5.60422	-5.72479	4.00614	-4.06814	4.32081	-4.61238	3.14976	-3.29315
0.7	5.74424	-5.85449	4.13216	-4.18706	4.46011	-4.72251	3.27590	-3.40045
0.8	5.87889	-5.98001	4.25410	-4.30291	4.59441	-4.83155	3.39810	-3.50691
0.9	6.00921	-6.10220	4.37281	-4.41637	4.72464	-4.93973	3.51717	-3.61267
1.0	6.13600	-6.22170	4.48894	-4.52793	4.85151	-5.04718	3.63369	-3.71786
2.0	7.29393	-7.33511	5.57466	-5.58912	6.01307	-6.09793	4.72288	-4.75046
3.0	8.36200	-8.38367	6.60474	-6.61081	7.08432	-7.12570	5.75467	-5.76525
4.0	9.39637	-9.40840	7.61737	-7.62010	8.12062	-8.14220	6.76804	-6.77248
5.0	10.4152	-10.4221	8.62318	-8.62448	9.14056	-9.15235	7.77418	-7.77617
6.0	11.4260	-11.4302	9.62601	-9.62665	10.1520	-10.1587	8.77716	-8.77810
7.0	12.4325	-12.4350	10.6274	-10.6278	11.1589	-11.1628	9.77867	-9.77912
8.0	13.4365	-13.4380	11.6282	-11.6284	12.1631	-12.1654	10.7795	-10.7797
9.0	14.4390	-14.4400	12.6286	-12.6287	13.1657	-13.1671	11.7799	-11.7800
10.0	15.4406	-15.4412	13.6288	-13.6289	14.1674	-14.1683	12.7801	-12.7802
20.0	25.4436	-25.4436	23.6291	-23.6291	24.1705	-24.1705	22.7804	-22.7804

Tabela 7.40 – Salto de Temperatura: c. Desvio de temperatura  $T(y)$  e densidade  $N(y)$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y$	BGK-CL		S-CL			
	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$
	$\alpha_n = 0.5$		$(\varepsilon = \varepsilon_p)$		$(\varepsilon = \varepsilon_t)$	
	$\alpha_n = 0.5$		$\alpha_n = 0.5$			
0.0	2.10157	-2.56938	3.15236	-3.85407	2.10157	-2.56938
0.1	2.34143	-2.71400	3.46214	-4.02100	2.38212	-2.72494
0.2	2.51598	-2.83371	3.67398	-4.15056	2.57076	-2.84749
0.3	2.67076	-2.94749	3.85614	-4.27124	2.73298	-2.96295
0.4	2.81423	-3.05829	4.02135	-4.38743	2.88054	-3.07492
0.5	2.95014	-3.16724	4.17520	-4.50085	3.01854	-3.18477
0.6	3.08054	-3.27492	4.32081	-4.61238	3.14976	-3.29315
0.7	3.20674	-3.38167	4.46011	-4.72251	3.27590	-3.40045
0.8	3.32960	-3.48770	4.59441	-4.83155	3.39810	-3.50691
0.9	3.44976	-3.59315	4.72464	-4.93973	3.51717	-3.61267
1.0	3.56767	-3.69812	4.85151	-5.04718	3.63369	-3.71786
2.0	4.67538	-4.73195	6.01307	-6.09793	4.72288	-4.75046
3.0	5.72288	-5.75046	7.08432	-7.12570	5.75467	-5.76525
4.0	6.74708	-6.76147	8.12062	-8.14220	6.76804	-6.77248
5.0	7.76037	-7.76823	9.14056	-9.15235	7.77418	-7.77617
6.0	8.76804	-8.77248	10.1520	-10.1587	8.77716	-8.77810
7.0	9.77261	-9.77519	11.1589	-11.1628	9.77867	-9.77912
8.0	10.7754	-10.7769	12.1631	-12.1654	10.7795	-10.7797
9.0	11.7772	-11.7781	13.1657	-13.1671	11.7799	-11.7800
10.0	12.7783	-12.7788	14.1674	-14.1683	12.7801	-12.7802
20.0	22.7804	-22.7804	24.1705	-24.1705	22.7804	-22.7804

Tabela 7.41 – Salto de Temperatura: d. Desvio de temperatura  $T(y)$  e densidade  $N(y)$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y$	BGK-CL		S-CL				LBE-DE <sup>a</sup>	
	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$
	$\alpha = \alpha_t$		$\alpha_n = 0.5$				$\alpha = \alpha_t$	
			$(\varepsilon = \varepsilon_p)$	$(\varepsilon = \varepsilon_t)$				
0.0	2.10157	-2.56938	3.15236	-3.85407	2.10157	-2.56938	2.9250	-3.1153
0.1	2.34143	-2.71400	3.46214	-4.02100	2.38212	-2.72494	3.2342	-3.3647
0.2	2.51598	-2.83371	3.67398	-4.15056	2.57076	-2.84749	3.4238	-3.5257
0.3	2.67076	-2.94749	3.85614	-4.27124	2.73298	-2.96295	3.5831	-3.6654
0.4	2.81423	-3.05829	4.02135	-4.38743	2.88054	-3.07492	3.7268	-3.7944
0.5	2.95014	-3.16724	4.17520	-4.50085	3.01854	-3.18477	3.8605	-3.9167
0.6	3.08054	-3.27492	4.32081	-4.61238	3.14976	-3.29315	3.9874	-4.0345
0.7	3.20674	-3.38167	4.46011	-4.72251	3.27590	-3.40045	4.1093	-4.1491
0.8	3.32960	-3.48770	4.59441	-4.83155	3.39810	-3.50691	4.2275	-4.2612
0.9	3.44976	-3.59315	4.72464	-4.93973	3.51717	-3.61267	4.3428	-4.3715
1.0	3.56767	-3.69812	4.85151	-5.04718	3.63369	-3.71786	4.4558	-4.4802
2.0	4.67538	-4.73195	6.01307	-6.09793	4.72288	-4.75046	5.5196	-5.5251
3.0	5.72288	-5.75046	7.08432	-7.12570	5.75467	-5.76525	–	–
4.0	6.74708	-6.76147	8.12062	-8.14220	6.76804	-6.77248	–	–
5.0	7.76037	-7.76823	9.14056	-9.15235	7.77418	-7.77617	–	–
6.0	8.76804	-8.77248	10.1520	-10.1587	8.77716	-8.77810	–	–
7.0	9.77261	-9.77519	11.1589	-11.1628	9.77867	-9.77912	–	–
8.0	10.7754	-10.7769	12.1631	-12.1654	10.7795	-10.7797	–	–
9.0	11.7772	-11.7781	13.1657	-13.1671	11.7799	-11.7800	–	–
10.0	12.7783	-12.7788	14.1674	-14.1683	12.7801	-12.7802	–	–
20.0	22.7804	-22.7804	24.1705	-24.1705	22.7804	-22.7804	–	–

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003a]

Tabela 7.42 – Salto de Temperatura: e. Desvio de temperatura  $T(y)$  e densidade  $N(y)$ ,  $\alpha_t = 0.5$ .

$y$	S-DE				LBE-DE <sup>a</sup>	
	$(\varepsilon = \varepsilon_p)$		$(\varepsilon = \varepsilon_t)$		$T(y)$	$N(y)$
	$T(y)$	$N(y)$	$T(y)$	$N(y)$		
$\alpha = \alpha_t$				$\alpha = \alpha_t$		
0.0	4.37396	-4.61156	2.91597	-3.07437	2.9250	-3.1153
0.1	4.72063	-4.92495	3.22570	-3.35355	3.2342	-3.3647
0.2	4.94416	-5.12484	3.42167	-3.52947	3.4238	-3.5257
0.3	5.13250	-5.29421	3.58709	-3.67966	3.5831	-3.6654
0.4	5.30131	-5.44717	3.73615	-3.81653	3.7268	-3.7944
0.5	5.45733	-5.58965	3.87478	-3.94514	3.8605	-3.9167
0.6	5.60422	-5.72479	4.00614	-4.06814	3.9874	-4.0345
0.7	5.74424	-5.85449	4.13216	-4.18706	4.1093	-4.1491
0.8	5.87889	-5.98001	4.25410	-4.30291	4.2275	-4.2612
0.9	6.00921	-6.10220	4.37281	-4.41637	4.3428	-4.3715
1.0	6.13600	-6.22170	4.48894	-4.52793	4.4558	-4.4802
2.0	7.29393	-7.33511	5.57466	-5.58912	5.5196	-5.5251
3.0	8.36200	-8.38367	6.60474	-6.61081	–	–
4.0	9.39637	-9.40840	7.61737	-7.62010	–	–
5.0	10.4152	-10.4221	8.62318	-8.62448	–	–
6.0	11.4260	-11.4302	9.62601	-9.62665	–	–
7.0	12.4325	-12.4350	10.6274	-10.6278	–	–
8.0	13.4365	-13.4380	11.6282	-11.6284	–	–
9.0	14.4390	-14.4400	12.6286	-12.6287	–	–
10.0	15.4406	-15.4412	13.6288	-13.6289	–	–
20.0	25.4436	-25.4436	23.6291	-23.6291	–	–

Ref<sup>a</sup> = [Siewert, 2003a]

Nas tabelas 7.43 e 7.44, os resultados encontrados neste trabalho para o coeficiente de salto de temperatura ( $\zeta$ ), são comparados com os resultados encontrados em outros trabalhos. Nota-se que os resultados para o modelo BGK são os mesmos que os encontrados no modelo S quando o livre caminho médio for em relação a condutividade térmica. Através das tabelas 7.45, 7.46 e 7.47, observa-se que o coeficiente de salto de temperatura ( $\zeta$ ) depende de ambos os coeficientes de acomodação  $\alpha_t$  e  $\alpha_n$ .

Tabela 7.43 – Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ ,  $\alpha = 0.5$ , condições de contorno difuso-especular.

Modelo	$\zeta$
BGK	3.629125 <sup>a</sup>
Williams	3.435960 <sup>a</sup>
Esferas-rígidas	3.476180 <sup>a</sup>
S ( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	5.44369
S ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	3.62912
LBE	3.5485 <sup>b</sup>

Ref<sup>a</sup>=[Camargo, 2003]  
Ref<sup>b</sup>=[Siewert, 2003a]

Tabela 7.44 – Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ ,  $\alpha_t = 0.5$ ,  $\alpha_n = 0.5$ , condições de contorno de Cercignani-Lampis.

Modelo	$\zeta$
BGK	2.78041
S ( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	4.17061
S ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	2.78041
S	4.170 <sup>a</sup>
LBE	2.7282 <sup>b</sup>

Ref<sup>a</sup>=[Sharipov, 2003a]  
Ref<sup>b</sup>=[Siewert, 2003c]

Tabela 7.45 – Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ , modelo BGK, condições de contorno de Cercignani-Lampis.

$\alpha_t$	$\alpha_n = 0.25$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.75$	$\alpha_n = 1$
0.25	5.7895	3.8418	2.7241	2.0055
0.5	3.8859	2.7804	2.0584	1.5566
0.75	3.2223	2.3660	1.7797	1.3598
1	3.0447	2.2509	1.7003	1.3027

Tabela 7.46 – Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ , modelo S ( $\varepsilon = \varepsilon_p$ ), condições de contorno de Cercignani-Lampis.

$\alpha_t$	$\alpha_n = 0.25$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.75$	$\alpha_n = 1$
0.25	8.6843	5.7626	4.0861	3.0083
0.5	5.8289	4.1706	3.0876	2.3349
0.75	4.8334	3.5491	2.6696	2.0397
1	4.5671	3.3763	2.5505	1.9541

Tabela 7.47 – Salto de Temperatura: coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ , modelo S ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ ), condições de contorno de Cercignani-Lampis.

$\alpha_t$	$\alpha_n = 0.25$	$\alpha_n = 0.5$	$\alpha_n = 0.75$	$\alpha_n = 1$
0.25	5.7895	3.8418	2.7241	2.0055
0.5	3.8859	2.7804	2.0584	1.5566
0.75	3.2223	2.3660	1.7797	1.3598
1	3.0447	2.2509	1.7003	1.3027

Ainda, com respeito ao coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$ , que se caracteriza pela transferência de calor da superfície para o gás [Sharipov, 2003a], observa-se através das figuras 7.17 - 7.19, onde mostram resultados para o coeficiente de salto de temperatura com variações, novamente constatadas, nos coeficientes de acomodação tangencial  $\alpha_t$  e de acomodação de energia  $\alpha_n$ , uma dependência significativa de ambos coeficientes de acomodação. Nota-se uma influência, levemente maior, do coeficiente de acomodação tangencial  $\alpha_t$ .

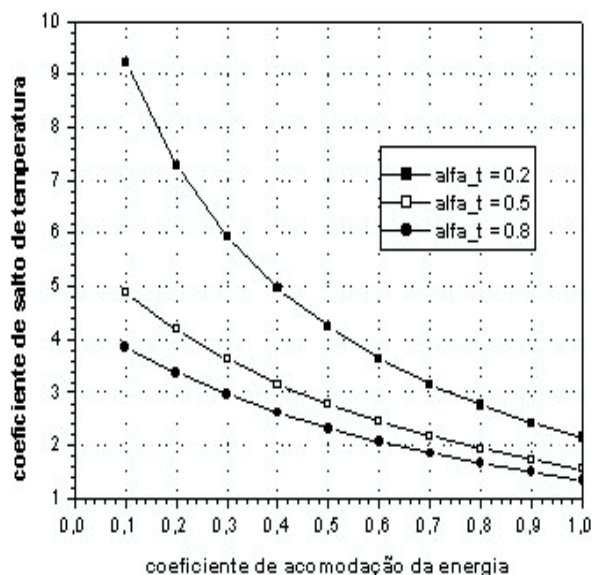


Figura 7.17 – Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Coeficiente de Salto de Temperatura.



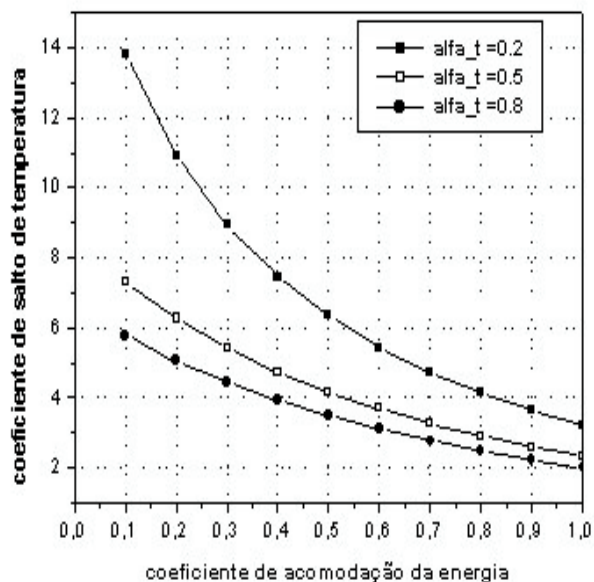


Figura 7.18 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Coeficiente de Salto de Temperatura,  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

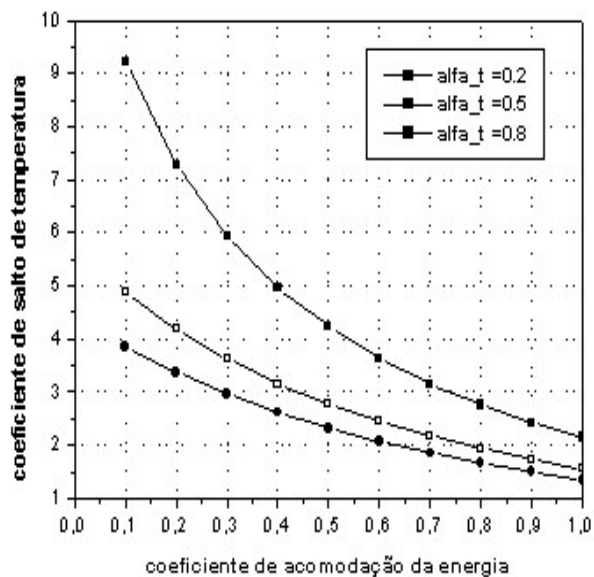


Figura 7.19 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Coeficiente de Salto de Temperatura,  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

As figuras 7.20 - 7.31 ilustram simulações a respeito de resultados para o desvio de temperatura e densidade para os modelos BGK e S quando fixa-se um coeficiente de acomodação e varia o outro. Sendo que para o modelo S, considera-se, ainda, uma formulação genérica em relação ao coeficiente de adimensionalização  $\varepsilon$  ( $\varepsilon = \varepsilon_p$  ou  $\varepsilon = \varepsilon_t$ ). O comportamento do gráfico é semelhante para ambos os modelos quando  $\alpha_t$  tem seu valor fixado. Esta semelhança também acontece quando  $\alpha_n$  é fixado.

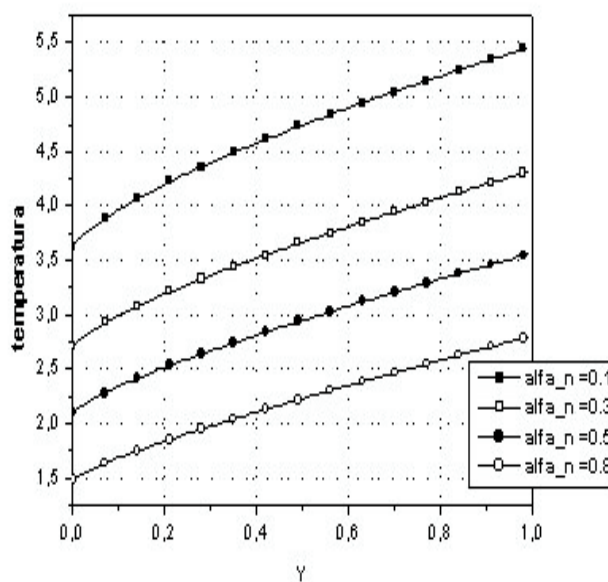


Figura 7.20 – Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura,  $\alpha_t = 0.5$ .

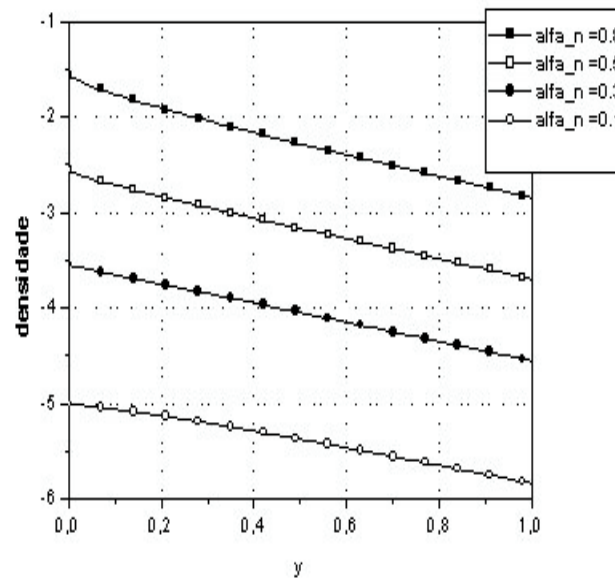


Figura 7.21 – Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis : Desvio de Densidade,  $\alpha_t = 0.5$ .

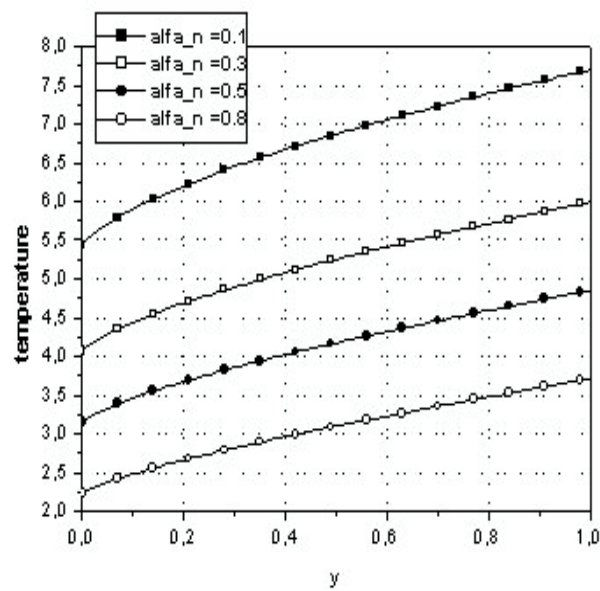


Figura 7.22 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura,  $\alpha_t = 0.5$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

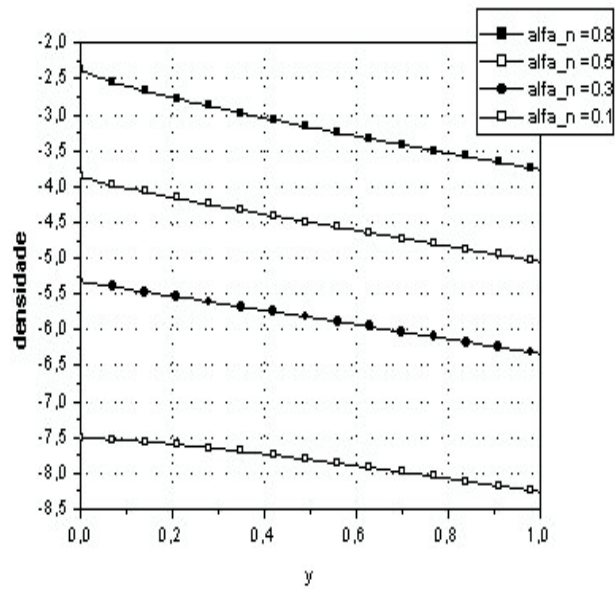


Figura 7.23 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Densidade,  $\alpha_t = 0,5$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

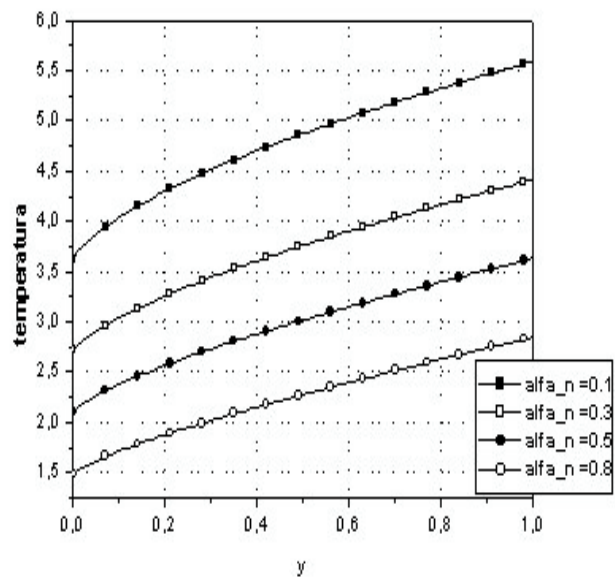


Figura 7.24 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura,  $\alpha_t = 0,5$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

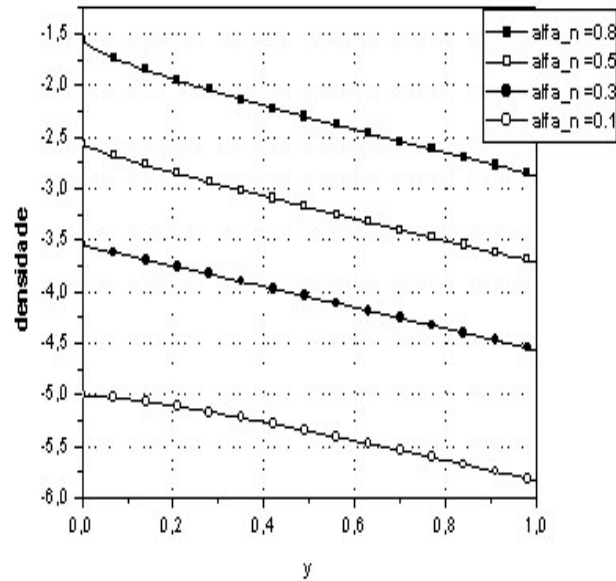


Figura 7.25 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Densidade,  $\alpha_t = 0.5$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

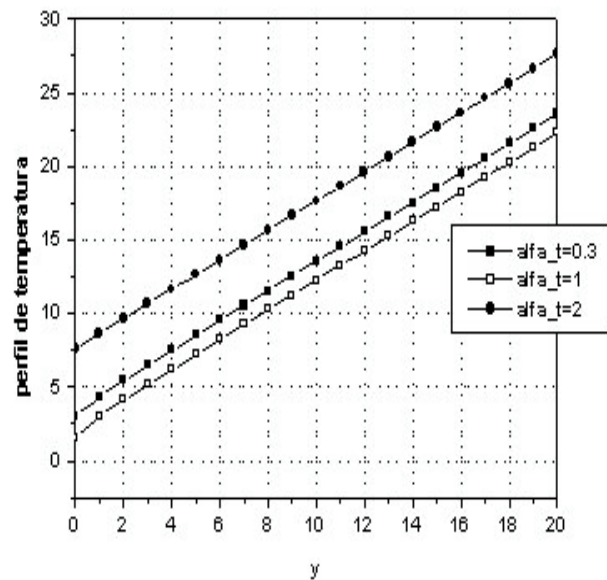


Figura 7.26 – Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura,  $\alpha_n = 0.5$ .

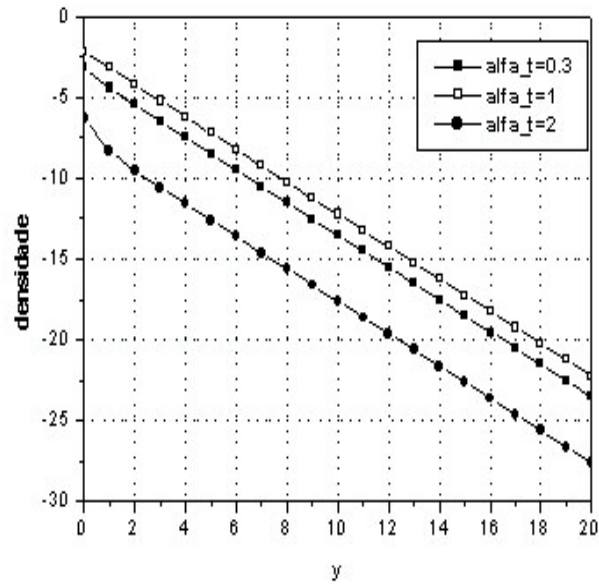


Figura 7.27 – Salto de Temperatura - Modelo BGK - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Densidade,  $\alpha_n = 0.5$ .

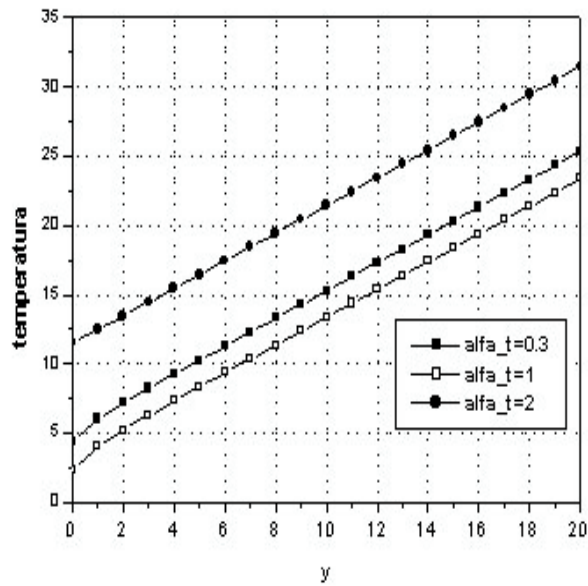


Figura 7.28 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura,  $\alpha_n = 0.5$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

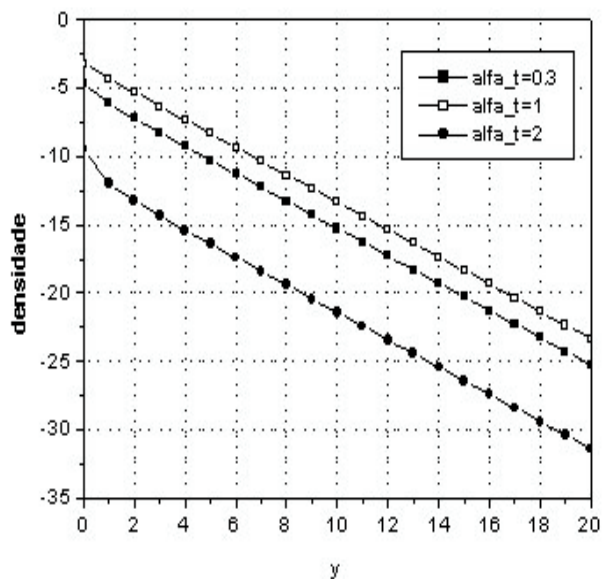


Figura 7.29 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Densidade,  $\alpha_n = 0.5$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

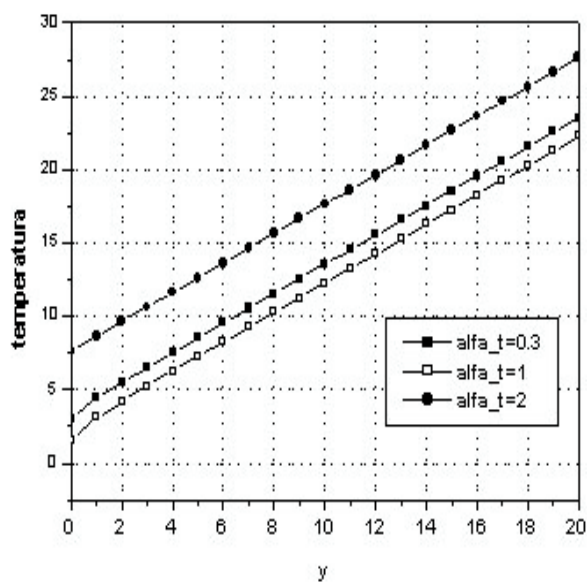


Figura 7.30 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Temperatura,  $\alpha_n = 0.5$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

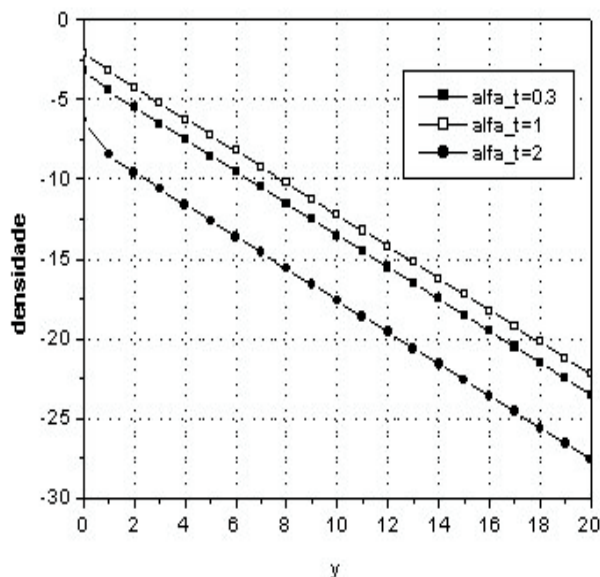


Figura 7.31 – Salto de Temperatura - Modelo S - Condições de Contorno de Cercignani-Lampis - Desvio de Densidade,  $\alpha_n = 0.5$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

### 7.2.7 Problemas de Mistura de Gases

Nesta subseção, para avaliar as grandezas físicas dos problemas, Salto de Temperatura, Deslizamento Viscoso e Deslizamento Térmico para problemas de mistura de gases, incluindo os coeficientes de deslizamento e de salto, que são usados quando aplicadas as condições de contorno de salto de temperatura e de velocidade de deslizamento nas equações da hidrodinâmica, escolhe-se usar dois casos de misturas de gases definidos por Sharipov e Kalempa [Sharipov e Kalempa, 2003]. Estes casos referem-se as misturas dos seguintes gases nobres: i) Neônio (Ne) - Argônio (Ar) e ii) Hélio (He) - Xenônio (Xe). Para o modelo de esferas rígidas que é o modelo de interação entre as moléculas usado neste trabalho, segundo Siewert [Siewert, 2004], tem-se que o modelo de McCormack requer somente três razões, a razão entre as massas ( $m_1/m_2$ ), a razão entre as densidades ( $n_1/n_2$ ) e a razão entre os diâmetros moleculares ( $d_1/d_2$ ). Para calcular os diâmetros moleculares  $d_\alpha$  para todas as espécies  $\alpha$ , segundo Sharipov e Kalempa [Sharipov e Kalempa, 2003] usa-se a expressão da viscosidade  $\mu_\alpha$  para um gás simples, obtida da equação de Boltzmann para o modelo de



esferas rígidas [Pekeris, 1955; Pekeris e Alterman, 1957]. Através dos dados experimentais das viscosidades  $\mu_\alpha$  para os gases simples, Ne, Ar, He e Xe à temperatura  $T_0 = 300$  K encontrados na Ref. [Kestin et al., 1984], obtém-se os diâmetros  $d_1$  e  $d_2$ . Com isso, as razões entre os diâmetros  $d_2/d_1$  valem

- para a mistura Ne-Ar:  $d_2/d_1 = 1.406$ .
- para a mistura He-Xe:  $d_2/d_1 = 2.226$ .

Ainda, considera-se os seguintes dados:

- para a mistura Ne-Ar:  $m_2 = 39.948$  e  $m_1 = 20.183$ .
- para a mistura He-Xe:  $m_2 = 131.30$  e  $m_1 = 4.0026$ .

Os resultados que, a seguir, serão encontrados para estes dois casos, serão desenvolvidos em termos da concentração molar (em termos da primeira partícula) como

$$C = \frac{n_1/n_2}{1 + n_1/n_2}. \quad (7.2)$$

## Problema de Salto de Temperatura

Apresenta-se, nas tabelas 7.48 - 7.50, resultados numéricos do coeficiente de salto de temperatura para várias combinações dos coeficientes de acomodação  $a_{t1}$ ,  $a_{n1}$ ,  $a_{t2}$  e  $a_{n2}$ . Limita-se a apresentação destes resultados para o caso onde  $a_{t1} = a_{n1} = a_{t2} = a_{n2}$ , por ser considerado mais importante. Os resultados numéricos para o desvio de temperatura e densidade são apresentados na tabela 7.51.

Uma forma de testar os resultados obtidos para problemas de mistura de gases é reduzi-los para o caso de um gás. Esta redução, para um gás simples, pode ser realizada por meio de um dos seguintes caminhos: i)  $n_1 = 0$ , para que as quantidades com subscrito 2 produzam resultados de um gás simples. ii)  $n_2 = 0$ , para que as quantidades com subscrito 1 dêem resultados de um único gás. iii)  $m_1 = m_2$  e  $d_1 = d_2$ . Os resultados obtidos quando reduz-se para um gás é mostrado, mais claramente, na tabela 7.50 que pode ser comparada com os resultados obtidos para o coeficiente de salto de temperatura, modelo S, no caso de um gás que são apresentados na tabela 7.35. Nota-se que os problemas de mistura de gases baseados no modelo de McCormack [Siewert e Valougeorgis, 2004b] podem ser reduzidos para o modelo S, [Sharipov e Seleznev, 1998], quando os dados da mistura de gases são

reduzidos para os de um gás.

Tabela 7.48 – Coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$  para a mistura Ar-Ne, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis.

	$a_{t1} = 0.1$	$a_{t1} = 0.3$	$a_{t1} = 0.5$	$a_{t1} = 0.7$	$a_{t1} = 0.9$	$a_{t1} = 1.0$
	$a_{n1} = 0.1$	$a_{n1} = 0.3$	$a_{n1} = 0.5$	$a_{n1} = 0.7$	$a_{n1} = 0.9$	$a_{n1} = 1.0$
	$a_{t2} = 0.1$	$a_{t2} = 0.3$	$a_{t2} = 0.5$	$a_{t2} = 0.7$	$a_{t2} = 0.9$	$a_{t2} = 1.0$
$C$	$a_{n2} = 0.1$	$a_{n2} = 0.3$	$a_{n2} = 0.5$	$a_{n2} = 0.7$	$a_{n2} = 0.9$	$a_{n2} = 1.0$
0.0	22.06522	7.185093	4.170615	2.881395	2.185796	1.954073
0.1	21.97977	7.158752	4.155918	2.871552	2.178514	1.947628
0.2	21.91957	7.140548	4.145917	2.864939	2.173673	1.943362
0.3	21.88117	7.129242	4.139847	2.861005	2.170842	1.940884
0.4	21.86167	7.123799	4.137065	2.859282	2.169653	1.939863
0.5	21.85880	7.123386	4.137047	2.859390	2.169805	1.940024
0.6	21.87088	7.127379	4.139400	2.861036	2.171066	1.941156
0.7	21.89694	7.135399	4.143872	2.864031	2.173283	1.943118
0.8	21.93693	7.147371	4.150394	2.868312	2.176398	1.945857
0.9	21.99203	7.163627	4.159136	2.873985	2.180485	1.949434
1.0	22.06522	7.185093	4.170615	2.881395	2.185796	1.954073

$C$  = Concentração Molecular.

$a_{n1}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 1.

$a_{t1}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 1.

$a_{n2}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 2.

$a_{t2}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 2.

Tabela 7.49 – Coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$  para a mistura Xe-He, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis.

	$a_{t1} = 0.1$	$a_{t1} = 0.3$	$a_{t1} = 0.5$	$a_{t1} = 0.7$	$a_{t1} = 0.9$	$a_{t1} = 1.0$
	$a_{n1} = 0.1$	$a_{n1} = 0.3$	$a_{n1} = 0.5$	$a_{n1} = 0.7$	$a_{n1} = 0.9$	$a_{n1} = 1.0$
	$a_{t2} = 0.1$	$a_{t2} = 0.3$	$a_{t2} = 0.5$	$a_{t2} = 0.7$	$a_{t2} = 0.9$	$a_{t2} = 1.0$
$C$	$a_{n2} = 0.1$	$a_{n2} = 0.3$	$a_{n2} = 0.5$	$a_{n2} = 0.7$	$a_{n2} = 0.9$	$a_{n2} = 1.0$
0.0	22.06522	7.185093	4.170615	2.881395	2.185796	1.954073
0.1	21.23276	6.917439	4.016859	2.776168	2.106652	1.883571
0.2	21.12203	6.878758	3.993664	2.759947	2.094335	1.872570
0.3	21.36314	6.955247	4.037343	2.789851	2.116923	1.892737
0.4	21.83383	7.107682	4.125482	2.850609	2.162967	1.933886
0.5	22.49195	7.322116	4.249976	2.936643	2.228260	1.992269
0.6	23.32958	7.595649	4.409046	3.046695	2.311837	2.067018
0.7	24.35136	7.929458	4.603247	3.181082	2.413900	2.158302
0.8	25.52742	8.313405	4.826498	3.335485	2.531097	2.263097
0.9	26.48286	8.624813	5.007250	3.460240	2.625587	2.347510
1.0	22.06522	7.185093	4.170615	2.881395	2.185796	1.954073

$C$  = Concentração Molecular.

- $a_{n1}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 1.  
 $a_{t1}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 1.  
 $a_{n2}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 2.  
 $a_{t2}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 2.

Tabela 7.50 – Coeficiente de salto de temperatura  $\zeta$  para mistura de gases, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis,  
( $C = 0$  ou  $C = 1$  ou  $m_1 = m_2, d_1 = d_2$ ).

	$a_{t1} = 0.1$	$a_{t1} = 0.3$	$a_{t1} = 0.4$	$a_{t1} = 0.5$	$a_{t1} = 0.7$	$a_{t1} = 0.9$	$a_{t1} = 1.0$
	$a_{n1} = 0.1$	$a_{n1} = 0.3$	$a_{n1} = 0.4$	$a_{n1} = 0.5$	$a_{n1} = 0.7$	$a_{n1} = 0.9$	$a_{n1} = 1.0$
	$a_{t2} = 0.1$	$a_{t2} = 0.3$	$a_{t2} = 0.4$	$a_{t2} = 0.5$	$a_{t2} = 0.7$	$a_{t2} = 0.9$	$a_{t2} = 1.0$
	$a_{n2} = 0.1$	$a_{n2} = 0.3$	$a_{n2} = 0.4$	$a_{n2} = 0.5$	$a_{n2} = 0.7$	$a_{n2} = 0.9$	$a_{n2} = 1.0$
Ar-Ne	22.06522	7.185093	5.303377	4.170615	2.881395	2.185796	1.954073
Xe-He	22.06522	7.185093	5.303377	4.170615	2.881395	2.185796	1.954073

- $a_{n1}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 1.  
 $a_{t1}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 1.  
 $a_{n2}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 2.  
 $a_{t2}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 2.

Tabela 7.51 – Desvio de temperatura  $T(y)$  e densidade  $N(y)$  para mistura de gases Xe-He, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis, com  $C = 0.3$ ,  $a_{t1} = 0.3$ ,  $a_{n1} = 0.3$ ,  $a_{t2} = 0.6$ ,  $a_{n2} = 0.6$ ,  $\zeta = 5.525424$ .

$y$	$N_1(y)$	$N_2(y)$	$T_1(y)$	$T_2(y)$
0.0	-5.493198	-4.102976	4.915468	3.279169
0.1	-5.590734	-4.348096	5.157214	3.664533
0.2	-5.667658	-4.536569	5.334669	3.929495
0.3	-5.739575	-4.709907	5.491867	4.157078
0.4	-5.809000	-4.874959	5.637282	4.362902
0.5	-5.876937	-5.034542	5.774712	4.553894
0.6	-5.943897	-5.190134	5.906284	4.733911
0.7	-6.010174	-5.342622	6.033344	4.905380
0.8	-6.075953	-5.492585	6.156806	5.069953
0.9	-6.141358	-5.640427	6.277337	5.228815
1.0	-6.206474	-5.786444	6.395423	5.382854
2.0	-6.850055	-7.179168	7.498254	6.759682
3.0	-7.489040	-8.496143	8.535711	7.980412
4.0	-8.127294	-9.767544	9.549063	9.125813
5.0	-8.765803	-11.00806	10.55226	10.22720
6.0	-9.404883	-12.22663	11.55110	11.30028
7.0	-10.04461	-13.42920	12.54822	12.35407
8.0	-10.68495	-14.61991	13.54486	13.39425
9.0	-11.32585	-15.80174	14.54160	14.42457
10.0	-11.96723	-16.97684	15.53866	15.44761
20.0	-18.39433	-28.57546	25.52670	25.51903

$\zeta$  = Coeficiente de Salto de Temperatura.

$C$  = Concentração Molecular.

$a_{n1}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 1.

$a_{t1}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 1.

$a_{n2}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 2.

$a_{t2}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 2.

## Problema de Deslizamento Viscoso e Problema de Deslizamento Térmico

Nas tabelas 7.52 - 7.54 lista-se alguns resultados típicos para o problema de deslizamento viscoso e, similarmente, resultados para o problema de deslizamento térmico são apresentados nas tabelas 7.55 - 7.57. Confia-se que os resultados encontrados aqui são corretos em função de se ter reproduzido o trabalho da Ref. [Siewert e Valougeorgis, 2004a] com sucesso, objetivando a correta formulação matemática e implementação computacional deste trabalho. Por fim, acredita-se, também, que estes resultados numéricos estão corretos, pois eles representam resultados conhecidos quando reduzidos ao caso de um gás, que pode ser verificado, por exemplo, comparando-se as tabelas 7.28 e 7.54 ou na Ref. [Siewert e Sharipov, 2002].

Tabela 7.52 – Problema de Deslizamento Viscoso: perfil de velocidade para cada espécie para o caso  $a_{t1} = 1$ ,  $a_{n1} = 1$ ,  $a_{t2} = 1$ ,  $a_{n2} = 1$  e  $C = 0.5$ .

$y$	Ne-Ar		He-Xe	
	$u_1(y)$	$u_2(y)$	$u_1(y)$	$u_2(y)$
0.0	7.607525(-1)	9.752892(-1)	9.751199(-1)	4.886939
0.1	9.322563(-1)	1.249272	1.142843	6.011877
0.2	1.067638	1.454175	1.277083	6.862850
0.3	1.192604	1.639332	1.401451	7.633247
0.4	1.311800	1.813698	1.520302	8.358803
0.5	1.427230	1.981120	1.635532	9.055052
0.6	1.539988	2.143674	1.748182	9.730467
0.7	1.650745	2.302627	1.858893	10.39026
0.8	1.759948	2.458814	1.968095	11.03792
0.9	1.867911	2.612817	2.076090	11.67588
1.0	1.974865	2.765058	2.183101	12.30592
5.0	6.040206	8.497333	6.252943	35.79614
10.0	11.04473	15.53851	11.25954	64.48690

Tabela 7.53 – Problema de Deslizamento Viscoso: perfil de fluxo de calor para cada espécie para o caso  $a_{t1} = 1$ ,  $a_{n1} = 1$ ,  $a_{t2} = 1$ ,  $a_{n2} = 1$  e  $C = 0.5$ .

$y$	Ne-Ar		He-Xe	
	$q_1(y)$	$q_2(y)$	$q_1(y)$	$q_2(y)$
0.0	1.884656(-1)	2.133823(-1)	2.294077(-1)	1.055696(-1)
0.1	1.527413(-1)	1.541230(-1)	1.887585(-1)	7.966439(-1)
0.2	1.330377(-1)	1.256960(-1)	1.665674(-1)	6.653003(-1)
0.3	1.181976(-1)	1.060227(-1)	1.500060(-1)	5.717504(-1)
0.4	1.061909(-1)	9.113712(-2)	1.366698(-1)	4.993868(-1)
0.5	9.612098(-2)	7.933891(-2)	1.254998(-1)	4.409613(-1)
0.6	8.748702(-2)	6.971021(-2)	1.159103(-1)	3.925004(-1)
0.7	7.997164(-2)	6.169027(-2)	1.075353(-1)	3.515428(-1)
0.8	7.335720(-2)	5.490840(-2)	1.001274(-1)	3.164406(-1)
0.9	6.748600(-2)	4.910567(-2)	9.351042(-2)	2.860288(-1)
1.0	6.223914(-2)	4.409366(-2)	8.755311(-2)	2.594507(-1)
5.0	5.296359(-3)	1.936739(-3)	1.303762(-2)	1.426583(-2)
10.0	4.92230(-4)	1.052463(-4)	2.118219(-3)	6.493820(-4)

Tabela 7.54 – Coeficiente de deslizamento viscoso  $\zeta$  para a mistura Ar-Ne, modelo de McCormack, condições de contorno de Cercignani-Lampis.

	$a_{t1} = 0.1$	$a_{t1} = 0.5$	$a_{t1} = 0.75$	$a_{t1} = 1.0$
	$a_{n1} = 0.1$	$a_{n1} = 0.5$	$a_{n1} = 0.75$	$a_{n1} = 1.0$
	$a_{t2} = 0.1$	$a_{t2} = 0.5$	$a_{t2} = 0.75$	$a_{t2} = 1.0$
$C$	$a_{n2} = 0.1$	$a_{n2} = 0.5$	$a_{n2} = 0.75$	$a_{n2} = 1.0$
0.0	17.09461	2.825386	1.617514	1.018372
0.1	17.19499	2.838647	1.624118	1.020065
0.2	17.30080	2.857874	1.636045	1.028702
0.3	17.38884	2.873917	1.645992	1.035932
0.4	17.45559	2.886143	1.653604	1.041537
0.5	17.49675	2.893803	1.658412	1.045186
0.6	17.50724	2.896021	1.659892	1.046520
0.7	17.48085	2.891736	1.657407	1.045100
0.8	17.40995	2.879659	1.650186	1.040396
0.9	17.28514	2.858200	1.637280	1.031755
1.0	17.09461	2.825386	1.617514	1.018372

$C$  = Concentração Molecular.

$a_{n1}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 1.

$a_{t1}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 1.

$a_{n2}$  = coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás 2.

$a_{t2}$  = coeficiente de acomodação do momento tangencial do gás 2.

Tabela 7.55 – Problema de Deslizamento Térmico: perfil de velocidade para cada espécie para o caso  $a_{t1} = 1$ ,  $a_{n1} = 1$ ,  $a_{t2} = 1$ ,  $a_{n2} = 1$  e  $C = 0.5$ .

$y$	Ne-Ar		He-Xe	
	$u_1(y)$	$u_2(y)$	$u_1(y)$	$u_2(y)$
0.0	1.704357(-1)	1.515959(-1)	1.791468(-1)	2.110872(-1)
0.1	2.464230(-1)	2.356889(-1)	2.448821(-1)	3.213047(-1)
0.2	2.918820(-1)	2.817603(-1)	2.834002(-1)	3.774541(-1)
0.3	3.268847(-1)	3.158722(-1)	3.126157(-1)	4.167961(-1)
0.4	3.554683(-1)	3.430863(-1)	3.361818(-1)	4.467584(-1)
0.5	3.795198(-1)	3.656661(-1)	3.558020(-1)	4.706592(-1)
0.6	4.001400(-1)	3.848730(-1)	3.724643(-1)	4.903300(-1)
0.7	4.180503(-1)	4.014985(-1)	3.868119(-1)	5.069013(-1)
0.8	4.337559(-1)	4.160774(-1)	3.992947(-1)	5.211283(-1)
0.9	4.476429(-1)	4.289914(-1)	4.102434(-1)	5.335119(-1)
1.0	4.599898(-1)	4.405229(-1)	4.199098(-1)	5.444465(-1)
5.0	5.868536(-1)	5.703197(-1)	5.136170(-1)	6.886587(-1)
10.0	5.966747(-1)	5.827870(-1)	5.209557(-1)	7.196544(-1)

Tabela 7.56 – Problema de Deslizamento Térmico: perfil de fluxo de calor para cada espécie para o caso  $a_{t1} = 1$ ,  $a_{n1} = 1$ ,  $a_{t2} = 1$ ,  $a_{n2} = 1$  e  $C = 0.5$ .

$y$	Ne-Ar		He-Xe	
	$q_1(y)$	$q_2(y)$	$q_1(y)$	$q_2(y)$
0.0	-8.970516(-1)	-7.644809(-1)	-9.943901(-1)	-8.894029(-1)
0.1	-1.125010	-9.914723(-1)	-1.198131	-1.129607
0.2	-1.254325	-1.114233	-1.314792	-1.260615
0.3	-1.350500	-1.203065	-1.402074	-1.355445
0.4	-1.426927	-1.272129	-1.471864	-1.429073
0.5	-1.489798	-1.327885	-1.529654	-1.488383
0.6	-1.542664	-1.373986	-1.578587	-1.537293
0.7	-1.587808	-1.412750	-1.620679	-1.578295
0.8	-1.626807	-1.445760	-1.657319	-1.613096
0.9	-1.660804	-1.474148	-1.689513	-1.642920
1.0	-1.690661	-1.498757	-1.718016	-1.668681
5.0	-1.970240	-1.704595	-2.014218	-1.873339
10.0	-1.987119	-1.712693	-2.042389	-1.877051

Tabela 7.57 – Problema de Deslizamento Térmico: Coeficientes de deslizamento térmico para o caso  $a_{t1} = 0.3$ ,  $a_{n1} = 0.5$ ,  $a_{t2} = 0.6$  e  $a_{n2} = 0.5$ .

$C$	Ne-Ar		He-Xe	
	$\zeta_1(y)$	$\zeta_2(y)$	$\zeta_1(y)$	$\zeta_2(y)$
0.0	5.594711(-1)	5.236272(-1)	4.249534(-1)	4.879376(-1)
0.1	5.605135(-1)	5.262612(-1)	4.377243(-1)	5.082835(-1)
0.2	5.613557(-1)	5.286977(-1)	4.519047(-1)	5.320654(-1)
0.3	5.618936(-1)	5.307972(-1)	4.677616(-1)	5.600929(-1)
0.4	5.619838(-1)	5.323652(-1)	4.856492(-1)	5.935409(-1)
0.5	5.613207(-1)	5.329790(-1)	5.063363(-1)	6.358607(-1)
0.6	5.594795(-1)	5.320478(-1)	5.302437(-1)	6.886389(-1)
0.7	5.558118(-1)	5.286662(-1)	5.584248(-1)	7.582751(-1)
0.8	5.492739(-1)	5.213709(-1)	5.908178(-1)	8.511118(-1)
0.9	5.381105(-1)	5.076954(-1)	6.191940(-1)	9.656898(-1)
1.0	5.191934(-1)	4.832377(-1)	5.191934(-1)	8.959316(-1)



## CAPÍTULO 8

---

### CONCLUSÕES

Através dos resultados numéricos apresentados neste trabalho, observou-se que, utilizando-se as equações modelo e a versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) em problemas da dinâmica de gases rarefeitos com condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis), obteve-se resultados satisfatórios constatados pela análise de convergência e pela análise comparativa realizada com outros modelos existentes na literatura, quando disponíveis. Os resultados numéricos baseados no modelo S, não apresentam ganhos significativos de precisão quando comparados com resultados originados pelo modelo BGK. Observou-se, também, através dos resultados apresentados no capítulo anterior, uma forte dependência em relação aos coeficientes de acomodação  $\alpha_t$  e  $\alpha_n$ .

Desenvolveu-se um procedimento unificado no sentido de uma formulação matemática e computacional comum e concisa dos problemas básicos da dinâmica de gases rarefeitos baseado, fundamentalmente, no modelo BGK e nas condições de contorno de Cercignani-Lampis, através do método de ordenadas discretas analítico (ADO), que foi o objetivo principal deste trabalho. Estendeu-se também, de forma satisfatória a formulação matemática e computacional, já existente, para problemas de mistura de gases utilizando o modelo de McCormack incluindo as condições generalizadas (Cercignani-Lampis), usando o método de ordenadas discretas analítico (ADO), confirmando conclusões e resultados concebidos por outros autores [Sharipov e Kalempa, 2003; Sharipov e Kalempa, 2004c; Siewert e Valougeorgis, 2004b; Siewert e Valougeorgis, 2004a; Siewert, 2004], como por exemplo, a verificação de resultados via redução de um problema de mistura de gases para um problema de um gás simples.

Finalmente, considera-se que o objetivo deste trabalho foi alcançado, pois:

- desenvolveu-se uma formulação matemática e computacional comum para os problemas

básicos da dinâmica de gases rarefeitos para o caso de um gás utilizando-se o modelo BGK e as condições de contorno de Cercignani-Lampis, através do método ADO;

- encontrou-se resultados numéricos que ainda não estavam disponíveis na literatura, baseados no modelo S para o caso de um gás e no modelo de McCormack para mistura de gases com condições de contorno de Cercignani-Lampis, utilizando-se a versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO);
- para todos os resultados numéricos gerados neste trabalho, a solução em ordenadas discretas analítica se mostrou eficiente e exata, conseguindo-se uma ótima convergência;
- disponibilizou-se resultados para comparações com outras equações modelo e/ou outros métodos;
- mostrou-se os efeitos dos coeficientes de acomodação na análise de resultados.

Como proposta de trabalhos futuros, pretende-se utilizar as condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis) em outros problemas de mistura de gases, como o problema de Couette e em outras equações modelo para um gás simples.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

Arkilic, E. B., Schmidt, M. A., and Breuer, K. S., 1994. “Gaseous Flow in Microchannels”, **A.S.M.E. Paper - Winter Annual Meetings in Chicago**, vol. FED-197, pp. 57.

Arkilic, E. B., Schmidt, M. A., and Breuer, K. S., 1997. “Gaseous Flow in long Microchannels”, **Journal of Microelectromechanical Systems**, vol. 6, pp. 167.

Arkilic, E. B., Schmidt, M. A., and Breuer, K. S., 2001. “Mass flow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels”, **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 437, pp. 29.

Avelino, M. and Kakaç, S., 2004. “Convective Heat Transfer in Microchannels - A Review”, **Proceedings of the 10<sup>o</sup> Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**. Rio de Janeiro, Brazil.

Barichello, L. B., Camargo, M., Rodrigues, P., and Siewert, C. E., 2001. “Unified Solutions 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., 2002. “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., Garcia, R. D. M., and Siewert, C. E., 2000. “Particular Solutions for the Discrete-Ordinates Method”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 64, pp. 219.

Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 1999. "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., 2000. "The Temperature-Jump Problem in Rarefied-Gas Dynamics", **European Journal of Applied Mathematics**, vol. 11, pp. 353.

Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 2002. "Some Comments on Modeling the Linearized Boltzmann Equations", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 77, pp. 43.

Barron, R. F., Wang, X. M., Warrington, R. O., and Ameal, T. A., 1997. "The Graetz problem extended to slip flow", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 40, pp. 1817.

Bartz, A. C. R., 2000. "Um Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos com Frequência de Colisão Variável", Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, RS, Brasil.

Beskok, A. and Karniadakis, G. E., 1994. "Simulation of heat and momentum transfer in complex microgeometries", **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, vol. 8, pp. 647.

Beskok, A., Karniadakis, G. E., and Trimmer, W., 1996. "Rarefaction and compressibility effects in gas microflows", **Journal of Fluids Engineering**, vol. 118, pp. 448.

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.

Boltzmann, L., 1872. "Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gas-molekülen", **Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften**, vol. 60, pp. 275.

Burden, R. L. and Faires, J. D., 1997. "Numerical Analysis". Brooks/Cole Publishing Company, Boston.

Cabrera, L. C., 2003. “**Derivação e Solução de Equações Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada - UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.

Cabrera, L. C. and Barichello, L. B., 2004. “Unified Solutions to Some Classical Problems in Rarefied Gas Dynamics Based on the S model equations”. submetido à publicação.

Camargo, M., 2003. “**Soluções Unificadas para Modelos com Frequência de Colisão Variável da Dinâmica de Gases Rarefeitos**”, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.

Camargo, M. and Barichello, L. B., 2004. “Unified Approach for Variable Collision Frequency Models in Rarefied Gas Dynamics”, **TTSP**. em impressão.

Case, K. M., 1960. “Elementary Solutions of the Transport Equation and Their Applications”, **Annals of Physics**, vol. 9, pp. 1.

Cercignani, C., 1965a. “Plane Couette Flow According to the Method of Elementary Solutions”, **Journal of Mathematical Analysis and Applications**, vol. 11, pp. 93.

Cercignani, C., 1965b. “Plane Poiseuille Flow According to the Method of Elementary Solutions”, **Journal of Mathematical Analysis and Applications**, vol. 12, pp. 254.

Cercignani, C., 1966. “The Method of Elementary Solutions for Kinetic Models with Velocity-Dependent Collision Frequency”, **Annals of Physics**, vol. 40, pp. 469.

Cercignani, C., 1975. “**Theory and Application of the Boltzmann Equation**”. Elsevier, New York.

Cercignani, C., 1988. “**The Boltzmann Equation and its Applications**”. Springer-Verlag, New York.

Cercignani, C., 1990. “**Mathematical Methods in Kinetic Theory**”. Plenum Press, New York.

Cercignani, C., 2000. “**Rarefied Gas Dynamics**”. Cambridge Texts in Applications Mathematics, Cambridge University Press.

Cercignani, C., Illner, R., and Pulvirenti, M., 1994. “**The Mathematical Theory of Dilute Gases**”. Springer.

Cercignani, C. and Lampis, M., 1971. “Kinetic Model for Gas-Surface Interaction”, **Transport Theory and Statistical Physics**, vol. 1, pp. 101.

Cercignani, C., Lampis, M., and Lorenzani, S., 2004. “Variational Approach to Gas Flows in Microchannels”, **Physics of Fluids**, vol. 16, pp. 3426.

Chandrasekhar, S., 1950. “**Radiative Transfer**”. Oxford University Press, London.

Chapman, S. and Cowling, T. G., 1970. “**The Mathematical Theory of Non-uniform Gases**”. Cambridge University Press, New York.

Choi, W. K. H., Barron, R. F., and Warrington, R. O., 1991. “Fluid flow and heat transfer in microtubes”, **A.S.M.E. Paper**, vol. DSC-32, pp. 123.

Chu, R. K.-H. and Zohar, Y., 2000. “A classic of discrete kinetic solutions for non-boundary-driven gas flow”, **J. Non-Equilib. Thermodyn.**, vol. 25, pp. 49.

Colin, S., Aubert, C., and Caen, R., 1998. “Unsteady gaseous flows in rectangular microchannels: frequency response of one or two pneumatic lines connected in series”, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 17, pp. 79.

Davis, P. J. and Polonsky, I., 1964. “**Numerical Interpolation, Differentiation and Integration**”. Handbook of Mathematical Function, M. Abramowitz and I. A. Stegun, Eds., National Bureau of Standards, Washington.

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.

Dushman, S., 1962. “**Scientific Foundation of Vacuum Technique**”. John Wiley and Sons, New York.

Ebert, W. A. and Sparrow, E. M., 1965. “Slip flow in rectangular and annular ducts”, **Journal Basic of Engineering**, vol. 87, pp. 1018.

Fan, J., Boyd, I. D., Cai, C. P., Hennighausen, K., and Candler, G. V., 2001. "G. V. Computation of Rarefied Gas Flow around a NACA 0012 airfoil", **AIAA Journal**, vol. 39, pp. 618.

Fatikow, S. and Rembold, U., 1997. "**Microsystem Technology and Micro-robotics**". Springer, New York.

Garcia, R. D. M., 2002. "Métodos para Solução da Equação de Transporte de Partículas Integro-Diferencial", **Em: Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras**. PUC-Porto Alegre- RS.

Garcia, R. D. M. and Siewert, C. E., 2004. "The McCormack Model for Gas Mixtures: Heat Transfer in a Plane Channel", **Physics of Fluids**, vol. 16, pp. 3393.

Gou, Z. Y. and Wu, X. B., 1997. "Compressibility effect on the gas flow and heat transfer in a microtube", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 40, pp. 3251.

Gravesen, P., Branebjerg, J., and Jensen, O. S., 1993. "Microfluidics - a review", **Journal of Micromechanics Microengineering**, vol. 3, pp. 168.

Harley, J. C., Huang, Y. H., Bau, H. H., and Zemel, J. N., 1995. "Gas Flow in micro-channels", **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 284, pp. 257.

Ho, C. M. and Tai, Y. C., 1998. "Micro-electro-mechanical systems (MEMS)", **Annu. Rev. Fluid Mech.**, vol. 30, pp. 579.

Hunter, R. J., 1981. "**Tzeta Potential in Colloid Science Principles and applications**". Academic.

Jeans, J. H., 1917. "The Equations of Radiative Transfer of Energy", **Mon. Not. Royal Astron. Soc.**, vol. 78, pp. 28.

Kennard, E. H., 1938. "**Kinetic theory of gases**". McGraw-Hill Book Company, New York.

Kestin, J., Knierim, K., Mason, E. A., Najafi, B., Ro, S. T., and Waldman, M., 1984. "Equilibrium and Transport Properties of the noble gases and their mixture at low densities.", **J. Phys. Chem. Ref. Data**, vol. 13, pp. 229.

Knackfuss, R. F. and Barichello, L. B., 2003a. "A Discrete-Ordinates Solution to the Poiseuille Flow Problem in the Rarefied Gas Dynamics Based on the BGK Model with Generalized Boundary Conditions", **Proceedings of the XXIV Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CD-Rom**. UFOP-Ouro Preto-MG-Brazil.

Knackfuss, R. F. and Barichello, L. B., 2003b. "Uso de Condições de Contorno Generalizadas no Estudo de Efeitos de Superfície na Dinâmica de um Gás Rarefeito", **Proceedings do XXVI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - CD-Rom**. São José do Rio Preto-SP-Brasil.

Knackfuss, R. F. and Barichello, L. B., 2004a. "Dinâmica de Gases Rarefeitos em Microcanais", **Proceedings do XXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - CD-Rom**. Porto Alegre, Brasil.

Knackfuss, R. F. and Barichello, L. B., 2004b. "On the Temperature-Jump Problem in Rarefied Gas Dynamics: The Effect of the Cercignani-Lampis Boundary Conditions". em preparação.

Knackfuss, R. F. and Barichello, L. B., 2004c. "Surface Effects in Rarefied Gas Dynamics: An Analysis Based on the Cercignani-Lampis Boundary Conditions". submetido à publicação.

Knackfuss, R. F., Camargo, M., and Barichello, L. B., 2004. "On the Temperature-Jump Problem in Rarefied Gas Dynamics", **Proceedings of the 10<sup>o</sup> Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering - CD-Rom**. Rio de Janeiro, Brazil.

Kogan, M. N., 1992. "Kinetic Theory in Aerothermodynamics", **Program in Aerospace Science**, vol. 29, pp. 271.



Kriese, J. T., Chang, T. S., and Siewert, C. E., 1974. "Elementary Solutions of Coupled Model Equations in the Kinetic Theory of Gases", **International Journal of Engineering Science**, vol. 12, pp. 441.

Lee, S. Y. K., Wong, M., and Zohar, Y., 2001. "Gas flow in microchannels with bends", **Journal of Micromechanics Microengineering**, vol. 11, pp. 635.

Lee, S. Y. K., Wong, M., and Zohar, Y., 2002a. "Microchannels in series connected via a contraction/expansion section with bends", **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 459, pp. 187.

Lee, S. Y. K., Wong, M., and Zohar, Y., 2002b. "Pressure loss in constriction microchannels", **Journal of Microelectromechanics Systems**, vol. 11, pp. 236.

Liu, J. Q., Tai, Y. C., Pong, K. C., and Ho, C. M., 1993. "Micromachined channel/pressure sensor systems for micro flow studies", **Proc. 7th Intl. Conf. Solid-State Sensors and Actuators**, vol. Transducer'93, pp. 995.

Lo, S. S., Loyalka, S. K., and Storvick, T. S., 1984. "Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. V. Flow of polyatomic gases in a cylindrical tube with arbitrary accommodation at the superface", **J. Chem. Phys.**, vol. 81, pp. 2439.

Loyalka, S. K., 1971. "Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect I", **J. Chem. Phys.**, vol. 55, pp. 4497.

Loyalka, S. K. and Ferziger, J. H., 1968. "Model Dependence of the Temperature Slip Coefficient", **Physics of Fluids**, vol. 11, pp. 1668.

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

McCormack, F. J., 1973. "Construction of linearized kinetic models for gaseous mixtures and molecular gases", **Physics of Fluids**, vol. 16, pp. 2095.

Meinhart, C. D., Wereley, S. T., and Santiago, J. G., 1999. "PIV measurements of a microchannel flow", **Exps. Fluids**, vol. 27, pp. 414.

Naris, S., Valougeorgis, D., Sharipov, F., and Kalempa, D., 2004. "Discrete Velocity modelling of gaseous mixture flows in MEMS", **Superlattices and Microstructures**, vol. 35, pp. 629.

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.

Onishi, Y., 1997. "Kinetic Theory Analysis for Temperature and Density fields of a Slightly Rarefied Binary gas Mixture Over a Solid Wall", **Physics of Fluids**, vol. 9, pp. 226.

Pekeris, C. L., 1955. "Solutions of the Boltzmann-Hilbert Integral Equation.", **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, vol. 41, pp. 661.

Pekeris, C. L. and Alterman, Z., 1957. "Solutions of the Boltzmann-Hilbert Integral Equation II. The Coefficients of Viscosity and Heat Conduction.", **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, vol. 43, pp. 998.

Pfahler, J., Harley, J. C., Bau, H., and Zemel, J. N., 1990. "Liquid and Gas Transport in Small Channels", **ASME DSC**, vol. 19, pp. 149.

Pfahler, J., Harley, J. C., Bau, H., and Zemel, J. N., 1991. "Gas and Liquid Flow in Small Channels", **ASME DSC**, vol. 32, pp. 49.

Piekos, E. S. and k. S. Breuer, 1996. "Numerical modeling of micromechanical devices using the direct simulation Monte Carlo method", **Journal of Fluids Engineering**, vol. 118, pp. 464.

Podgórk, A., 1999. "Effect of particle-surface fluid dynamic interactions on the aerosol particle collection efficiency on a single fibre by inertial impaction and interception", **Journal of Aerosol Sciences**, vol. 30-S1, pp. 753.

Pol, F. C. M. V. D. and Branebjerg, J., 1990. "Micro liquid-handling devices- A review". MST, Berlin.

Pong, K. C., Ho, C. M., Liu, J. Q., and Tai, Y. C., 1994. “Non-linear pressure distribution in uniform microchannels”, **A.S.M.E. Paper**, vol. FED-197, pp. 51.

Porodnov, B. T., Kulev, A. N., and Tukhvetov, F. T., 1978. “Thermal transpiration in a circular capillary with a small temperature difference”, **J. Fluid Mech**, vol. 88, pp. 609.

Porodnov, B. T., Suetin, P. E., Borisov, S. F., and Akinshin, V. D., 1974. “Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels”, **J. Fluid Mech**, vol. 64, pp. 417.

Rodrigues, P., 2003. “**Dinâmica de Gases Rarefeitos e Transferência Radiativa: Aplicações em Geometria Cilíndrica**”, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.

Rostami, A. A., Mujumdar, A. S., and Saniei, N., 2002. “Flow and heat transfer for gas flowing in microchannels: a review”, **Heat and Mass Transfer**, vol. 38, pp. 359.

Roth, A., 1976. “**Vacuum Technology**”. North-Holland Publishing Company, Amsterdam.

Sanchez, R. and McCormick, N. J., 1982. “A Review of Neutron Transport Approximations”, **Nucl. Sci. Eng.**, vol. 80, pp. 481.

Schaaf, S. A. and Chambre, P. L., 1961. “**Flow of Rarefied Gases**”. Princeton University Press.

Schuster, A., 1905. “Radiation through a Foggy Atmosphere”, **Astrophysics**, vol. 21, pp. 1.

Schwarzschild, K., 1906. “Ueber das Gleichgewicht der Sonnenatmosphäre”, **Göttinger Nachrichten Math.-Phys. Klasse**, vol. , pp. 41.

Shakhov, E. M., 1974. “**Method of Investigation of Rarefied Gas Flows**”. Nauka, Moscow. in Russian.

Sharipov, F., 1994a. “Onsanger-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. I. General theory for single gas”, **Physica A**, vol. 203, pp. 437.

Sharipov, F., 1994b. "Onsanger-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. II. Application of the theory for single gas", **Physica A**, vol. 203, pp. 457.

Sharipov, F., 1996. "Rarefied Gas Flow Through a Long Tube at any Temperature Difference", **Journal of Vacuum Science and Technology A**, vol. 14, pp. 2627.

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

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

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

Sharipov, F., 2003a. "Application of Cercignani-Lampis Scattering Kernel to Calculations of Rarefied Gas Flows. II. Slip and jump coefficients", **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 22, pp. 133.

Sharipov, F., 2003b. "Application of 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., Cumin, L. M. G., and Kalempa, D., 2004. "Plane Couette flow of binary gaseous mixture in the whole range of the Knudsen number", **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 23, pp. 899.

Sharipov, F. and Kalempa, D., 2003. "Velocity Slip and Temperature Jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous Slip Coefficient", **Physics of Fluids**, vol. 15, pp. 1800.

Sharipov, F. and Kalempa, D., 2004a. "Velocity Slip and Temperature Jump coefficients for gaseous mixtures. II. Thermal Slip Coefficient", **Physics of Fluids**, vol. 16, pp. 760.

Sharipov, F. and Kalempa, D., 2004b. “Velocity Slip and Temperature Jump coefficients for gaseous mixtures. III. Diffusion Slip Coefficient”, **Physics of Fluids**, vol. 16, pp. 3780.

Sharipov, F. and Kalempa, D., 2004c. “Velocity Slip and Temperature Jump coefficients for gaseous mixtures. IV. Temperature Jump Coefficient”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. .

Sharipov, F. and Seleznev, V., 1998. “Data on Internal Rarefied Gas Flows”, **Journal Physical and Chemical Reference Data**, vol. 27, pp. 657.

Shih, J. C., Ho, C. M., Liu, J., and Tai, Y. C., 1996. “Monoatomic and Polyatomic Gas Flow Through Uniform Microchannels”, **National Heat Transfer Conference, DSC**, vol. 59, pp. 197.

Shoji, S. and Eshashi, M., 1994. “Microflow devices and systems”, **Journal of Micromechanics Microengineering**, vol. 4, pp. 157.

Siewert, C. E., 2000a. “A Concise and Accurate Solution to Chandrasekhar’s Basic Problem in Radiative Transfer”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 64, pp. 109.

Siewert, C. E., 2000b. “A Concise and Accurate Solution to Chandrasekhar’s Basic Problem in Radiative Transfer”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 64, pp. 109.

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

Siewert, C. E., 2001a. “Couette Flow for a Binary Gas Mixture”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 70, pp. 321.

Siewert, C. E., 2001b. “Kramer’s Problem for a Variable Collision Frequency Model”, **European Journal of Applied Mathematics**, vol. 12, pp. 179.

Siewert, C. E., 2002a. “Generalized Bondary Conditions for the S-Model Kinetic Equations Basic to Flow in a Plane Channel”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 72, pp. 75.

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

Siewert, C. E., 2002c. “Poiseuille, Thermal Creep and Couette Flow: Results Based on the CES Model of the Linearized Boltzmann Equation”, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 21, pp. 579.

Siewert, C. E., 2002d. “The Temperature-Jump Problem based on the CES Model of the Linearized Boltzmann Equation”, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**. in press.

Siewert, C. E., 2002e. “Two Half-Space problems Based on a Synthetic-Kernel Model of the Linearized Boltzmann Equation”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 75, pp. 21.

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: Concise and Accurate Solution to Basic Flow Problems”, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 54, pp. 273.

Siewert, C. E., 2003c. “Viscous-Slip, Thermal-Slip and Temperature-Jump Coefficients as Defined by Linearized Boltzmann Equation and the Cercignani-Lampis Bourdary Condition”, **Physics of Fluids**, vol. 15, pp. 1696.

Siewert, C. E., 2004. “The McCormack Model for Gas Mixtures: The Temperature-Jump Problem”, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**. em impressão.

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

Siewert, C. E. and Valougeorgis, D., 2001. "An Analytical discrete-Ordinates solution of the S-model kinetic equations for flow in a cylindrical tube", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 70, pp. 307.

Siewert, C. E. and Valougeorgis, D., 2004a. "Concise and Accurate Solutions to Half-Space Binary-Gas Flow Problems Defined by the McCormack Model and Specular-Diffuse Wall Conditions", **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 23, pp. 709.

Siewert, C. E. and Valougeorgis, D., 2004b. "The McCormack model: channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and density gradients", **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 23, pp. 645.

Siewert, C. E. and Valougeorgis, D., 2004c. "The McCormack model: channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and density gradients". submetido à publicação.

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.

Sone, Y., Ohwada, T., and Aoki, K., 1989. "Temperature Jump and Knudsen Layer in a Rarefied Gas Over a Plane Wall: Numerical Analysis of the Linearized Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules", **Physics of Fluids A**, vol. 1, pp. 363.

Sone, Y., Takata, S., and Ohwada, T., 1990. "Numerical Analysis of the Plane Couette Flow of Rarefied Gas on the Basis of the Linearized Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules", **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 9, pp. 273.

Sone, Y., Wanigughi, Y., and Aoki, K., 1996. "One-way flow of a rarefied gas induced in a channel with a periodic temperature distribution", **Physics of Fluids**, vol. 8, pp. 2227.

Sreekanth, E. S., 1968. "Slip flow through long circular tubes", **In 6th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics**, Ed. L. Trilling and H. Y Wachman, **Academic Press**, page 667. New York-EUA.

Stefanov, S. and Cercignani, C., 1994. "Monte Carlo simulation of a channel flow of a rarefied gas", **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 13, pp. 93.

Stokes, V. K., 1984. "**Theories of Fluids with Microstructure**". Springer.

Sugiyama, W., Sawada, T., and Nakamori, K., 1996. "Rarefied Gas Flow between two flat plates with two dimensional surface roughness", **Vacuum**, vol. 47, pp. 791.

Thompson, S. L. and Owens, W. R., 1975. "A survey of flow at low pressures", **Vacuum**, vol. 25, pp. 151.

Tison, S. A., 1993. "Experimental data and theoretical modeling of gas flows through metal capillary leaks", **Vacuum**, vol. 44, pp. 1171.

Vasudevaiah, M. and Balamurugan, K., 2001. "Heat transfer of rarefied gases in a corrugated microchannel", **International Journal of Thermal Sciences**, vol. 40, pp. 454.

Welander, P., 1954. "On the Temperature Jump in a Rarefied Gas", **Arkiv för Fysik**, vol. 7, pp. 507.

Wick, G. C., 1943. "Über Ebene Diffusions Problem", **Zeitschrift Fur Physik**, vol. 120, pp. 702.

Willet, L., Hashimi, S., Thompson, R. V., and Loyalka, S. K., 1999. "Effect of Superface Heterogeneities on Condensation on an Aerosol Particle", **Journal of Aerosol Sciences**, vol. 30, pp. 569.

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

Williams, M. M. R., 2001. "A Review of the Rarefied Gas Dynamics Theory Associated with Some Classical Problems in Flow and Heat Transfer", **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 52, pp. 500.



Williams, M. M. R. and Loyalka, S. K., 1992. “**Theory and Practice, With Special Applications to the Nuclear Industry**”. Pergamon Press, Oxford.

Wu, P. and Little, W. A., 1983. “Measurements of friction factors for the flow of gases in very fine channels used for microminiature Joule-Thomson refrigerators”, **Cryogenics**, vol. 23, pp. 273.

Wu, S., Mai, J., Zohar, Y., Tai, Y. C., and Ho, C. M., 1998. “A suspended microchannel with integrated temperature sensors for high-pressure flow studies”, **Proc. 11th IEEE Workshop on Micro Electro Mechanical Systems**, vol. MEMS’98, pp. 87.

Wutz, M., Adam, H., and Walcher, W., 1989. “**Theory and practice of Vacuum Technology**”. Friedr. Vieweg and Sohn, Braunschweig.

Zohar, Y., Lee, S. Y. K., Lee, W. Y., Jiang, L., and Tong, P., 2002. “Subsonic gas flow in a straight and uniform microchannel”, **J. Fluid Mech.**, vol. 472, pp. 125.

Zou, Q., Hou, S., and Doolen, G. D., 1995. “Analytical Solutions of the Lattice Boltzmann BGK Model”, **Journal of Statistical Physics**, vol. 81, pp. 319.