

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

**FLUXO DE GASES RAREFEITOS EM DUTOS CILÍNDRICOS: UMA
ABORDAGEM VIA EQUAÇÕES INTEGRAIS**

por

Carmo Henrique Kamphorst

Tese de Doutorado

Porto Alegre, agosto de 2009

**FLUXO DE GASES RAREFEITOS EM DUTOS CILÍNDRICOS: UMA
ABORDAGEM VIA EQUAÇÕES INTEGRAIS**

por

Carmo Henrique Kamphorst
Mestre em Matemática Aplicada

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

Orientadora: Prof^a. Dra. Liliane Basso Barichello

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Antônio José da Silva Neto (IPRJ - UERJ)

Prof^a. Dra. Mariza de Camargo (UFSM/CESNORS)

Prof. Dr. Jorge Rodolfo Silva Zabadal (PROMEC-UFRGS)

Prof^a. Dra. Patricia Rodrigues Fortes (URI/FW-RS)

Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 21 de agosto de 2009

Para o amor da
minha vida e companheira
de todos os momentos, Anne

AGRADECIMENTOS

Chegando ao final de mais uma etapa marcante em minha vida, não poderia deixar de agradecer à minha orientadora e pessoa fundamental na elaboração deste trabalho, Dra. Liliane Basso Barichelo, pelas orientações, pelo incentivo e pelo carinho.

À minha esposa Anne, por estar sempre do meu lado, dando amor, carinho, incentivo e compreensão.

Aos meus pais e familiares pelo carinho e por sempre terem incentivado os meus estudos.

À colega Patrícia por ter contribuído muito para a realização deste trabalho, auxiliando nas leituras e nas discussões, bem como pelo incentivo e pelas palavras de motivação.

Aos colegas do Curso de Matemática da Universidade Regional do Alto Uruguai e das Missões, Campus de Frederico Westphalen: Mariza, Nelson, Iliane e Marcia, pelo apoio recebido.

Aos colegas Caio, Janice e João pelas trocas de experiências, pelas conversas e, em especial, pela amizade e pelo carinho.

A todos os amigos que sempre torceram por mim.

E, à Deus por estar comigo e permitir mais esta conquista.

RESUMO

FLUXO DE GASES RAREFEITOS EM DUTOS CILÍNDRICOS: UMA ABORDAGEM VIA EQUAÇÕES INTEGRAIS

Neste trabalho, é estudada a descrição do fluxo de um gás rarefeito em um duto cilíndrico de comprimento infinito. A formulação matemática do problema está baseada na forma integral de equações cinéticas derivadas da Equação de Boltzmann. Particularmente são estudados os modelos cinéticos conhecidos como BGK e S. Métodos espectrais são propostos para obtenção de soluções, em forma fechada, para quantidades de interesse como o perfil de velocidade do gás, bem como taxas de fluxo. As formulações espectrais são baseadas em duas abordagens: expansão clássica em termos de Polinômios de Legendre e expansão em termos de splines cúbicas de Hermite, neste caso, associada a um esquema de colocação. A implementação das propostas produz resultados computacionais satisfatórios do ponto de vista prático. Para obtenção de resultados com maior precisão, técnicas de tratamento da singularidade do núcleo da equação integral foram introduzidas, resultando em ganho computacional significativo. Finalmente, a proposta de solução espectral para problemas em geometria cilíndrica se mostrou adequada para problemas em que se admite reflexão especular na superfície do cilindro, situação onde outras abordagens clássicas disponíveis na literatura não podem ser utilizadas.

Palavras-chave: Dinâmica de Gases Rarefeitos, Dutos cilíndricos, Equações Integrais, Métodos espectrais.

ABSTRACT

RAREFIED GASES FLOW IN CYLINDRICAL TUBE: AN APPROACH WITH INTEGRAL EQUATIONS

In this work, rarefied gas flows in cylindrical ducts are studied. The mathematical formulation of the problems are based on the integral form of kinetic equations derived from the Boltzmann equation. Particularly, the BGK and S models are studied. Spectral methods are proposed to obtain closed form solutions for quantities of interest as velocity profile of the gas as well as flow rates. The spectral formulations are based on two approaches: classical expansions in terms of Legendre Polynomials and Hermite cubic splines expansions. In this case, associated with a collocation scheme. The approaches provide good computational results, from the practical point of view. On the other hand, for obtaining higher accuracy, some techniques were introduced to deal with the inherent singularity of the integral kernel. In this context, a significant computational gain is achieved. Finally, this spectral approach has shown to be adequate to solve problems where specular reflection is assumed at the surface, in which cases, classical approaches available in the literature can not be used.

Keywords: Rarefied Gas Dynamics, Cylindrical tube, Integral Equations, Spectral Methods.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	FLUXO DE GASES RAREFEITOS EM DUTOS CILÍNDRICOS	13
2.1	Formulação Integral do Modelo BGK	14
2.1.1	Fluxo de Poiseuille e <i>Creep</i> Térmico	18
2.2	Formulação Integral do Modelo S	20
3	MODELO BGK: UMA SOLUÇÃO ESPECTRAL	30
3.1	Solução via Expansão em Splines Cúbicas de Hermite	30
3.1.1	Avaliação das Integrais	33
3.1.2	Resultados Numéricos	41
3.2	Solução via Expansão em Polinômios de Legendre	44
3.2.1	Obtenção das Quantidades de Interesse Físico	47
3.2.2	Resultados Numéricos	48
3.3	Considerações Finais	50
4	MODELO S: UMA SOLUÇÃO ESPECTRAL	55
4.1	Solução Via Expansão em Splines Cúbicas de Hermite	55
4.1.1	Avaliação do Núcleo da Integral	57
4.1.2	Avaliação dos Termos $\mathbf{U}_\alpha(x_i)$ e $\mathbf{V}_\alpha(x_i)$	59
4.1.3	Obtenção das quantidades de Interesse Físico	63
4.1.4	Resultados Numéricos	64
4.2	Solução via Expansão em Polinômios de Legendre	69
4.2.1	Resultados Numéricos	72
4.3	Considerações Finais	76

5	DUTOS CILÍNDRICOS: O CASO DE REFLEXÃO ESPECULAR.....	78
5.1	Formulação do Problema	78
5.2	Resolução Mediante a Utilização da Expansão em Splines Cúbicas	80
5.2.1	Avaliação das Integrais	81
5.2.2	Resultados Numéricos	89
5.3	Solução via Expansão em Polinômios de Legendre	94
5.3.1	Resultados Numéricos	97
5.4	Considerações Finais	98
6	CONCLUSÕES	100
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	103
	APÊNDICE A	110
	APÊNDICE B	117

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ADO	Método das Ordenadas Discretas Analítico
DSMC	Método de Simulação Direta de Monte Carlo
DGR	Dinâmica de Gases Rarefeitos
EB	Equação de Boltzmann
ELB	Equação Linearizada de Boltzmann
MEMS	Microeletromecânicos
NEMS	Nanoeletromecânicos

LISTA DE SÍMBOLOS

a_*	Comprimento característico [m]
\mathbf{c}	Vetor velocidade [m/s]
c	Magnitude da velocidade [m/s]
c_z	Componente de \mathbf{c} na direção axial
$F(\xi, \mu)$	Condição de contorno
$F_n(t/u, r/u)$	Função usada para determinar o núcleo das formulações integrais
$f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c})$	Função de distribuição de partículas
f_0	Distribuição Maxwelliana local
$g(r, \xi, \phi)$	Função de distribuição das partículas
$G(r, \xi, \mu)$	Função de distribuição das partículas do problema generalizado
$H(\mathbf{c}, \mathbf{c}')$	Núcleo de colisão
$h(r, \mathbf{c})$	Função de perturbação das partículas
$I_n(x)$	Função de Bessel modificada de ordem n e primeira classe
$\hat{I}_0(x)$	Produto da função de Bessel modificada I_0 e uma exponencial
$J(f', f)$	Operador de colisão
$K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$	Núcleo de espalhamento
$k_n(\mathbf{c}', c)$	Componente da Expansão de $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$
k_B	Constante de Boltzmann [$1.3805 \times 10^{-23} J/K$]
K_n	Número de Knudsen
$K_n(x)$	Função de Bessel modificada de ordem n e segunda classe
$\hat{K}_n(x)$	Produto da função de Bessel modificada K_0 e uma exponencial
$K(t \rightarrow r)$	Núcleo da equação integral do modelo BGK
$\mathbf{K}(t \rightarrow r)$	Núcleo da equação integral do modelo S
l	Livre caminho médio [m]

Ma	Número de Mach
m_0	Massa da partícula de gás [Kg]
n_0	Densidade molecular [m^{-3}]
p_0	Pressão [Pa]
P_n	Polinômios de Legendre de ordem n
$q(r)$	Fluxo de calor (adimensional)
$Q(x)$	Taxa do fluxo de calor (adimensional)
$Q(\xi)$	Termo fonte do modelo BGK
r	Distância radial em relação ao centro (adimensional)
R	Raio (adimensional)
R_*	Constante específica do gás [$J/(mol \cdot K)$]
Re	Número de Reynolds
\mathbf{s}	Vetor posição
T_0	Temperatura [K]
u	Velocidade macroscópica (adimensional)
U	Taxa de fluxo do gás (adimensional)
U_∞	Velocidade do fluido [m/s]
W	Frequência de espalhamento
x_i	Pontos de colocação
$Z(r)$	Função incógnita da equação integral
ϕ	Ângulo azimutal
γ	Razão dos calores específicos do gás
$\mathbf{\Gamma}$	Termo fonte do modelo S
λ_*	Condutividade térmica [$W/(m \cdot K)$]
μ_*	Viscosidade do gás [m^2/s]
μ_k	Pontos de quadratura de Gauss-Legendre
$\nu(v)$	Frequência de colisão das partículas [s^{-1}]

σ_0	Diâmetro molecular [m]
ω_k	Pesos da quadratura de Gauss-Legendre
ξ	Componente da velocidade [m/s]
$\Psi(\xi, \mu)$	Função característica
ζ_n	Nós das funções splines
\mathfrak{S}_α	Função spline

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1	Cilindro de raio R onde \mathbf{c} denota a direção do movimento de uma partícula do gás	15
3.1	Perfis de Velocidade do Fluxo de Poiseuille	52
3.2	Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille	53
3.3	Perfis de Velocidade do <i>Creep</i> Térmico	53
3.4	Taxas de Fluxo do Problema <i>Creep</i> Térmico	54
5.1	Perfis de Velocidade do Poiseuille com $R = 0.2$	93
5.2	Perfis de Velocidade do <i>Creep</i> Térmico com $R = 0.2$	93
5.3	Perfis de Velocidade do <i>Creep</i> Térmico com $R = 1$	94

ÍNDICE DE TABELAS

3.1	Velocidades para o Problema de Poiseuille	43
3.2	Velocidades para o Problema <i>Creep</i> Térmico	43
3.3	Taxas de Fluxo	43
3.4	Velocidades para o Problema de Poiseuille	49
3.5	Velocidades para o Problema <i>Creep</i> Térmico	49
3.6	Taxas de Fluxo	50
4.1	Velocidades e Fluxos de Calor em um Duto de $R = 1$	66
4.2	Velocidades e Fluxos de Calor em um Duto de $R = 0,5$	67
4.3	Velocidades e Fluxos de Calor em um Duto de $R = 0,1$	68
4.4	Taxas de Fluxo	68
4.5	Perfis de Velocidade e de Fluxo de Calor em um Duto de $R = 1$	73
4.6	Perfis de Velocidade e de Fluxo de Calor em um Duto de $R = 0,5$	74
4.7	Perfis de Velocidade e de Fluxo de Calor em um Duto de $R = 0,1$	75
4.8	Taxas de Fluxo	75
5.1	Convergência das Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille com $\alpha = 0.92$...	92
5.2	Convergência das Taxas de Fluxo do Problema <i>Creep</i> Térmico com $\alpha = 0.92$.	92
5.3	Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille	92
5.4	Taxas de Fluxo do Problema <i>Creep</i> Térmico	92
5.5	Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille	97
5.6	Taxas de Fluxo do Problema do <i>Creep</i> Térmico	98

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A recente evolução da indústria eletrônica, das tecnologias de micro e nano-fabricação, da engenharia biomédica, entre outras, possibilitaram o surgimento de inúmeras aplicações envolvendo micro e nano-dispositivos que combinam componentes elétricos e mecânicos, conhecidos como sistemas microeletromecânicos (MEMS) e nanoeletromecânicos (NEMS) [Li, 2008]. Tais dispositivos caracterizam-se por possuírem dimensões totais da ordem de centímetros, mas podem apresentar componentes específicos com dimensões inferiores ao micrômetro e, são capazes de exercer funções como medir (microsensores), analisar, decidir (comandos lógico-eletrônicos) e reagir a respostas do meio (microatuadores) [Aubert, 1999].

Atualmente é possível encontrar aplicações potenciais dos MEMS e NEMS nas mais diversas áreas, tais como, na indústria de automóveis (acelerômetros de airbags, sensores de injeção de ar e sensores de pressão) [Krueger, 2007; Müller-Fiedler et al., 2007], no setor médico (microbombas implantáveis responsáveis pelo transporte de microfluidos que são capazes de diagnosticar agentes patógenos moleculares como vírus, realizar análises biológicas e administrar doses baixas de medicamentos) [Baal, 2004; Liu et al., 2008], na indústria aeroespacial e de defesa (sensores de silício para medir a altitude e controlar sistemas hidráulicos, sensores para identificar locais de turbulência ou cisalhamento e atuadores capazes de modificar fluxos ao longo da asa de aviões) [Aubert, 1999], no controle do meio ambiente (redes de sensores físicos) [Aubert, 1999] e, na indústria em geral (nos microreatores de hidrogenação conduzida, no transporte de células de microcombustível, nos microtrocaadores de calor e na refrigeração de micros Chips, entre outros) [Weng e Chen, 2008].

Contudo, o funcionamento dos MEMS e NEMS depende da operação conjunta de um grande número de componentes e, em muitos casos, o bom desempenho destes micro e

nano-dispositivos está associado à análise e descrição do comportamento de um fluxo de gás em micro ou nanocanais, comumente denominados de microfluidos ou nanofluidos. Assim, o conhecimento das características físicas de tais fluxos é fundamental para o aperfeiçoamento dos micro e nano-dispositivos já existentes, bem como para o desenvolvimento de outros. Com isso, vários pesquisadores transformaram os estudos nesta área no principal foco de suas pesquisas durante os últimos anos [Gad-el-Hak, 2005; Kakaç et al., 2005; Zahid et al., 2007; Bao e Lin, 2008]. Tais estudos revelaram que o comportamento do fluxo de um gás nesta escala pode apresentar muitas diferenças quando comparado com o fluxo do mesmo gás em escalas maiores. Gad-el-Hak [Gad-el-Hak, 2005] evidencia tais diferenças através de um exemplo onde compara a relação superfície/volume de uma máquina em escala humana (comprimento característico de um metro) com a de um microchip de comprimento característico de um micrômetro. Enquanto que na escala humana esta relação é da ordem de $1m^{-1}$, no microchip esta mesma relação é da ordem de 10^6m^{-1} , ou seja, um milhão de vezes maior.

Em geral, a relação superfície/volume é significativamente maior em fluxos de escala muito reduzida e, por isso, os efeitos de superfície tornam-se mais importantes do que os efeitos de campo em fluxos desta escala. Isso resulta em um domínio das forças viscosas sobre as forças de inércia, o que afeta significativamente a transferência de massa, momento e energia. Torna-se, portanto, necessário considerar os fenômenos de rarefação, tais como: deslizamento, salto de temperatura, *creep* térmico, efeitos de compressibilidade e de dissipação viscosa e forças intermoleculares. Desse modo, a modelagem de fluxos de gases em microcanais não pode ser realizada utilizando-se as equações de Navier-Stokes, com as condições de não deslizamento e sem salto de temperatura [Gad-el-Hak, 2005; Kakaç et al., 2005; Zahid et al., 2007; Bao e Lin, 2008].

Nesta dinâmica os efeitos causados pelo material que compõe a superfície bem como pela sua rugosidade devem ser levados muito mais em conta do que em situações de grandes dimensões. Tais fatos são evidenciados numericamente e experimentalmente nas Refs. [Turner et al., 2004; Gad-el-Hak, 2005; Cao et al., 2006; Knackfuss e Barichello, 2006; Lilly et al., 2007; Kamphorst et al., 2007b].

Segundo Gad-el-Hak [Gad-el-Hak, 2005], na modelagem de fluidos pode-se considerar que eles são formados por uma coleção de moléculas ou admitir que constituam um

meio contínuo onde a matéria pode ser dividida indefinidamente sem que suas características físicas e químicas sejam afetadas. Na hipótese do contínuo, a natureza molecular dos gases ou líquidos é ignorada e o comportamento do fluido é descrito em termos das variações espaciais e temporais de suas quantidades macroscópicas como densidade, velocidade, temperatura e pressão e, os princípios de conservação de massa, momento e energia levam a um conjunto de equações diferenciais parciais não lineares (Euler, Navier-Stokes, Burnett). Ainda segundo Gad-el-Hak [Gad-el-Hak, 2005], esse modelo conduz a previsões bastante precisas enquanto as propriedades macroscópicas podem ser definidas como médias sobre elementos que são grandes se comparados com a estrutura microscópica do fluido e pequenos se comparados com a escala do fenômeno e, ainda, se o fluxo não estiver demasiadamente fora do equilíbrio termodinâmico.

No caso específico dos fluidos gasosos, é comum associar a modelagem do fluxo de gás ao seu estado de rarefação, que é definido mediante a utilização de um parâmetro adimensional, conhecido como número de Knudsen. O número de Knudsen (K_n) é conhecido como sendo a razão entre o livre caminho médio l (distância percorrida por uma partícula sem sofrer colisão) e um comprimento característico a_* [Cercignani, 1969; Williams, 1971],

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

O valor do livre caminho médio depende do tamanho e da velocidade das partículas ou das moléculas gasosas consideradas. Entretanto, na literatura existem expressões para definir o livre caminho médio de um gás mediante a sua viscosidade ou sua condutividade térmica [Loyalka e Hickey, 1989]. Segundo Loyalka e Hickey, o livre caminho médio pode ser definido em termos da viscosidade μ_* , considerando

$$l = l_P = (\mu_*/p_0)(2k_B T_0/m_0)^{1/2}, \quad (1.2)$$

onde $p_0 = n_0 k_B T_0$ é a pressão, n_0 é a densidade molecular (número de moléculas por unidade de volume), $k_B = 1.380658 \times 10^{-23} J/K$ é a constante de Boltzmann, T_0 é a temperatura do gás e m_0 corresponde à massa de uma partícula do gás. Nessa expressão, segundo Pekeris e Alterman [Pekeris e Alterman, 1957], a viscosidade pode ser determinada para o modelo de

esferas rígidas mediante a expressão

$$\mu_* = \frac{8(2m_0k_B T_0)^{1/2}}{15\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2} b(c) c^6 \mathbf{d}c, \quad (1.3)$$

onde c corresponde à magnitude da velocidade das partículas, σ_0 é o diâmetro molecular e $b(c)$ é a solução da equação de Chapman-Enskog para a viscosidade [Williams, 1971; Barichello e Siewert, 2003]

$$\nu(c)c^2 b(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2} b(c') k_2(c', c) c'^4 \mathbf{d}c' = c^2. \quad (1.4)$$

Enquanto que para o problema do salto de temperatura, Loyalka e Ferziger [Loyalka e Ferziger, 1968] usam

$$l = l_T = [4\lambda_*/(5n_0k_B)] [m_0/(2k_B T_0)]^{1/2}, \quad (1.5)$$

onde λ_* corresponde à condutividade térmica, que segundo Pekeris e Alterman [Pekeris e Alterman, 1957], para o modelo de esferas rígidas pode ser definido por

$$\lambda_* = \frac{4k_B (2k_B T_0/m_0)^{1/2}}{3\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 \mathbf{d}c, \quad (1.6)$$

onde $a(c)$ satisfaz a equação de Chapman-Enskog para a condutividade térmica [Williams, 1971; Barichello e Siewert, 2003]

$$\nu(c)ca(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2} a(c') k_1(c', c) c'^3 \mathbf{d}c' = c(c^2 - 5/2) \quad (1.7)$$

e a condição de normalização

$$\int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^4 \mathbf{d}c = 0. \quad (1.8)$$

Nas Eqs. (1.4) e (1.7), o termo $\nu(c)$ corresponde à frequência de colisão [Williams, 1971; Barichello e Siewert, 2003]

$$\nu(c) = \frac{2c^2 + 1}{c} \int_0^c e^{-x^2} \mathbf{d}x + e^{-c^2}, \quad (1.9)$$

enquanto que os termos $k_n(c', c)$ correspondem às componentes da expansão do núcleo de

espalhamento $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ do modelo de colisão de esferas rígidas [Pekeris e Alterman, 1957].

Ainda para o modelo de esferas rígidas, segundo a Ref. [Roy et al., 2003], o número de Knudsen também pode ser associado ao número de Reynolds

$$Re = \frac{n_0 U_\infty a_*}{\mu_*} \quad (1.10)$$

e ao número de Mach

$$Ma = \frac{U_\infty}{\sqrt{\gamma RT}}, \quad (1.11)$$

de modo que

$$K_n = \left(\frac{\pi\gamma}{2}\right)^{1/2} \frac{Ma}{Re} = \sqrt{\frac{\pi}{2R_*T}} \frac{\mu_*}{n_0 a_*}, \quad (1.12)$$

onde U_∞ corresponde à velocidade de fluxo do gás, γ é a razão entre os calores específicos do gás e R_* é a constante específica do gás.

Segundo Karniadakis e Beskok [Karniadakis e Beskok, 2002], dependendo do intervalo de variação do número de Knudsen, podem ser definidos quatro possíveis regimes para o estado de um gás:

- Contínuo: para $K_n < 0,01$;
- Slip-flow: para $0,01 < K_n < 0,1$;
- Transição: para $0,1 < K_n < 10$;
- Moléculas livres: para $K_n > 10$.

No regime contínuo (ou hidrodinâmico) o livre caminho médio é muito menor que o comprimento característico do fluxo e, conseqüentemente, o meio gasoso pode ser considerado como um meio contínuo, no qual as equações de Navier-Stokes [Gad-el-Hak, 2005; Kakaç et al., 2005] com as condições de não deslizamento e não existência de salto de temperatura podem ser usadas para modelar o fluxo. Ainda no regime contínuo, se o número de Reynolds do fluxo de gás tender ao infinito (o que implica no número de Knudsen tender a zero), as equações de Euler para fluidos não viscosos também poderão ser usadas para modelar tais fluxos [Schlichting, 1979].

No regime slip-flow a modelagem dos problemas também pode estar baseada nas equações de Navier-Stokes. Porém, neste caso, faz-se necessário o uso de condições de con-

torno que incluam os efeitos de deslizamento e de salto de temperatura (efeitos de rarefação que se devem, respectivamente, às diferenças entre as velocidades e as temperaturas do gás em contato com a parede do canal e do gás que está próximo da parede), uma vez que as relações lineares, do modelo contínuo, existentes entre o atrito superficial e o gradiente de velocidade e entre o fluxo de calor e o gradiente de temperatura, tornam-se imprecisas [Gad-el-Hak, 2005].

No regime de transição o fluxo se caracteriza por apresentar efeitos de rarefação moderados e pelo fato de que as interações do gás com a superfície sólida, que delimita o fluxo, passam a ser importantes em virtude da magnitude do livre caminho médio ser da mesma ordem do comprimento característico do fluxo. Enquanto que um fluxo de gás no regime de moléculas livres caracteriza-se por ser altamente rarefeito e apresentar interações do gás com a superfície muito mais freqüentes do que as colisões entre partículas, o que se deve ao fato, de que neste regime, a magnitude do livre caminho médio é muito maior do que o comprimento característico do fluxo. Nestes regimes (transição e moléculas livres) a hipótese do fluido ser considerado um meio contínuo deixa de existir, sendo que se passa a considerá-lo como um conjunto de partículas. Caracteriza-se desse modo, o ramo de estudo que se denomina dinâmica de gases rarefeitos (DGR), no qual o fluxo do gás pode ser modelado pela equação de Boltzmann (EB) [Boltzmann, 1872].

É importante destacar também, que a EB pode ser usada no regime contínuo [Gad-el-Hak, 2005], onde habitualmente são utilizadas as Equações de Navier-Stokes. Uma diferença básica entre essas duas equações é que nas equações de Navier-Stokes as incógnitas representam as propriedades macroscópicas do fluido, enquanto que na EB, a incógnita em questão caracteriza-se por ser a função de distribuição de partículas, sendo que as quantidades de interesse relativas ao fluxo do gás (como por exemplo: velocidade, fluxo de calor, temperatura, densidade e tensão de cisalhamento) podem ser calculadas via essa função de distribuição [Williams, 2001].

Contudo, cabe salientar que além da descrição e análise de fluxos de gases rarefeitos, a EB possui outras aplicações na área da DGR [Cercignani, 1988], tais como: transferência radiativa [M. N. Özisik,], transporte de nêutrons [Davison, 1957], problemas envolvendo baixas pressões (como por exemplo, em dispositivos de vácuo ou voos em alta altitude) [Williams, 1971], entre outras [Duderstadt e Martin, 1979].

Na DGR, os efeitos de rarefação começam a se tornar mais importantes com o aumento do número de Knudsen, fato este que está relacionado com valores de livre caminhos médios grandes e/ou ao fato de que o fluxo esteja presente em um microcanal. Segundo Bahukudumbi, Park e Beskok [Bahukudumbi et al., 2003], a maioria dos dispositivos MEMS funciona nos regimes de slip-flow e de transição, porém, com a crescente miniaturização dos componentes de dispositivos, em breve, se poderá ter a maioria dos fluxos nos regimes de transição e de moléculas livres e, conseqüentemente, a obtenção de soluções de caráter analítico para os problemas da DGR, em canais destas dimensões, será possível apenas mediante a utilização da equação cinética de Boltzmann ou de formas simplificadas desta equação.

No que diz respeito à obtenção de resultados analíticos ou numéricos para os problemas da DGR, as maiores dificuldades se apresentam no regime de transição [Williams, 1971]. A modelagem de tais problemas neste regime, bem como no regime de moléculas livres, como já mencionado, pode se basear na EB, a qual consiste em uma equação integro-diferencial muito complexa, originalmente não linear, com sete variáveis independentes e que possui uma complicada estrutura na integral correspondente ao termo de colisão. Entretanto, no regime de moléculas livres as interações entre as partículas de gás podem ser negligenciadas e a EB pode ser aplicada desconsiderando-se o termo de colisão, o que a simplifica consideravelmente e permite a obtenção de soluções analíticas para geometrias simples.

De um modo geral, a obtenção de soluções para os problemas da DGR no regime de transição é feita mediante a utilização de métodos estatísticos ou determinísticos. Os métodos estatísticos se caracterizam por simular a interação de uma pequena porção das partículas para a realização do cálculo de propriedades macroscópicas do gás, enquanto que os métodos determinísticos caracterizam-se por buscarem soluções exatas para formas aproximadas da EB [Sharipov e Seleznev, 1998; Gad-el-Hak, 2005].

Entre os métodos estatísticos, se pode destacar o método de simulação direta de Monte Carlo (DSMC). Tal método usa centenas de milhares ou até milhões de moléculas divididas em “elementos” proporcionais ao livre caminho médio para simular o movimento real das moléculas, com passos de tempo menores que os intervalos entre colisões moleculares, e assim calcular as propriedades macroscópicas em cada um destes “elementos” [Duderstadt e Martin, 1979]. Como exemplos de trabalhos da DGR em que o método DSMC foi utilizado,

pode-se citar artigos referentes à resolução de fluxo de Couette (que descreve o movimento de um gás entre corpos que se movem) em dutos cilíndricos: [Myong et al., 2005], [Yoshida e Aoki, 2006] e [Pourmahmoud, 2008] e, referentes à resolução de problemas em microcanais: [Shen et al., 2003], [Wang e Li, 2004], [Lilly et al., 2006] e [Lilly et al., 2007].

Contudo, o método DSMC apresenta algumas restrições e falhas em situações que envolvem fluxos com números de Mach pequenos (o que é comum em microfluidos) [Sharipov, 2008], o que se deve ao fato das flutuações estatísticas serem muito grandes nestes casos. Outra restrição ao uso deste método consiste no fato de seu erro ser inversamente proporcional à raiz quadrada do número de moléculas simuladas, o que torna sua convergência muito lenta, uma vez que, por exemplo, para reduzir o erro em um fator dois, isso implica em aumentar o número de partículas simuladas em um fator quatro [Gad-el-Hak, 2005].

Por outro lado, os métodos determinísticos se baseiam na busca por soluções exatas para formas aproximadas da EB, como por exemplo a equação linearizada de Boltzmann (ELB) [Cercignani, 1969; Barichello e Siewert, 2003] e as equações modelo ou modelos cinéticos [Cercignani, 1969; Williams, 1971]. A ELB consiste na EB com o operador de colisão linearizado em termos de uma perturbação da distribuição maxweliana (Apêndice A), enquanto que as equações modelo são obtidas mediante a substituição do núcleo de espalhamento da ELB por expressões mais simples, mas que conservam as propriedades físicas do processo de colisão, tais como a conservação de massa, energia e momento (Apêndice A). Entretanto, mesmo assim, a proposição de metodologias de caráter analítico, ou mesmo a obtenção de soluções em forma fechada, ficam em geral restritas a problemas que descrevem situações físicas mais simples e, na maioria dos casos, formulados em geometria cartesiana. Como exemplos dessa forma de abordagem, pode-se citar trabalhos referentes à DGR em canais planos: [Barichello et al., 2001], [Valougeorgis, 2003], [Camargo e Barichello, 2004], [Cabrera e Barichello, 2006], [Frangi et al., 2007a], [Scherer et al., 2009].

Neste contexto, um método que merece destaque é o método de ordenadas discretas analítico (ADO) [Barichello e Siewert, 1999], que é uma versão analítica do método de ordenadas discretas proposto inicialmente por Wick e Chandrasekhar [Chandrasekhar, 1950] para solução de problemas de transferência radiativa. O referido método baseia-se em uma metodologia de caráter analítico que tem como base a aproximação da integral do termo de espalhamento da equação de transporte por uma quadratura numérica. O método ADO

difere do método original basicamente pelo uso de um esquema de quadratura arbitrário e pela determinação das constantes de separação através da resolução de um problema simplificado de autovalores. Uma das vantagens da aplicação desta reformulação do método se mostra no uso de um esquema de quadratura “half-range”, que trata da singularidade natural do problema no contorno e implica em um ganho de precisão na discretização quando comparados a esquemas clássicos de quadratura. Em geometria plana tal aproximação resulta em um sistema de equações diferenciais ordinárias que pode ser resolvido analiticamente. Deste modo, o método ADO vem se destacando, recentemente, em pesquisas que buscam estabelecer soluções “unificadas” para equações cinéticas que modelam os problemas da dinâmica de gases rarefeitos em canais planos [Barichello et al., 2001; Camargo e Barichello, 2004; Cabrera e Barichello, 2006; Knackfuss e Barichello, 2006].

Em geometria cilíndrica, em geral, a obtenção de soluções de caráter analítico é ainda mais complicada do que em canais planos. Uma possibilidade, para este caso, é trabalhar com a forma integral de uma equação modelo, uma vez que deste modo a aplicação de técnicas semi-analíticas pode se tornar mais viável do que através de equações integro-diferenciais [Barichello et al., 2002; Rodrigues, 2003]. Porém, a utilização destas equações também é muito difícil, principalmente, devido à complexidade do núcleo da equação integral e à definição de certas condições de contorno.

Como exemplos de trabalhos da DGR em dutos cilíndricos que utilizaram a forma integral de uma equação modelo, pode-se citar as seguintes referências:

- Cercignani e Sergiotto [Cercignani e Sergiotto, 1966; Cercignani e Sergiotto, 1967] que resolveram, numericamente, os problemas de Poiseuille (termo usado para descrever o fluxo de um gás, na direção axial, que se deve à influência de um gradiente de pressão) e Couette (que descreve o movimento de um gás entre dois corpos que se movem) em dutos cilíndricos mediante a aplicação do método variacional na formulação integral do modelo BGK;
- Loyalka [Loyalka, 1975] que fornece resultados numéricos para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos com condições de contorno difuso-especular, obtidos mediante a utilização do método variacional na formulação integral do modelo BGK.

- Valougeorgis e Thomas Jr. [Valougeorgis e Thomas Jr., 1986] que utilizaram o método F_N para o cálculo de resultados numéricos para o problema de Poiseuille e *creep* térmico (termo usado para descrever o fluxo de um gás rarefeito, na direção axial, devido à existência de um gradiente de temperatura nesta direção) a partir da equação integral do modelo BGK;
- Siewert [Siewert, 2000] que obteve resultados analíticos para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, a partir da equação integral do modelo BGK, mediante a utilização de uma transformação proposta por Mitsis [Mitsis, 1963] e Ferziger [Ferziger, 1967] e com a posterior aplicação do método ADO;
- Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2002] que obtiveram resultados analíticos para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, a partir da equação integral do modelo S, também mediante a utilização de uma transformação proposta por Mitsis e Ferziger e com a posterior aplicação do método ADO.

A transformação proposta por Mitsis [Mitsis, 1963] e Ferziger [Ferziger, 1967], utilizada nos dois últimos trabalhos citados acima, consiste em uma alternativa que pode ser usada nos problemas em canais cilíndricos que envolvem situações fisicamente mais simples. Com esta transformação, a solução da equação integral passa a ser relacionada aos chamados “pseudo” problemas, que reduzem os problemas formulados em geometria cilíndrica (ou mesmo em geometria esférica) a problemas definidos em termos das variáveis da geometria plana, que, conseqüentemente, tornam-se mais fáceis de serem resolvidos do que suas formulações originais. Porém, tal metodologia não é aplicável a problemas fisicamente mais complexos (como por exemplo, em canais com superfícies refletoras), uma vez que nestes casos, o uso da referida transformação não é mais possível.

Entretanto, problemas da DGR em dutos cilíndricos de micro e nano-dimensões merecem uma atenção especial. Segundo Song e Chen [Song e Chen, 2008] a quantidade de interações de partículas de gás com a superfície é maior em nanoporos cilíndricos quando comparados com canais planos da mesma espessura. Tal fato justifica-se devido à existência de uma maior proporção superfície-volume, curvatura e possivelmente maior aspereza nos nanoporos cilíndricos. Como conseqüência disso, os nanoporos cilíndricos funcionam melhor para conduzir o calor viscoso para fora do canal, o que pode ser interessante para a

refrigeração de microdispositivos.

Assim, pela importância dos estudos nesta área da engenharia, neste trabalho, propõe-se a utilização de um método espectral (método pelo qual se propõe uma solução em forma de uma expansão truncada em termos de funções de base conhecidas) [Boyd, 2000] com o intuito de obter soluções em forma fechada para problemas da DGR em dutos cilíndricos. Com isso, pretende-se estudar também a possibilidade de desenvolver um procedimento aplicável a uma classe mais ampla de problemas envolvendo fluxo de gases rarefeitos em dutos cilíndricos, como por exemplo, para problemas fisicamente mais complexos onde a transformação proposta por Mitsis e Ferziger [Mitsis, 1963; Ferziger, 1967] não é mais aplicável. Para tanto, serão consideradas duas abordagens distintas para representar a função incógnita da equação integral, uma baseada na utilização de uma expansão em termos de splines cúbicas de Hermite [Schultz, 1973] e, outra, baseada na utilização de uma expansão em termos de polinômios de Legendre [Abramowitz e Stegun, 1965].

Nas duas abordagens, uma vez proposta a expansão usada para representar da função incógnita da equação integral, faz-se a substituição desta na equação integral para a posterior obtenção dos coeficientes que a compõem. No caso da expansão em splines cúbicas, isto é possível mediante a resolução de um sistema algébrico obtido a partir da utilização de um esquema de pontos de colocação e da avaliação numérica das integrais, que neste trabalho, é realizada utilizando-se o esquema de quadratura de Gauss-Legendre. No caso da expansão em polinômios de Legendre, os coeficientes podem ser determinados a partir da resolução de um sistema linear obtido mediante a utilização de algumas propriedades dos polinômios de Legendre e da posterior avaliação numérica das integrais. Uma vez determinados os coeficientes, a expansão proposta é utilizada para determinar as quantidades de interesse físico do problema.

Salienta-se que as referidas abordagens já foram utilizadas com sucesso na resolução de outras equações integrais de interesse na área [Barichello et al., 2004; Rodrigues e Barichello, 2004], visando a obtenção de soluções através das funções de Chapman-Enskog e das funções de Burnett.

Deste modo o presente trabalho é organizado de forma que:

- no capítulo 2 são apresentadas as formulações integrais dos modelos cinéticos BGK e S usados para descrever o fluxo de gases rarefeitos em dutos cilíndricos;

- no capítulo 3 são apresentadas propostas de resolução, bem como, resultados numéricos para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos, obtidos a partir da formulação integral do modelo BGK;
- no capítulo 4 as mesmas propostas de resolução já utilizadas no capítulo 3 são empregadas para a obtenção de soluções, para os dois problemas citados anteriormente, a partir da formulação integral do modelo S;
- no capítulo 5 é apresentada uma tentativa preliminar para a resolução dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos sujeitos a uma condição de contorno de superfície refletora mediante a utilização da formulação integral do modelo BGK.

CAPÍTULO 2

FLUXO DE GASES RAREFEITOS EM DUTOS CILÍNDRICOS

Conforme já mencionado no capítulo anterior, a modelagem dos problemas da DGR se baseia na EB, que consiste em uma equação de transporte de partículas que estabelece um balanço entre os mecanismos de perda e ganho de partículas em um volume qualquer no espaço de fase, que é apresentada no Apêndice A deste trabalho. Trata-se de uma equação íntegro-diferencial muito complexa, uma vez que, originalmente, é não linear e envolve sete variáveis independentes, logo, a proposição de metodologias de caráter analítico a partir dessa equação, em geral, é muito restrita.

Assim sendo, uma alternativa que vêm sendo usada com o propósito de resolver problemas da DGR consiste em utilizar equações modelo, equações cinéticas que consideram uma expressão simplificada para descrever o núcleo de espalhamento da ELB (EB linearizada em termos de uma função de perturbação), mas que conserve as propriedades físicas do processo de colisão. No Apêndice A, são apresentadas as equações íntegro-diferenciais dos modelos BGK [Bhatnagar et al., 1954] e S [Shakhov, 1968], os quais se caracterizam por apresentarem frequência de colisão das partículas constante e por já terem sido utilizados na resolução de vários problemas da DGR [Barichello et al., 2001; Cabrera e Barichello, 2006; Frangi et al., 2007a; Frangi et al., 2007b; Scherer et al., 2009], em geometria plana.

Entretanto, em geometria cilíndrica, a obtenção de resultados de caráter analítico para os problemas da DGR, em geral, é mais complicada do que para os mesmos problemas em canais planos e, uma alternativa que vem sendo usada para se buscar superar tal dificuldade, consiste em fazer uso da formulação integral dos modelos cinéticos.

Diante disso, neste capítulo serão apresentadas as formulações integrais que podem ser usadas para descrever o fluxo de um gás rarefeito em um duto cilíndrico, particular-

mente para os problemas que dizem respeito à descrição de efeitos causados por gradiente de pressão (Poiseuille) e de temperatura (*creep* térmico), conforme deduzidas por Barichello et al. [Barichello et al., 2002] e Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2002], respectivamente, a partir das equações integro-diferenciais dos modelos cinéticos BGK e S.

2.1 Formulação Integral do Modelo BGK

Nesta seção apresenta-se a formulação integral associada ao modelo BGK, conforme deduzida por Barichello et al. [Barichello et al., 2002], para descrever fluxos de gases rarefeitos na direção axial em dutos cilíndricos retos de raio R e sujeitos a simplificações do modelo físico, tais como: a consideração de gases com moléculas monoatômicas, sem carga elétrica, que sofrem apenas colisões binárias, que possuam frequência de colisão constante e que sejam do tipo esferas rígidas, além de se considerar o escoamento no regime permanente. Nesse intuito, primeiramente, é apresentada sua formulação integro-diferencial do modelo BGK, em coordenadas cilíndricas, escrita em termos da função de perturbação das partículas $h(r, \mathbf{c})$ [Williams, 1971],

$$\begin{aligned} \xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) h(r, \mathbf{c}) + h(r, \mathbf{c}) = -kc_z \\ + \pi^{-3/2} \left[\int e^{-c'^2} h(r, \mathbf{c}') d\mathbf{c}' + 2\mathbf{c} \cdot \int \mathbf{c}' h(r, \mathbf{c}') d\mathbf{c}' \right. \\ \left. + \frac{2}{3} (c^2 - 3/2) \int (c'^2 - 3/2) e^{-c'^2} h(r, \mathbf{c}') d\mathbf{c}' \right], \quad (2.1) \end{aligned}$$

onde $\mathbf{c} = (\xi, c_z, \phi)$, conforme indica a Fig.(2.1), é o vetor velocidade, c_z é a componente de \mathbf{c} na direção axial do tubo e ϕ é a componente angular e, c' e c as magnitudes do vetor de velocidade das partículas do gás antes e após as colisões, respectivamente, enquanto que $r \in [0, R]$ é a distância radial em relação ao centro do duto cilíndrico.

Multiplicando a Eq. (2.1) por $c_z \exp(-c_z^2)$ e integrando em c_z , obtém-se

$$\begin{aligned} \xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) g(r, \xi, \phi) + g(r, \xi, \phi) \\ = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\xi'^2} g(r, \xi', \phi') \xi' d\xi' d\phi' + Q(\xi), \quad (2.2) \end{aligned}$$

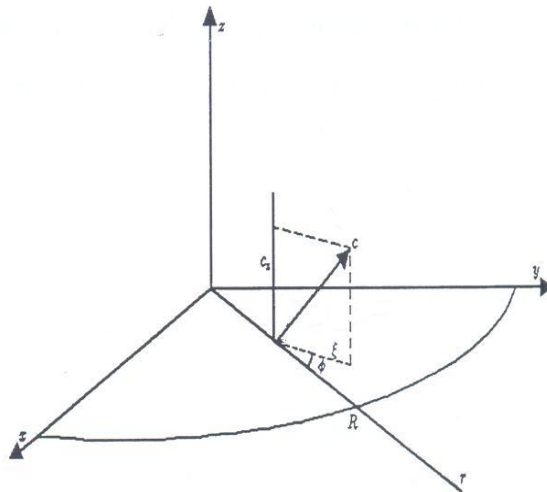


Figura 2.1 – Cilindro de raio R onde \mathbf{c} denota a direção do movimento de uma partícula do gás

sendo

$$g(r, \xi, \phi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c_z^2} h(r, \mathbf{c}) c_z d\mathbf{c}_z. \quad (2.3)$$

Nesta formulação, assume-se que o termo fonte não homogêneo $Q(\xi)$ na Eq. (2.2) é conhecido e que a condição de contorno tem a forma

$$g(R, \xi, \phi) = f(\xi, \phi), \quad \phi \in (\pi/2, 3\pi/2) \text{ e } \xi \in [0, \infty), \quad (2.4)$$

onde $f(\xi, \phi)$ é também considerada conhecida.

Impondo agora a condição de simetria

$$f(\xi, 2\pi - \phi) = f(\xi, \phi), \quad \phi \in (\pi/2, \pi], \quad (2.5)$$

pode-se concluir pelas Eqs. (2.2) e (2.5) que

$$g(r, \xi, 2\pi - \phi) = g(r, \xi, \phi), \quad \phi \in [0, \pi], \quad (2.6)$$

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

$$G(r, \xi, \mu) = g(r, \xi, \arccos \mu), \quad \mu \in [-1, 1], \quad (2.7)$$

as Eqs. (2.2) e (2.4) podem ser reescritas como

$$\xi \left(\mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) G(r, \xi, \mu) + G(r, \xi, \mu) = \int_{-1}^1 \int_0^\infty \Psi(\xi', \mu') G(r, \xi', \mu') d\xi' d\mu' + Q(\xi), \quad (2.8)$$

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

$$G(R, \xi, -\mu) = F(\xi, \mu), \quad \mu \in (0, 1] \quad e \quad \xi \in [0, \infty). \quad (2.9)$$

Aqui

$$\Psi(\xi, \mu) = \frac{2\xi e^{-\xi^2}}{\pi(1 - \mu^2)^{1/2}} \quad (2.10)$$

e

$$F(\xi, \mu) = f(\xi, \pi - \arccos \mu), \quad \mu \in (0, 1]. \quad (2.11)$$

A equação apresentada na Eq. (2.8), juntamente com a condição de contorno indicada pela Eq. (2.9), correspondem à formulação integro-diferencial usualmente utilizadas nas aplicações do modelo BGK em geometria cilíndrica.

Para a obtenção da formulação integral, a partir das Eqs. (2.8) e (2.9), Barichello et al. [Barichello et al., 2002], fizeram uso do método das características [Debnath, 1997], além de terem proposto trocas de variáveis e utilizar algumas identidades das funções de Bessel necessárias para a simplificação de algumas integrais. A dedução é feita enfatizando a inclusão de um termo fonte não homogêneo geral, na equação de balanço, e um termo não homogêneo geral na condição de contorno. Desse modo, a forma geral da equação integral para o modelo BGK é dada por

$$G(r) = B(r) + C(r) + \int_0^R t G(t) \mathcal{K}(t \rightarrow r) dt, \quad (2.12)$$

para $r \in [0, R]$. Nesta equação, $G(r)$ corresponde à solução da formulação geral a partir da qual podem ser determinadas as quantidades de interesse físico, enquanto que o núcleo da

equação integral é dado por

$$\mathcal{K}(t \rightarrow r) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} F_0(t/\tau, r/\tau) \frac{d\tau}{\tau^2}, \quad (2.13)$$

sendo

$$F_n(t/\tau, r/\tau) = \begin{cases} I_n(t/\tau)K_n(r/\tau), & t < r \\ K_n(t/\tau)I_n(r/\tau), & t > r \end{cases}, \quad (2.14)$$

onde $I_n(x)$ e $K_n(x)$ são as funções de Bessel modificadas de ordem n , de primeira e segunda classe, respectivamente [Abramowitz e Stegun, 1965].

Segundo Barichello et al. [Barichello et al., 2002] e Rodrigues [Rodrigues, 2003], os dois termos não homogêneos da Eq. (2.12) são definidos por

$$B(r) = \int_{-1}^1 \int_0^\infty \Psi(\xi, \mu) F[\xi, \mu_0(R, r, \mu)] \exp\{-s_0(r, \xi, \mu)\} d\xi d\mu \quad (2.15)$$

e

$$C(r) = \frac{4}{\pi} \int_0^R t \int_0^\infty \frac{F_0(t/\tau, r/\tau)}{\tau^2} \int_r^\infty \frac{\xi Q(\xi) e^{-\xi^2}}{(\xi^2 - \tau^2)^{1/2}} d\xi d\tau dt. \quad (2.16)$$

O termo $B(r)$ depende da condição de contorno $F[\xi, \mu_0(R, r, \mu)]$, enquanto que $C(r)$ depende do termo fonte $Q(\xi)$ do problema considerado. Segundo [Williams, 1971], para os problemas aqui abordados, que descrevem os efeitos causados por um gradiente de pressão (Poiseuille) e de temperatura (*creep* térmico) no fluxo de um gás rarefeito em um duto cilíndrico, tem-se

$$Q(\xi) = 1/2[k_1 - k_2(\xi^2 - 1)], \quad (2.17)$$

onde k_1 e k_2 são constantes que, para o problema de Poiseuille assumem os valores $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$, enquanto que para o problema *creep* térmico correspondem aos valores $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$.

Segundo a mesma formulação, na Eq. (2.15), tem-se ainda

$$\Psi(\xi, \mu) = \frac{2\xi e^{-\xi^2}}{\pi(1 - \mu^2)^{1/2}}, \quad (2.18)$$

$$\mu_0(R, r, \mu) = \frac{1}{R}(R^2 - r^2 + r^2\mu^2)^{1/2} \quad (2.19)$$

e

$$s_0(r, \xi, \mu) = [(R^2 - r^2 + r^2\mu^2)^{1/2} + r\mu]/\xi. \quad (2.20)$$

2.1.1 Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico

Após ter sido feita uma breve apresentação da formulação geral da equação integral associada ao modelo BGK para dutos cilíndricos retos de raio R , pretende-se, agora, apresentar a respectiva formulação para dois casos especiais, conhecidos na literatura como fluxo de Poiseuille e *creep* térmico. Ambos representam problemas clássicos da DGR que descrevem o movimento de um gás plenamente desenvolvido na direção axial do duto, sendo que no primeiro o fluxo se deve exclusivamente à existência de um gradiente de pressão na direção axial e, no segundo, à existência de um gradiente de temperatura, também na direção axial [Williams, 2001].

Ainda, segundo as Refs. [Barichello et al., 2002] e [Rodrigues, 2003], para a realização de tais deduções, faz-se necessário, inicialmente, substituir o termo fonte não homogêneo da Eq. (2.17) na Eq. (2.16). Posteriormente faz-se uso da identidade das funções modificadas de Bessel,

$$x[K_0(x)I_1(x) + I_0(x)K_1(x)] = 1, \quad (2.21)$$

para promover algumas simplificações na expressão resultante. Desse modo, encontra-se

$$C(r) = \frac{k_1}{2} - \frac{R}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} K_1(R/\tau) I_0(r/\tau) [k_1 - k_2(\tau^2 - 1/2)] \frac{d\tau}{\tau}. \quad (2.22)$$

Entretanto, as Refs. [Barichello et al., 2002] e [Rodrigues, 2003] propõem ainda, reescrever a Eq. (2.12) em termos de uma nova função incógnita, $Z(r)$, de modo que

$$G(r) = \frac{1}{\pi^{1/2}} Z(r) - \frac{1}{4}(2k_1 + k_2), \quad (2.23)$$

onde k_1 e k_2 correspondem as constantes já mencionadas anteriormente no termo fonte. Então, mediante a utilização das Eqs. (2.22) e (2.23), a Eq. (2.12) passa a ser escrita na

forma

$$Z(r) = \int_0^R tZ(t)\mathcal{K}(t \rightarrow r)dt + S(r), \quad (2.24)$$

onde

$$S(r) = \pi^{1/2}B(r) + \frac{\pi^{1/2}}{2}k_1 + k_2R \int_0^\infty \tau e^{-\tau^2} K_1(R/\tau)I_0(r/\tau)d\tau \quad (2.25)$$

é o termo não homogêneo, que contém informações referentes ao termo fonte e à condição de contorno (no termo $B(r)$ indicado pela Eq. (2.15)). Nessa formulação, o termo $Z(r)$ corresponde à função incógnita que é usada para determinar as quantidades de interesse físico dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos.

Desse modo, a formulação integral do problema de Poiseuille é escrita a partir das Eqs. (2.24) e (2.25), tomando-se $B(r) = 0$, $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$, de modo que

$$Z_P(r) = \int_0^R tZ_P(t)\mathcal{K}(t \rightarrow r)dt + S_P(r) \quad (2.26)$$

sendo

$$S_P(r) = \frac{1}{2}\pi^{1/2}. \quad (2.27)$$

Enquanto que para o problema de *creep* térmico, obtém-se

$$Z_T(r) = \int_0^R tZ_T(t)\mathcal{K}(t \rightarrow r)dt + S_T(r) \quad (2.28)$$

com

$$S_T(r) = R \int_0^\infty \tau e^{-\tau^2} K_1(R/\tau)I_0(r/\tau)d\tau, \quad (2.29)$$

mediante a realização das substituições: $B(r) = 0$, $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$, nas Eqs. (2.24) e (2.25). Salienta-se que os índices P e T são usados para identificar aos problemas de Poiseuille e *creep* térmico, respectivamente, e que as Eqs. (2.26) e (2.28) são exatamente as mesmas equações apresentadas por Siewert [Siewert, 2000].

A obtenção da solução $Z_P(r)$ da equação integral (2.26) com o termo fonte dado

pela Eq. (2.27), possibilita a avaliação das quantidades de interesse físico do problema de Poiseuille, tais como o perfil de velocidade macroscópico das partículas do gás

$$u_P(r) = \pi^{-1/2} Z_P(r) - \frac{1}{2} \quad (2.30)$$

e a taxa de fluxo (do inglês *flow rate*, cuja tradução mais correta seria taxa de escoamento, porém, aqui denominado de taxa de fluxo, tendo em vista que esta denominação já foi usada em trabalhos anteriores)

$$U_P = \frac{4}{R^3} \int_0^R u_P(r) r dr, \quad (2.31)$$

conforme definidas nas Refs. [Loyalka, 1975] e [Valougeorgis e Thomas Jr., 1986]. Enquanto que as quantidades de interesse físico para a descrição do problema *creep* térmico em um duto cilíndrico de raio R e comprimento infinito, tais como o perfil de velocidade e a taxa de fluxo (do inglês *flow rate*), definidas nas Refs. [Loyalka, 1975] e [Valougeorgis e Thomas Jr., 1986], respectivamente, são

$$u_T(r) = \pi^{-1/2} Z_T(r) - \frac{1}{4} \quad (2.32)$$

e

$$U_T = \frac{4}{R^3} \int_0^R u_T(r) r dr. \quad (2.33)$$

2.2 Formulação Integral do Modelo S

Segundo Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2002], a equação integro-diferencial do modelo S [Shakhov, 1968] para aplicações de fluxos de gases, em regime permanente, na direção axial de dutos cilíndricos, escrita em termos da função de distribuição $h(r, \xi, c_z, \phi)$, é dada por

$$\left[\xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\text{sen } \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + 1 \right] h(r, \xi, c_z, \phi) = \pi^{-3/2} \mathcal{L}_S[h](r, \xi, c_z, \phi) + Q_S(\xi, c_z), \quad (2.34)$$

onde o termo fonte não homogêneo é

$$Q_S(\xi, c_z) = -c_z [k_1 + k_2 (\xi^2 + c_z^2 - 5/2)] \quad (2.35)$$

e o termo integral é

$$\mathcal{L}_S[h](r, \xi, c_z, \phi) = \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(r, \xi', c'_z, \phi') K(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) \xi' \mathrm{d}\xi' \mathrm{d}c'_z \mathrm{d}\phi'. \quad (2.36)$$

Nesta formulação $\xi \in [0, \infty)$ e $\phi \in [0, 2\pi]$ correspondem, respectivamente, às componentes de magnitude e ângulo do vetor velocidade do plano perpendicular ao eixo do duto de comprimento infinito, conforme evidenciado na Fig.(2.1) e de modo que se tenha

$$c^2 = \xi^2 + c_z^2 \quad (2.37)$$

e

$$c'^2 = \xi'^2 + c_z'^2, \quad (2.38)$$

sendo c' e c as magnitudes do vetor de velocidade das partículas do gás antes e após as colisões, respectivamente. Enquanto que c_z simboliza a componente do vetor velocidade \mathbf{c} na direção axial e $r \in [0, R]$ é a distância radial em relação ao centro do duto cilíndrico de comprimento infinito. Ainda referente a esta formulação, os termos k_1 e k_2 da Eq. (2.35) correspondem as constantes $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$ para o problema de Poiseuille e, $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$ para o problema creep térmico. Enquanto que o núcleo da integral é definido por

$$K(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = 1 + 2[c'_z c_z + \xi' \xi \cos(\phi' - \phi)] + (2/3)(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2) + M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}), \quad (2.39)$$

onde

$$M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = (4/15)[c'_z c_z + \xi' \xi \cos(\phi' - \phi)](c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2) \quad (2.40)$$

é o termo que difere o modelo S do modelo BGK.

Salienta-se ainda, que na formulação aqui apresentada, as condições de contorno são [Siewert e Valougeorgis, 2002]

$$h(R, \xi, c_z, \phi) = \alpha D + (1 - \alpha)h(R, \xi, c_z, \phi + \pi), \quad \phi \in [\pi/2, \pi], \quad (2.41a)$$

e

$$h(R, \xi, c_z, \phi) = \alpha D + (1 - \alpha)h(R, \xi, c_z, \phi - \pi), \quad \phi \in [\pi, 3\pi/2], \quad (2.41b)$$

onde α corresponde à fração de partículas do gás refletidas difusamente e a constante D é dada por

$$D = \frac{2}{\pi} \left(\int_0^{\pi/2} + \int_{3\pi/2}^{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} h(R, \xi, c_z, \phi) e^{-c^2} \xi^2 \cos \phi \, d\xi dc_z d\phi. \quad (2.42)$$

A equação cinética dada pela Eq. (2.34) e as condições de contorno das Eqs. (2.41a) e (2.41b) dependem da variável espacial $r \in [0, R]$ que está adimensionalizada de modo que $R = \delta$, sendo

$$\delta = \frac{a\pi^{1/2}}{2l}$$

o parâmetro de rarefação, a o raio físico do duto e l o livre caminho médio.

Neste contexto ainda, as quantidades de interesse físico do problema são: o perfil de velocidade

$$u(r) = \pi^{-3/2} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c^2} h(r, \xi, c_z, \phi) c_z \xi d\xi dc_z d\phi \quad (2.43)$$

e o fluxo de calor

$$q(r) = \pi^{-3/2} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 5/2) h(r, \xi, c_z, \phi) c_z \xi d\xi dc_z d\phi. \quad (2.44)$$

Percebe-se que as quantidades de interesse físico, $u(r)$ e $q(r)$, dadas pelas Eqs. (2.43) e (2.44), dependem da avaliação completa da função de distribuição $h(r, \xi, c_z, \phi)$. Em vez disso, pode-se obter resultados para diversos momentos ou integrais da função de distribuição. Com esse propósito, inicialmente a Eq. (2.34) é multiplicada por

$$\phi_1(c_z) = c_z e^{-c_z^2} \quad (2.45)$$

e integrada em todo o c_z , de modo que se tenha

$$\left[\xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\text{sen } \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + 1 \right] h_1(r, \xi, \phi) = \mathcal{L}_S[h_1, h_2](r, \xi) + a_1(\xi), \quad (2.46)$$

onde

$$\mathcal{L}_S[h_1, h_2](r, \xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\xi'^2} \left[f_{1,1}(\xi', \xi) h_1(r, \xi', \phi') + f_{1,2}(\xi) h_2(r, \xi', \phi') \right] \xi' d\xi' d\phi' \quad (2.47)$$

com

$$f_{1,1}(\xi', \xi) = 1 + (2/15) (\xi'^2 - 1) (\xi^2 - 1) \quad (2.48)$$

e

$$f_{1,2}(\xi) = (1/5)(2/3)^{1/2} (\xi^2 - 1). \quad (2.49)$$

Na Eq. (2.46) tem-se também

$$h_1(r, \xi, \phi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c_z^2} h(r, \xi, c_z, \phi) c_z dc_z, \quad (2.50)$$

e

$$a_1(\xi) = -(1/2)\pi^{1/2} [k_1 + k_2 (\xi^2 - 1)]. \quad (2.51)$$

Ainda com o mesmo propósito, a Eq. (2.34) também é multiplicada por

$$\phi_2(c_z) = (2/3)^{1/2} c_z (c_z^2 - 3/2) e^{-c_z^2} \quad (2.52)$$

e integrada em todo o c_z , de modo que se tenha

$$\left[\xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\text{sen } \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + 1 \right] h_2(r, \xi, \phi) = \mathcal{L}_S[h_1, h_2](r) + a_2, \quad (2.53)$$

onde

$$\mathcal{L}_S[h_1, h_2](r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\xi'^2} \left[f_{2,1}(\xi') h_1(r, \xi', \phi') + f_{2,2} h_2(r, \xi', \phi') \right] \xi' d\xi' d\phi' \quad (2.54)$$

com

$$f_{2,1}(\xi') = (1/5)(2/3)^{1/2} (\xi'^2 - 1) \quad (2.55)$$

e

$$f_{2,2}(\xi) = (1/5). \quad (2.56)$$

Na Eq. (2.53) tem-se também

$$h_2(r, \xi, \phi) = (2/3)^{1/2} \int_{-\infty}^\infty e^{-c_z^2} (c_z^2 - 3/2) h(r, \xi, c_z, \phi) c_z dc_z, \quad (2.57)$$

e

$$a_2 = -(3\pi/8)^{1/2} k_2. \quad (2.58)$$

Desse modo, a partir das Eqs. (2.46) e (2.53) é possível escrever

$$\left[\xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + 1 \right] \mathbf{H}(r, \xi, \phi) = \mathbf{L}_S(r, \xi) + \mathbf{A}(\xi), \quad (2.59)$$

onde

$$\mathbf{L}_S(r, \xi) = \frac{1}{\pi} \mathbf{Q}_S(\xi) \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}_S^T(\xi') \mathbf{H}(r, \xi', \phi') \xi' d\xi' d\phi' \quad (2.60)$$

com

$$\mathbf{Q}_S(\xi) = \begin{bmatrix} (2/15)^{1/2} (\xi^2 - 1) & 1 \\ (1/15)^{1/2} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.61)$$

Diante disso, o vetor $\mathbf{H}(r, \xi, \phi)$ é formado pelas componentes $h_1(r, \xi, \phi)$ e $h_2(r, \xi, \phi)$, das Eqs. (2.50) e (2.57). Os termos $a_1(\xi)$ e a_2 , indicados pelas Eqs. (2.51) e (2.58), constituem o

vetor $\mathbf{A}(\xi)$. Bem como, as condições de contorno passam a ser

$$\mathbf{H}(R, \xi, \phi) = (1 - \alpha)\mathbf{H}(R, \xi, \phi + \pi), \quad \phi \in [\pi/2, \pi], \quad (2.62a)$$

e

$$\mathbf{H}(R, \xi, \phi) = (1 - \alpha)\mathbf{H}(R, \xi, \phi - \pi), \quad \phi \in [\pi, 3\pi/2]. \quad (2.62b)$$

Considerando a propriedade de simetria

$$\mathbf{H}(r, \xi, 2\pi - \phi) = \mathbf{H}(r, \xi, \phi), \quad \phi \in [0, \pi], \quad (2.63)$$

para todo r e ξ , usando $\mu = \cos \phi$ para $\phi \in [0, \pi]$ e definindo

$$\mathbf{I}(r, \xi, \mu) = \mathbf{H}(r, \xi, \arccos \mu), \quad \mu \in [-1, 1], \quad (2.64)$$

é possível reescrever a Eq. (2.59) na forma

$$\left[\xi \left(\mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) + 1 \right] \mathbf{I}(r, \xi, \mu) = \mathbf{L}_S(r, \xi) + \mathbf{A}(\xi), \quad (2.65)$$

onde

$$\mathbf{L}_S(r, \xi) = \frac{2}{\pi} \mathbf{Q}_S(\xi) \int_{-1}^1 \int_0^\infty e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}_S^T(\xi') \mathbf{I}(r, \xi', \mu') \xi' d\xi' \frac{d\mu'}{(1 - \mu'^2)^{1/2}}. \quad (2.66)$$

Enquanto que as condições de contorno, dadas pelas Eqs. (2.62a) e (2.62b), passam a ser escritas por

$$\mathbf{I}(R, \xi, -\mu) = (1 - \alpha)\mathbf{I}(R, \xi, \mu), \quad \mu \in [0, 1]. \quad (2.67)$$

Por fim, multiplica-se a Eq. (2.65) por $\mathbf{Q}_S^{-1}(\xi)$ e define-se

$$\mathbf{G}(r, \xi, \mu) = \mathbf{Q}_S^{-1}(\xi) \mathbf{I}(r, \xi, \mu). \quad (2.68)$$

Desse modo, obtém-se

$$\left[\xi \left(\mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) + 1 \right] \mathbf{G}(r, \xi, \mu) = \int_{-1}^1 \int_0^\infty \mathbf{\Psi}(\xi', \mu') \mathbf{G}(r, \xi', \mu') d\xi' d\mu' + \mathbf{\Gamma}, \quad (2.69)$$

onde

$$\mathbf{\Gamma} = -\frac{\pi^{1/2}}{2} \begin{bmatrix} (15/2)^{1/2} k_2 \\ k_1 \end{bmatrix}, \quad (2.70)$$

$$\Psi(\xi, \mu) = \frac{2}{\pi(1-\mu^2)^{1/2}} \mathbf{Q}_S^T(\xi) \mathbf{Q}_S(\xi) \xi e^{-\xi^2} \quad (2.71)$$

e a condição de contorno é escrita como

$$\mathbf{G}(R, \xi, -\mu) = (1-\alpha) \mathbf{G}(R, \xi, \mu), \quad \mu \in [0, 1]. \quad (2.72)$$

A Eq. (2.69), juntamente com a condição de contorno indicada pela Eq. (2.72), corespondem à formulação integro-diferencial usualmente utilizada nas aplicações do modelo S em geometria cilíndrica. A partir destas equações e baseados na utilização do método das características, conforme já utilizado anteriormente na dedução da formulação integral do modelo BGK por Barichello et al. [Barichello et al., 2002], Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2002], deduziram a formulação integral do modelo cinético S, que descreve o fluxo de um gás rarefeito em um duto cilíndrico reto de raio R . Tal formulação é corresponde a equação vetorial

$$\mathbf{Z}(r) = \mathbf{B}(r) + \mathbf{\Gamma} + \int_0^R t \mathbf{K}(t \rightarrow r) \mathbf{Z}(t) dt, \quad (2.73)$$

com $r \in [0, R]$. Nela, o núcleo da integral é definido como sendo

$$\mathbf{K}(t \rightarrow r) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} F_0(t/\tau, r/\tau) \mathbf{\Delta}(\tau) \frac{d\tau}{\tau^2} \quad (2.74)$$

com $F_0(t/\tau, r/\tau)$ dado pela Eq. (2.14) e

$$\mathbf{\Delta}(\tau) = \mathbf{\Delta}_0 + \mathbf{\Delta}_2 \tau^2 + \mathbf{\Delta}_4 \tau^4, \quad (2.75)$$

sendo que

$$\mathbf{\Delta}_0 = \begin{bmatrix} 3/10 & -(1/30)^{1/2} \\ -(1/30)^{1/2} & 1 \end{bmatrix}, \quad (2.76)$$

$$\mathbf{\Delta}_2 = \begin{bmatrix} -2/15 & (2/15)^{1/2} \\ (2/15)^{1/2} & 0 \end{bmatrix} \quad (2.77)$$

e

$$\mathbf{\Delta}_4 = \begin{bmatrix} 2/15 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.78)$$

O segundo termo não homogêneo da Eq. (2.73) corresponde ao termo fonte

$$\mathbf{\Gamma} = -\frac{\pi^{1/2}}{2} \begin{bmatrix} (15/2)^{1/2} k_2 \\ k_1 \end{bmatrix}. \quad (2.79)$$

Nele, k_1 e k_2 são constantes definidas de modo que para o problema de Poiseuille tem-se $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$ e, para o problema do *creep* térmico, $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$.

Enquanto que o primeiro termo não homogêneo da Eq. (2.73) é definido por

$$\mathbf{B}(r) = \int_{-1}^1 \int_0^\infty \mathbf{\Psi}(\xi, \mu) \mathbf{F}[\xi, \mu_0(R, r, \mu)] \exp\{-s_0(r, \xi, \mu)\} d\xi d\mu \quad (2.80)$$

e depende da condição de contorno de superfície refletora

$$\mathbf{F}(\xi, \mu) = (1 - \alpha) \mathbf{G}(R, \xi, \mu), \quad \mu \in [0, 1] \quad e \quad \xi \in [0, \infty]. \quad (2.81)$$

Nela a fração $(1 - \alpha)$ é refletida especularmente e a fração restante α é refletida difusamente.

A expressão $\mathbf{B}(r)$ depende ainda da função característica

$$\mathbf{\Psi}(\xi, \mu) = \frac{2}{\pi (1 - \mu^2)^{1/2}} \mathbf{Q}_S^T(\xi) \mathbf{Q}_S(\xi) \xi e^{-\xi^2}, \quad (2.82)$$

onde

$$\mathbf{Q}_S(\xi) = \begin{bmatrix} (2/15)^{1/2} (\xi^2 - 1) & 1 \\ (1/15)^{1/2} & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.83)$$

além das expressões

$$\mu_0(t, r, \mu) = \frac{1}{t} (t^2 - r^2 + r^2 \mu^2)^{1/2} \quad (2.84)$$

e

$$s_0(r, \xi, \mu) = \left[(R^2 - r^2 + r^2 \mu^2)^{1/2} + r\mu \right] / \xi, \quad (2.85)$$

que também estão indicadas nas Eqs. (2.19) e (2.20), utilizadas na formulação integral do modelo BGK.

Contudo, segundo Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2002], para os casos em que as paredes sólidas do duto refletem as partículas do gás de modo perfeitamente difuso (com $\alpha = 1$), a condição de contorno indicada na Eq. (2.81) é nula e, conseqüentemente, o termo não-homogêneo $\mathbf{B}(r)$ definido na Eq. (2.80) também é nulo. Fato esse, que simplifica consideravelmente o problema, bem como torna possível a utilização da transformação proposta por Mitsis na resolução de problemas da DGR mediante esta formulação.

A função incógnita $\mathbf{Z}(r)$ que satisfaz a Eq. (2.73), torna possível a obtenção das quantidades de interesse físico, tais como o perfil de velocidade

$$u(r) = \pi^{-1/2} [0 \ 1] \mathbf{G}(r) \quad (2.86)$$

e o perfil do fluxo de calor (do inglês heat-flow profile)

$$q(r) = [15/(2\pi)]^{1/2} [1 \ 0] \mathbf{G}(r), \quad (2.87)$$

onde, segundo [Siewert e Valougeorgis, 2002], tem-se

$$\mathbf{G}(r) = \mathbf{Z}(r) - \mathbf{\Gamma}, \quad (2.88)$$

sendo que $\mathbf{\Gamma}$ é o termo fonte definido na Eq. (2.79). Ainda define-se, a taxa de fluxo do gás (do inglês particle-flow rate) [Loyalka, 1975; Valougeorgis e Thomas Jr., 1986]

$$U = \frac{4}{R^3} \int_0^R u(r) r dr \quad (2.89)$$

e a taxa de fluxo de calor

$$Q = \frac{4}{R^3} \int_0^R q(r) r dr. \quad (2.90)$$

As Eqs. (2.86), (2.87), (2.89) e (2.90) são referentes tanto para o problema de Poiseuille como ao problema de *creep* térmico, sendo que a diferença existente na formulação de tais problemas consiste apenas na utilização correta das constantes k_1 e k_2 , que aparecem no termo fonte indicado na Eq. (2.79) e que mediante esse termo caracterizam os dois problemas tratados.

Contudo, do ponto de vista da formulação integral, o modelo S diferencia-se do modelo BGK, apresentado anteriormente, por utilizar uma abordagem vetorial e possuir o núcleo, o termo fonte e um termo não homogêneo definidos de modo diferente. Entretanto, para o caso específico em que os problemas de Poiseuille e *creep* térmico são definidos em dutos cilíndricos com superfícies com reflexão perfeitamente difusa (com $\alpha = 1$), as duas formulações caracterizam-se por apresentar o termo fonte como único termo não homogêneo da formulação.

CAPÍTULO 3

MODELO BGK: UMA SOLUÇÃO ESPECTRAL

Neste capítulo são apresentadas duas propostas de resolução dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos de comprimento infinito (ou seja, dutos com o comprimento muito superior à medida do raio, de modo que os problemas podem ser modelados considerando apenas a dependência radial e angular), modelados pela formulação integral do modelo BGK indicada na seção (2.1).

Na primeira proposta, utiliza-se uma expansão em termos de splines cúbicas de Hermite para representar a função incógnita, $Z(r)$, da Eq. (2.24). Bem como, também é utilizado um esquema de pontos de colocação com o intuito de estabelecer um sistema algébrico linear que possibilita a obtenção dos coeficientes da expansão considerada.

Na segunda proposta, utiliza-se uma expansão em termos de polinômios de Legendre e o sistema algébrico linear é obtido mediante a utilização de propriedades destes polinômios.

Neste trabalho optou-se por utilizar estas duas abordagens visto que as mesmas já foram utilizadas com sucesso na resolução de outras equações integrais de interesse na área [Barichello et al., 2004; Rodrigues e Barichello, 2004].

Salienta-se, ainda, que em ambas as propostas, a avaliação das integrais envolvidas na formulação faz-se mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre.

3.1 Solução via Expansão em Splines Cúbicas de Hermite

As splines cúbicas de Hermite utilizadas neste trabalho são definidas por Schultz na Ref. [Schultz, 1973] e são apresentadas no Apêndice B deste trabalho. Assim, há um par

de splines cúbicas, $\mathfrak{S}_\alpha(x)$ para $\alpha = 0, 1, 2, \dots, L$, associadas a cada nó

$$\zeta_\beta = (\beta/M)^2, \quad \beta = 0, 1, \dots, M, \quad (3.1)$$

definido no intervalo $[0, 1]$ e de modo que se tenha $L = 2M + 1$.

Propõe-se, então, uma expansão para representar a função incógnita $Z(r)$ da Eq. (2.24), na forma

$$Z(r) = \sum_{\alpha=0}^L a_\alpha \mathfrak{S}_\alpha \left(\frac{r}{R} \right), \quad (3.2)$$

onde os termos a_α representam os coeficientes constantes que devem ser determinados e $\mathfrak{S}_\alpha(x)$ indica a função spline cúbica de Hermite de ordem α . Substituindo a expansão acima na Eq. (2.24), obtém-se

$$\sum_{\alpha=0}^L a_\alpha \left\{ \mathfrak{S}_\alpha(r/R) - \int_0^R t \mathfrak{S}_\alpha(t/R) \mathcal{K}(t \rightarrow r) dt \right\} = S(r). \quad (3.3)$$

Fazendo-se as seguintes trocas de variáveis:

$$x = \frac{r}{R} \quad (3.4)$$

e

$$y = \frac{t}{R}, \quad (3.5)$$

é possível reescrever a Eq. (3.3) na forma

$$\sum_{\alpha=0}^L a_\alpha \left\{ \mathfrak{S}_\alpha(x) - R^2 \int_0^1 y \mathfrak{S}_\alpha(y) \mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) dy \right\} = S(Rx). \quad (3.6)$$

Tendo em vista que o núcleo da equação integral, $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$, indicado pela Eq. (2.13), apresenta uma descontinuidade em $Ry = Rx$ (que se deve a presença do termo $F_0(Ry/\tau, Rx/\tau)$ que está definido, para as variáveis t e r , na Eq. (2.14)), propõe-se a divisão

do intervalo de integração na variável y da Eq. (3.6) escrevendo-a na forma

$$\sum_{\alpha=0}^L a_{\alpha} \{ \mathfrak{S}_{\alpha}(x) - R^2 \{ U_{\alpha}(x) + V_{\alpha}(x) \} \} = S(Rx), \quad (3.7)$$

onde

$$U_{\alpha}(x) = \int_0^x y \mathfrak{S}_{\alpha}(y) \mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) dy \quad (3.8)$$

e

$$V_{\alpha}(x) = \int_x^1 y \mathfrak{S}_{\alpha}(y) \mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) dy. \quad (3.9)$$

Neste ponto, avaliando-se a Eq. (3.7) nos pontos de colocação, aqui escolhidos como

$$x_i = \left(\frac{i}{L} \right)^2, \quad i = 0, 1, 2, \dots, L, \quad (3.10)$$

obtém-se a expressão

$$\sum_{\alpha=0}^L a_{\alpha} \{ \mathfrak{S}_{\alpha}(x_i) - R^2 \{ U_{\alpha}(x_i) + V_{\alpha}(x_i) \} \} = S(Rx_i) \quad (3.11)$$

que, após a avaliação das integrais envolvidas, corresponde a um sistema linear de equações algébricas de ordem $L+1 = 2M+2$, cuja solução são as constantes a_{α} utilizadas na expansão proposta para o termo $Z(r)$. Consequentemente, a resolução desse sistema torna possível também a obtenção das quantidades de interesse físico dos problemas em questão, tais como as velocidades macroscópicas. Isso mediante a substituição da expansão proposta nas Eqs. (2.30) e (2.32), de modo que se tenha

$$u_P(r) = \pi^{-1/2} \sum_{\alpha=0}^L a_{\alpha} \mathfrak{S}_{\alpha}\left(\frac{r}{R}\right) - \frac{1}{2} \quad (3.12)$$

e

$$u_T(r) = \pi^{-1/2} \sum_{\alpha=0}^L a_{\alpha} \mathfrak{S}_{\alpha}\left(\frac{r}{R}\right) - \frac{1}{4}, \quad (3.13)$$

para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, respectivamente. Diante disso, torna-se

possível ainda, a obtenção das taxas de fluxo do gás mediante a utilização de um esquema de quadratura nas Eqs. (2.31) e (2.33).

Convém salientar ainda, que tanto para o problema de Poiseuille quanto para o *creep* térmico, os coeficientes a_α das Eqs. (3.12) e (3.13) são dados pela solução do sistema linear indicado na Eq. (3.11). O que difere os sistemas obtidos, para os dois problemas em questão, é a presença do termo não homogêneo $S(Rx_i)$, que para o problema de Poiseuille é definido pela Eq. (2.27) enquanto que para o *creep* térmico pela Eq. (2.29).

3.1.1 Avaliação das Integrais

A resolução do sistema dado pela Eq. (3.11) e conseqüentemente a determinação dos coeficientes da expansão indicada na Eq. (3.2), depende da avaliação das integrais presentes na Eq. (3.11), aqui realizada mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre. Entretanto, a formulação apresentada impõe algumas dificuldades decorrentes da forma de definição do núcleo. De fato, estes aspectos podem acarretar em um esforço computacional muito elevado ou a perda de precisão. Neste sentido, é importante considerar algumas simplificações e trocas de variáveis com o intuito de possibilitar a avaliação das integrais com boa precisão e de reduzir o esforço computacional.

A seguir são apresentadas algumas alternativas utilizadas, neste trabalho, para avaliar as integrais presentes na Eq. (3.11).

3.1.1.1 Avaliação do Núcleo $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$ da Equação Integral

Para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, a maior dificuldade consiste na avaliação do núcleo da equação da integral, $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$, dado pela Eq. (2.13), que está presente nos termos $U_\alpha(x)$ e $V_\alpha(x)$ definidos pelas Eqs. (3.8) e (3.9). Uma das dificuldades é decorrente do fato de que o núcleo da equação integral está definido em termos de funções modificadas de Bessel, $I_0(x)$ e $K_0(x)$, uma vez que estas funções divergem quando seus argumentos tendem para o infinito ou para zero, respectivamente. Assim sendo, por razões computacionais, optou-se por utilizar

$$\hat{I}_0(x) = I_0(x)e^{-x} \quad (3.14)$$

e

$$\hat{K}_0(x) = K_0(x)e^x, \quad (3.15)$$

definições estas que já foram usadas em outros trabalhos [Siewert, 2000], [Barichello et al., 2002] e [Rodrigues, 2003]. Desse modo, a Eq. (2.14), que é usada na definição do núcleo, passa a ser reescrita na forma

$$F_n(Ry/\tau, Rx/\tau) = \begin{cases} \exp\{(y-x)R/\tau\}\hat{I}_n(Ry/\tau)\hat{K}_n(Rx/\tau), & y < x \\ \exp\{(x-y)R/\tau\}\hat{K}_n(Ry/\tau)\hat{I}_n(Rx/\tau), & y > x \end{cases}. \quad (3.16)$$

Além disso, o núcleo da equação integral, $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$, também apresenta uma divisão por τ^2 , o que impõe dificuldades na avaliação numérica desta integral nas proximidades de $\tau = 0$, particularmente quando os valores dos argumentos Ry e Rx estiverem bastante próximos. Porém, tal dificuldade não se manifesta quando a variável τ tende a zero e os valores de Ry e Rx não estiverem bastante próximos, como por exemplo quando $|Ry - Rx| \geq 0.05$. Nestes casos, as dificuldades numéricas impostas pela singularidade, oriunda da divisão por τ^2 , são minimizadas pelo comportamento numérico das funções modificadas de Bessel.

Uma alternativa utilizada na Ref. [Kamphorst et al., 2007a], para contornar a presença desta singularidade e, conseqüentemente, evitar problemas na avaliação das integrais, foi dividir o intervalo de integração na variável τ em vários subintervalos quando $|Ry - Rx| < 0.05$, especialmente para valores de τ próximos de zero. Tal metodologia garante a obtenção de resultados numéricos com boa precisão mediante a posterior aplicação do esquema de quadratura de Gauss-Legendre em cada um dos subintervalos, entretanto o esforço computacional requerido para tal cálculo é muito grande. Outra alternativa, usada nas Refs. [Kamphorst et al., 2008] e [Rodrigues et al., 2009], consiste em somar e subtrair uma outra integral (sem evidentemente alterar o integrando final), que possa ser avaliada analiticamente e de forma que a integral resultante seja mais fácil de ser avaliada. Através desta metodologia é possível obter resultados numéricos, com melhor precisão, em um tempo computacional muito reduzido se comparado com a metodologia da integração por subintervalos usada na Ref. [Kamphorst et al., 2007a].

Nesse contexto, a avaliação da integral $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$ é aqui realizada mediante a

consideração de dois casos, um quando $|Ry - Rx| \geq 0.05$ e outro quando $|Ry - Rx| < 0.05$.

No primeiro caso não ocorre a singularidade mencionada anteriormente, e a avaliação do núcleo pode ser realizada, sem a utilização da referida metodologia, através do esquema de quadratura de Gauss-Legendre usual, com pontos de quadratura $\mu_n \in [-1, 1]$ e seus respectivos pesos ω_n , mediante a expressão

$$\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) = 2\pi^{-1/2} \sum_{n=1}^{N_\tau} \omega_n \frac{e^{-z_n^2} F_0(Ry/z_n, Rx/z_n)}{(\mu_n + 1)z_n^2}, \quad (3.17)$$

onde

$$z_n = -\ln\left(\frac{\mu_n + 1}{2}\right) \quad (3.18)$$

e a constante N_τ indica o número de pontos de quadratura μ_n e de seus respectivos pesos ω_n , usados na avaliação desta integral. Salienta-se que a Eq. (3.17) é obtida considerando-se a Eq. (3.16) e através da realização da troca de variável

$$z(\tau) = 2e^{-\tau} - 1 \quad (3.19)$$

na Eq. (2.13). Cabe salientar, que para este caso, é possível avaliar o termo $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$, mediante a utilização da Eq. (3.17), com uma precisão de seis dígitos (se comparado com alguns resultados possíveis de serem obtidos com a utilização do software Maple), utilizando-se apenas trinta pontos de quadratura. Neste caso, aumentando-se o número de pontos de quadratura utilizados é possível obter resultados ainda mais precisos. Porém, à medida que os argumentos Ry e Rx assumem valores mais próximos (como por exemplo quando $|Ry - Rx| < 0.05$), fica cada vez mais difícil obter resultados precisos utilizando-se a mesma expressão, o que faz com que seu uso não seja mais eficaz.

Consequentemente, para o caso em que $|Ry - Rx| < 0.05$, optou-se por utilizar a metodologia, descrita anteriormente, que consiste em somar e subtrair uma outra integral ao termo $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$. Neste sentido, a fim de determinar qual integral deve ser usada para tanto, busca-se integrais que, preferencialmente, possam ser avaliadas analiticamente, bem como, que amenizem os problemas numéricos do termo $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$ quando somadas ou

subtraídas a ele. Diante disso, promoveu-se a subtração e a soma da integral

$$S_1(Ry, Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty F_0(Ry/\tau, Rx/\tau) \frac{d\tau}{\tau^2} \quad (3.20)$$

à Eq. (2.13). O termo $S_1(Ry, Rx)$ pode ser avaliado no software Maple, de modo que

$$\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty \left(e^{-\tau^2} - 1 \right) F_0(Ry/\tau, Rx/\tau) \frac{d\tau}{\tau^2} + S_1^*(Ry, Rx), \quad (3.21)$$

onde

$$S_1^*(Ry, Rx) = \frac{2\pi^{-1/2}}{Rx} E_K(y/x) \quad \text{se } y < x \quad (3.22a)$$

e

$$S_1^*(Ry, Rx) = \frac{2\pi^{-1/2}}{Ry} E_K(x/y) \quad \text{se } y > x, \quad (3.22b)$$

correspondem ao resultado da avaliação da Eq. (3.20) realizada no Maple. Aqui, $E_K(x)$ é utilizado para indicar a integral elíptica completa de primeira ordem, tal como definida na Ref. [Abramowitz e Stegun, 1965]. Contudo, tal procedimento apenas ameniza o problema, visto que o primeiro termo da expressão dada pela Eq. (3.21) continua apresentando variações numéricas grandes na função a ser integrada quando τ tende a zero. Então, propõe-se a troca de variável

$$s(\tau) = \frac{1}{1 + \tau}, \quad (3.23)$$

que possibilita reescrever a Eq. (3.21) do seguinte modo:

$$\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^1 g(s) F_0\left(Ry/\tau(s), Rx/\tau(s)\right) ds + S_1^*(Ry, Rx), \quad (3.24)$$

onde

$$\tau(s) = \frac{1}{s} - 1 \quad (3.25)$$

e

$$g(s) = \frac{e^{-\tau(s)^2} - 1}{s^2 \tau(s)^2}. \quad (3.26)$$

E, em seguida, propõe-se ainda, efetuar a soma e a subtração da integral

$$S_2 = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^1 e^{-s} \hat{K}_0(s) ds \quad (3.27)$$

junto à Eq. (3.24), obtendo-se, desse modo, a expressão

$$\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^1 \left\{ g(s) F_0\left(Ry/\tau(s), Rx/\tau(s)\right) + e^{-s} \hat{K}_0(s) \right\} ds + S(y, x), \quad (3.28)$$

onde

$$S(y, x) = S_1^*(Ry, Rx) - S_2. \quad (3.29)$$

A fim de avaliar a integral presente na Eq. (3.28) mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, faz-se necessário ainda, a realização da seguinte troca de variável:

$$p(s) = 2s - 1. \quad (3.30)$$

Desse modo, obtém-se

$$\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) = \frac{1}{\pi^{1/2}} \sum_{n=1}^{N_\tau} \omega_n \left\{ A_n F_0\left(Ry/p_n^\tau, Rx/p_n^\tau\right) + e^{-p_n^s} \hat{K}_0(p_n^s) \right\} + S(y, x), \quad (3.31)$$

onde

$$p_n^s = \frac{\mu_n + 1}{2}, \quad (3.32)$$

$$p_n^\tau = \frac{1 - \mu_n}{1 + \mu_n} \quad (3.33)$$

e

$$A_n = \frac{4 \left(e^{-(p_n^\tau)^2} - 1 \right)}{(1 - \mu_n)^2}. \quad (3.34)$$

Na Eq. (3.31), a constante N_τ indica o número de pontos de quadratura de Gauss-Legendre μ_n e de seus respectivos pesos ω_n , usados na avaliação dessa integral. O termo F_0 é avaliado na Eq. (3.16). A expressão S_2 que é indicada pela Eq. (3.27) e que aparece no termo $S(y, x)$, pode ser avaliada numericamente mediante a utilização do software Maple como sendo igual a 1.402022222809807033. E, o termo $S_1^*(r, t)$, dado pelas Eqs. (3.22a) e (3.22b), pode ser determinado numericamente com precisão de 2×10^{-8} , usando o algoritmo apresentado na Ref. [Abramowitz e Stegun, 1965] para a avaliação da integral elíptica completa de primeira ordem.

Através da expressão indicada na Eq. (3.31), é possível avaliar o termo $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$ com uma precisão de cinco a seis dígitos usando-se apenas trinta pontos de quadratura de Gauss-Legendre e, que tal expressão pode ser empregada (com a mesma precisão) para todos os valores de Rx e Ry , estando eles próximos ou não. Entretanto, neste trabalho, optou-se em utilizá-la apenas nos casos em que $|Ry - Rx| < 0.05$, visto que através da Eq. (3.31) o resultado fica limitado pela precisão do algoritmo utilizado para avaliar a integral elíptica contida nesta expressão. Salienta-se ainda, que tal procedimento não necessita de muito esforço computacional adicional, sendo que o tempo computacional requerido é da ordem de décimos de segundo e, portanto, não muito superior ao requisitado anteriormente, nos casos em que $|Ry - Rx| \geq 0.05$, utilizando-se o mesmo número de pontos de quadratura.

3.1.1.2 Avaliação das Expressões $U_\alpha(x_i)$ e $V_\alpha(x_i)$

Do ponto de vista do tempo computacional, para a avaliação das expressões $U_\alpha(x_i)$ e $V_\alpha(x_i)$ apresentadas nas Eqs. (3.8) e (3.9), é importante considerar apenas os subintervalos $[d_\alpha, e_\alpha]$ para os quais as funções splines $\mathfrak{S}_\alpha(y)$ assumem valores não nulos, de forma que

$$\mathfrak{S}_\alpha(y) = 0, \quad y \notin [d_\alpha, e_\alpha]. \quad (3.35)$$

Pode-se, então, escrever

$$U_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \leq d_\alpha \quad (3.36a)$$

e

$$U_\alpha(x_i) = \int_{d_\alpha}^{m_{\alpha,i}} y \mathfrak{S}_\alpha(y) \mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx_i) dy, \quad \text{se } x_i > d_\alpha, \quad (3.36b)$$

onde

$$m_{\alpha,i} = \min\{x_i, e_\alpha\}. \quad (3.37)$$

Do mesmo modo, tem-se

$$V_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \geq e_\alpha \quad (3.38a)$$

e

$$V_\alpha(x_i) = \int_{n_{\alpha,i}}^{e_\alpha} y \mathfrak{S}_\alpha(y) \mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx_i) dy, \quad \text{se } x_i < e_\alpha, \quad (3.38b)$$

onde

$$n_{\alpha,i} = \max\{x_i, d_\alpha\}. \quad (3.39)$$

A fim de realizar a avaliação da integral $U_\alpha(x_i)$, da Eq. (3.36b), mediante o uso do esquema de pontos de quadratura de Gauss-Legendre usual, propõe-se efetuar a troca de variável

$$P_{\alpha,i}(y) = \frac{2y - d_\alpha - m_{\alpha,i}}{m_{\alpha,i} - d_\alpha}. \quad (3.40)$$

fazendo com que o termo $U_\alpha(x_i)$ passe a ser avaliado por

$$U_\alpha(x_i) = \frac{m_{\alpha,i} - d_\alpha}{2} \sum_{m=1}^{N_y} \omega_m p_{\alpha,i,m} \mathfrak{S}_\alpha(p_{\alpha,i,m}) \mathcal{K}(Rp_{\alpha,i,m} \rightarrow Rx_i) \quad (3.41)$$

se $x_i > d_\alpha$ ou, pela Eq. (3.36a) caso $x_i \leq d_\alpha$. Na Eq. (3.41), a constante N_y corresponde

ao número de pontos de quadratura de Gauss-Legendre $\mu_m \in [-1, 1]$ e de seus respectivos pesos ω_m , usados para a avaliação da integral. O termo $\mathcal{K}(Rp_{\alpha,i,m} \rightarrow Rx_i)$ é avaliado pela Eq. (3.17) quando $|Rp_{\alpha,i,m} - Rx_i| \geq 0.05$ ou pela Eq. (3.31) quando $|Rp_{\alpha,i,m} - Rx_i| < 0.05$, sendo

$$p_{\alpha,i,m} = \frac{(m_{\alpha,i} - d_{\alpha})\mu_m + d_{\alpha} + m_{\alpha,i}}{2}. \quad (3.42)$$

Do mesmo modo, para se avaliar a integral $V_{\alpha}(x_i)$, da Eq. (3.38b), propõe-se utilizar a troca de variável

$$Q_{\alpha,i}(y) = \frac{2y - e_{\alpha} - n_{\alpha,i}}{e_{\alpha} - n_{\alpha,i}}. \quad (3.43)$$

Logo, tem-se

$$V_{\alpha}(x_i) = \frac{e_{\alpha} - n_{\alpha,i}}{2} \sum_{m=1}^{N_y} \omega_m q_{\alpha,i,m} \mathfrak{S}_{\alpha}(q_{\alpha,i,m}) \mathcal{K}(Rq_{\alpha,i,m} \rightarrow Rx_i) \quad (3.44)$$

se $x_i < e_{\alpha}$ ou, dado pela Eq. (3.38a) caso $x_i \geq e_{\alpha}$. Na Eq. (3.44), a constante N_y corresponde ao número de pontos de quadratura de Gauss-Legendre usadas para a avaliação da integral, o termo $\mathcal{K}(Rq_{\alpha,i,m} \rightarrow Rx_i)$ é avaliado pela Eq. (3.17) ou pela Eq. (3.31) e,

$$q_{\alpha,i,m} = \frac{(e_{\alpha} - n_{\alpha,i})\mu_m + n_{\alpha,i} + e_{\alpha}}{2}. \quad (3.45)$$

3.1.1.3 Avaliação do Termo Fonte

Conforme visto anteriormente, o termo $S(Rx_i)$ da Eq. (2.24), refere-se ao termo de fonte do problema. Para o problema de Poiseuille, de acordo com a Eq. (2.27), tem-se

$$S_P(Rx_i) = \frac{1}{2}\pi^{1/2}, \quad (3.46)$$

para $i = 0, 1, 2, \dots, L$. Enquanto que para o problema *creep* térmico, o termo fonte é dado pela Eq. (2.29). Consequentemente, para tornar possível sua avaliação mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, faz-se necessário promover a troca de variável indicada pela Eq. (3.19). Desse modo, tem-se

$$S_T(Rx_i) = R \sum_{n=1}^{N_\tau} \omega_n \frac{z_n e^{-z_n^2} K_1(R/z_n) I_0(Rx_i/z_n)}{\mu_n + 1}, \quad (3.47)$$

sendo z_n dado pela Eq. (3.18).

3.1.2 Resultados Numéricos

A fim de avaliar as quantidades de interesse dos problemas estudados, foi realizada uma implementação em linguagem FORTRAN. Para tanto, foram necessários os seguintes parâmetros de entrada:

- a magnitude R do raio;
- a constante M , que determina o número $M + 1$ de nós usados na definição das funções splines e que estabelece a ordem $L+1 = 2M+2$ do sistema linear usado para determinar os coeficientes das funções splines utilizadas na expansão;
- as constantes N_τ , N_y e N_r que indicam o número de pontos de quadratura usados no cálculo das integrais necessárias para determinação do sistema linear nas variáveis τ , y e r , respectivamente.

Foram ainda implementadas subrotinas para:

- calcular os pontos e os respectivos pesos da quadratura de Gauss-Legendre;
- determinar os nós necessários para definir as funções splines;
- determinar os pontos de colocação;
- avaliar as funções splines;
- avaliar as funções de Bessel;
- determinar os elementos das matrizes que compõem o sistema linear;
- obter resultados para o perfil de velocidade;
- obter resultados para a taxa de fluxo.

Uma vez avaliadas as integrais, o sistema linear definido pela Eq. (3.11) é resolvido usando-se as subrotinas DGEFA e DGESL do pacote LINPACK [Dongarra et al., 1979]. A solução desse sistema são os coeficientes da expansão proposta para a função $Z(r)$ e, conseqüentemente, possibilita a avaliação das quantidades de interesse físico de cada problema. As velocidades macroscópicas dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico, são determinadas a partir das Eqs. (3.12) e (3.13), respectivamente. Enquanto que as taxas de fluxos, para os mesmos problema, são determinadas pelas expressões

$$U_P = \frac{2}{R^2} \sum_{h=1}^{N_r} \omega_h u_P(r_h^*) r_h^* \quad (3.48)$$

e

$$U_T = \frac{2}{R^2} \sum_{h=1}^{N_r} \omega_h u_T(r_h^*) r_h^*, \quad (3.49)$$

respectivamente. Nelas, N_r é o número de pontos de quadratura de Gauss-Legendre $\mu_h \in [-1, 1]$ e de seus respectivos pesos ω_h utilizados na avaliação da integral e,

$$r_h^* = \frac{R}{2}(\mu_h + 1). \quad (3.50)$$

Tais expressões são obtidas a partir das Eqs. (2.31) e (2.33), mediante a utilização da troca de variável

$$\eta(r) = \frac{2r}{R} - 1. \quad (3.51)$$

Na tabela 3.1 são apresentados alguns resultados para a velocidade macroscópica do problema de Poiseuille em dutos cilíndricos de raios distintos, obtidos através da implementação em FORTRAN mencionada anteriormente. Nela, a primeira coluna indica as razões entre a posição radial e o raio do duto cilíndrico, enquanto que as demais colunas indicam as velocidades obtidas para os dutos cilíndricos de raio R indicados.

Na tabela 3.2 são apresentados alguns resultados obtidos para a velocidade do problema *creep* térmico em dutos cilíndricos com diferentes valores de R .

E na tabela 3.3, são apresentados alguns resultados obtidos para a taxa de fluxo dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos para alguns valores de R .

Tabela 3.1 – Velocidades para o Problema de Poiseuille

r/R	$R = 0.1$	$R = 0.2$	$R = 0.5$	$R = 1.0$	$R = 2.0$
0.0	8.48682(-2)	1.69805(-1)	4.41972(-1)	9.71859(-1)	2.35333(0)
0.1	8.46238(-2)	1.69275(-1)	4.40351(-1)	9.67640(-1)	2.34083(0)
0.2	8.38853(-2)	1.67674(-1)	4.35459(-1)	9.54917(-1)	2.30316(0)
0.3	8.26357(-2)	1.64966(-1)	4.27198(-1)	9.33481(-1)	2.23993(0)
0.4	8.08442(-2)	1.61087(-1)	4.15392(-1)	9.02948(-1)	2.15029(0)
0.5	7.84610(-2)	1.55933(-1)	3.99755(-1)	8.62691(-1)	2.03292(0)
0.6	7.54072(-2)	1.49339(-1)	3.79830(-1)	8.11701(-1)	1.88560(0)
0.7	7.15538(-2)	1.41032(-1)	3.54862(-1)	7.48290(-1)	1.70456(0)
0.8	6.66684(-2)	1.30524(-1)	3.23476(-1)	6.69334(-1)	1.48259(0)
0.9	6.02377(-2)	1.16727(-1)	2.82577(-1)	5.67670(-1)	1.20253(0)
1.0	4.97047(-2)	9.41747(-2)	2.16201(-1)	4.04807(-1)	7.65173(-1)

Tabela 3.2 – Velocidades para o Problema *Creep* Térmico

r/R	$R = 0.1$	$R = 0.2$	$R = 0.5$	$R = 1.0$	$R = 2.0$
0.0	3.65104(-2)	6.58883(-2)	1.33665(-1)	2.10139(-1)	2.97029(-1)
0.1	3.64018(-2)	6.56788(-2)	1.33204(-1)	2.09405(-1)	2.96095(-1)
0.2	3.60735(-2)	6.50450(-2)	1.31808(-1)	2.07176(-1)	2.93245(-1)
0.3	3.55170(-2)	6.39697(-2)	1.29433(-1)	2.03368(-1)	2.88330(-1)
0.4	3.47171(-2)	6.24220(-2)	1.26001(-1)	1.97827(-1)	2.81071(-1)
0.5	3.36494(-2)	6.03515(-2)	1.21383(-1)	1.90300(-1)	2.71015(-1)
0.6	3.22749(-2)	5.76788(-2)	1.15375(-1)	1.80388(-1)	2.57426(-1)
0.7	3.05300(-2)	5.42732(-2)	1.07642(-1)	1.67423(-1)	2.39061(-1)
0.8	2.83003(-2)	4.98991(-2)	9.75741(-2)	1.50186(-1)	2.13611(-1)
0.9	2.53330(-2)	4.40347(-2)	8.38101(-2)	1.25925(-1)	1.75749(-1)
1.0	2.03697(-2)	3.40614(-2)	5.93912(-2)	8.02427(-2)	9.66268(-2)

Tabela 3.3 – Taxas de Fluxo

R	Poiseuille	Creep Térmico
0.1	1.40396(0)	5.97479(-1)
0.2	1.38159(0)	5.29371(-1)
0.5	1.38665(0)	4.17068(-1)
1.0	1.45829(0)	3.21726(-1)
2.0	1.65765(0)	2.27118(-1)

Os parâmetros de entrada utilizados para obtenção dos dados das tabelas 3.1, 3.2 e 3.3 são: $M = 340$, $N_\tau = 60$, $N_y = 80$ e $N_r = 50$. Desse modo, o tempo computacional requerido, utilizando-se um microcomputador PENTIUM IV de 2.0 GHz, é de aproximadamente setenta minutos. Porém, mediante a utilização de parâmetros de entrada menores, como por exemplo $M = 20$, $N_\tau = 30$, $N_y = 30$ e $N_r = 30$, é possível obter resultados com três dígitos corretos em um tempo computacional de aproximadamente quatro segundos, especialmente para os dutos cilíndricos com valores de R pequenos.

Cabe salientar também, que os resultados das tabelas 3.1 a 3.3 conferem com os respectivos resultados apresentados por Siewert [Siewert, 2000], que como mencionado anteriormente, obteve tais resultados mediante a aplicação da transformação proposta por Mitsis e a posterior utilização do método ADO.

3.2 Solução via Expansão em Polinômios de Legendre

Também visando obter soluções de caráter analítico para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos a partir da formulação apresentada no capítulo 2 para o modelo BGK, propõe-se ainda, expressar a função incógnita $Z(r)$ da equação integral em termos de uma expansão em polinômios de Legendre, da forma

$$Z(r) = \sum_{\alpha=0}^L a_\alpha P_\alpha \left(\frac{2r}{R} - 1 \right), \quad (3.52)$$

onde $P_\alpha(x)$ representa o polinômio de Legendre de ordem α , aqui determinado através da fórmula de recorrência

$$P_{n+1}(x) = \frac{(2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)}{n+1}, \quad n \geq 1, \quad (3.53)$$

com $P_0(x) = 1$ e $P_1(x) = x$, conforme apresentada na Ref. [Abramowitz e Stegun, 1965].

Substituindo-se a Eq. (3.52) na Eq. (2.24), tem-se

$$\sum_{\alpha=0}^L a_\alpha \left[P_\alpha \left(\frac{2r}{R} - 1 \right) - \int_0^R t P_\alpha \left(\frac{2t}{R} - 1 \right) \mathcal{K}(t \rightarrow r) dt \right] = S(r). \quad (3.54)$$

Propõe-se, então, efetuar a divisão do intervalo de integração em t , visando contornar o problema da descontinuidade apresentada pelo núcleo da equação, $\mathcal{K}(t \rightarrow r)$, nos casos em

para $r = t$. Ainda, efetuando a multiplicação da Eq. (3.54) por

$$\phi_\beta(r) = rP_\beta\left(\frac{2r}{R} - 1\right) \quad (3.55)$$

para $\beta = 0, 1, 2, \dots, L$ e, integrando a expressão resultante em r , obtém-se

$$\sum_{\alpha=0}^L a_\alpha \{A_{\beta,\alpha} - [B_{\beta,\alpha} + C_{\beta,\alpha}]\} = D_\beta, \quad (3.56)$$

onde

$$A_{\beta,\alpha} = \int_0^R \phi_\beta(r)\phi_\alpha(r)dr/r, \quad (3.57)$$

$$B_{\beta,\alpha} = \int_0^R \int_0^r \phi_\beta(r)\phi_\alpha(t)\mathcal{K}(t \rightarrow r)dtdr, \quad (3.58)$$

$$C_{\beta,\alpha} = \int_0^R \int_r^R \phi_\beta(r)\phi_\alpha(t)\mathcal{K}(t \rightarrow r)dtdr \quad (3.59)$$

e

$$D_\beta = \int_0^R \phi_\beta(r)S(r)dr. \quad (3.60)$$

A expressão indicada na Eq. (3.55), foi assim definida, com o propósito de se obter um sistema algébrico simétrico, o que possibilitará a redução do número de coeficientes a serem determinados no sistema linear definido pela Eq. (3.56).

Com o intuito de avaliar numericamente as integrais nas variáveis r e t , que surgem nas expressões $A_{\beta,\alpha}$, $B_{\beta,\alpha}$, $C_{\beta,\alpha}$ e D_β , mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre usual, com os pontos de quadratura $\mu_n \in [-1, 1]$ e seus respectivos pesos ω_n , primeiramente, faz-se necessário efetuar algumas trocas de variáveis. Para a variável r , propõe-se usar a mesma troca de variável já apresentada na Eq. (3.51). Enquanto que para a variável t , serão usadas as expressões

$$\eta_1(t) = \frac{2t}{r} - 1 \quad (3.61)$$

para o intervalo $[0, r]$ e,

$$\eta_2(t) = \frac{2t - r - R}{R - r} \quad (3.62)$$

para o intervalo $[r, R]$. Dessa forma, as expressões indicadas nas Eqs. (3.57) a (3.60) podem ser avaliadas pelas expressões

$$A_{\beta,\alpha} = \frac{R}{2} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n P_\beta(\mu_n) P_\alpha(\mu_n), \quad (3.63)$$

$$B_{\beta,\alpha} = \frac{R}{4} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n^2 P_\beta(\mu_n) \sum_{m=1}^{N_t} \omega_m g_{m,n} P_\alpha(\gamma_{m,n}) \mathcal{K}(g_{m,n} \rightarrow f_n), \quad (3.64)$$

$$C_{\beta,\alpha} = \frac{R}{4} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n (R - f_n) f_n P_\beta(\mu_n) \sum_{m=1}^{N_t} \omega_m h_{m,n} P_\alpha(\gamma_{m,n}^*) \mathcal{K}(h_{m,n} \rightarrow f_n) \quad (3.65)$$

e

$$D_\beta = \frac{R}{2} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n S(f_n) f_n P_\beta(\mu_n). \quad (3.66)$$

Nelas, as constantes N_r e N_t indicam o número de pontos e pesos da quadratura de Gauss-Legendre usados na avaliação das integrais nas variáveis r e t , respectivamente; os termos $\mathcal{K}(g_{m,n} \rightarrow f_n)$ e $\mathcal{K}(h_{m,n} \rightarrow f_n)$ podem ser avaliados, dependendo do módulo da diferença de seus argumentos, pelas Eq. (3.17) ou Eq. (3.31). Enquanto que os demais termos presentes nesta formulação são definidos de modo que

$$f_n = \frac{\mu_n + 1}{2} R, \quad (3.67)$$

$$g_{m,n} = \frac{\mu_m + 1}{2} f_n, \quad (3.68)$$

$$h_{m,n} = \frac{R(\mu_m + 1) - f_n(\mu_m - 1)}{2}, \quad (3.69)$$

$$\gamma_{m,n} = \frac{(\mu_m + 1)f_n - R}{R} \quad (3.70)$$

e

$$\gamma_{m,n}^* = \frac{(R - f_n)\mu_m + f_n}{R}. \quad (3.71)$$

Na Eq. (3.66), o termo $S(f_n)$ corresponde ao termo fonte do problema. Para o problema de Poiseuille tal termo é dado pela Eq. (2.27), enquanto que para o problema *creep* térmico, tem-se

$$S_T(f_n) = \frac{R}{2} \sum_{n=1}^{N_\tau} \omega_n z_n e^{-z_n^2} K_1(R/z_n) I_0(f_n/z_n) (z_n + 1)^2, \quad (3.72)$$

obtido a partir da Eq. (2.29) mediante a troca de variável indicada pela Eq. (3.19). Aqui, N_τ indica o número de pontos de quadratura de Gauss-Legendre μ_n e de seus respectivos pesos ω_n usados para a avaliação da integral, z_n é dado pela Eq. (3.18) e f_n é dado pela Eq. (3.67).

3.2.1 Obtenção das Quantidades de Interesse Físico

Uma vez avaliadas as integrais da Eq. (3.56), tem-se um sistema linear de ordem $L + 1$, cuja solução é composta pelos coeficientes a_α que satisfazem a expansão proposta na Eq. (3.52). Essa, por sua vez, possibilita a obtenção das quantidades de interesse físico dos problemas em questão. Logo, as velocidades macroscópicas das partículas do gás são dadas por

$$u_P(r) = \pi^{-1/2} \sum_{\alpha=0}^L a_\alpha P_\alpha \left(\frac{2r}{R} - 1 \right) - \frac{1}{2} \quad (3.73)$$

para o problema o problema de Poiseuille e, por

$$u_T(r) = \pi^{-1/2} \sum_{\alpha=0}^L a_\alpha P_\alpha \left(\frac{2r}{R} - 1 \right) - \frac{1}{4} \quad (3.74)$$

para o problema do *creep* térmico, salientando novamente que os coeficiente a_α usados nas Eqs. (3.73) e (3.74) correspondem às soluções dos sistemas lineares definidos para os problemas de Poiseuille e "creep" térmico, respectivamente. Enquanto que as taxas de fluxo para

os mesmos problemas, são obtidas mediante as Eqs. (3.48) e (3.49), respectivamente.

3.2.2 Resultados Numéricos

Para obter resultados referentes às quantidades de interesse físico dos problemas mencionados, mediante a formulação aqui apresentada, também realizou-se uma implementação em linguagem FORTRAN com os seguintes parâmetros de entrada:

- a magnitude do raio R ;
- a constante L que determina a ordem $L + 1$ do sistema linear indicado na Eq. (3.56);
- as constantes N_τ , N_t e N_r , que indicam o número de pontos de quadratura que devem ser usados nas avaliações das integrais de variáveis τ , t e r , respectivamente.

Também foram implementadas subrotinas para:

- determinar os pontos e os respectivos pesos da quadratura de Gauss-Legendre;
- avaliar os polinômios de Legendre através da fórmula de recorrência indicada na Eq. (3.53);
- calcular os elementos das matrizes que compõem o sistema linear dado pela Eq. (3.56);
- avaliar as quantidades de interesse físico.

Desse modo, uma vez que foram avaliadas as integrais e estabelecido o sistema linear indicado pela Eq. (3.56), utilizou-se as subrotinas DGEFA e DGESL do pacote LINPACK [Dongarra et al., 1979] para resolvê-lo. A solução desse sistema fornece os coeficientes da expansão $Z(r)$ proposta na Eq. (3.52) e, conseqüentemente, torna possível a avaliação das quantidades de interesse físico de cada problema, mediante a utilização das Eqs. (3.73) e (3.48) para o problema de Poiseuille e, das Eqs. (3.74) e (3.49) para o problema *creep* térmico.

Na tabela 3.4 são apresentados alguns resultados obtidos para a velocidade macroscópica do problema de Poiseuille em dutos cilíndricos para diferentes valores de R , através da implementação em FORTRAN mencionada anteriormente.

Na tabela 3.5 são apresentados alguns resultados obtidos para a velocidade macroscópica do problema *creep* térmico.

Tabela 3.4 – Velocidades para o Problema de Poiseuille

r/R	$R = 0.1$	$R = 0.2$	$R = 0.5$	$R = 1.0$	$R = 2.0$
0.0	8.4868(-2)	1.6981(-1)	4.4197(-1)	9.7186(-1)	2.3533(0)
0.1	8.4624(-2)	1.6928(-1)	4.4035(-1)	9.6764(-1)	2.3408(0)
0.2	8.3885(-2)	1.6767(-1)	4.3546(-1)	9.5492(-1)	2.3032(0)
0.3	8.2636(-2)	1.6497(-1)	4.2720(-1)	9.3348(-1)	2.2399(0)
0.4	8.0844(-2)	1.6109(-1)	4.1539(-1)	9.0295(-1)	2.1503(0)
0.5	7.8461(-2)	1.5593(-1)	3.9976(-1)	8.6269(-1)	2.0329(0)
0.6	7.5407(-2)	1.4934(-1)	3.7983(-1)	8.1170(-1)	1.8856(0)
0.7	7.1554(-2)	1.4103(-1)	3.5486(-1)	7.4829(-1)	1.7046(0)
0.8	6.6668(-2)	1.3052(-1)	3.2348(-1)	6.6933(-1)	1.4826(0)
0.9	6.0238(-2)	1.1673(-1)	2.8258(-1)	5.6767(-1)	1.2025(0)
1.0	4.9705(-2)	9.4175(-2)	2.1620(-1)	4.0481(-1)	7.6517(-1)

Tabela 3.5 – Velocidades para o Problema *Creep* Térmico

r/R	$R = 0.1$	$R = 0.2$	$R = 0.5$	$R = 1.0$	$R = 2.0$
0.0	3.6510(-2)	6.5888(-2)	1.3366(-1)	2.1014(-1)	2.9703(-1)
0.1	3.6402(-2)	6.5679(-2)	1.3320(-1)	2.0940(-1)	2.9609(-1)
0.2	3.6073(-2)	6.5045(-2)	1.3181(-1)	2.0718(-1)	2.9325(-1)
0.3	3.5517(-2)	6.3970(-2)	1.2943(-1)	2.0337(-1)	2.8833(-1)
0.4	3.4717(-2)	6.2422(-2)	1.2600(-1)	1.9783(-1)	2.8107(-1)
0.5	3.3649(-2)	6.0351(-2)	1.2138(-1)	1.9030(-1)	2.7102(-1)
0.6	3.2275(-2)	5.7679(-2)	1.1537(-1)	1.8039(-1)	2.5743(-1)
0.7	3.0530(-2)	5.4273(-2)	1.0764(-1)	1.6742(-1)	2.3906(-1)
0.8	2.8300(-2)	4.9899(-2)	9.7574(-2)	1.5019(-1)	2.1361(-1)
0.9	2.5333(-2)	4.4035(-2)	8.3810(-2)	1.2592(-1)	1.7575(-1)
1.0	2.0370(-2)	3.4061(-2)	5.9391(-2)	8.0243(-2)	9.6627(-2)

Tabela 3.6 – Taxas de Fluxo

R	Poiseuille	Creep Térmico
0.1	1.4040(0)	5.9748(-1)
0.2	1.3816(0)	5.2937(-1)
0.5	1.3867(0)	4.1707(-1)
1.0	1.4583(0)	3.2173(-1)
2.0	1.6577(0)	2.2712(-1)

E, na tabela 3.6, são apresentados alguns resultados obtidos para a taxa de fluxo dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos para diferentes valores de R .

Os parâmetros de entrada utilizados para obtenção dos dados das tabelas 3.4, 3.5 e 3.6 são: $L = 60$, $N_r = 60$, $N_y = 240$ e $N_r = 180$. Desse modo, o tempo computacional requerido, utilizando-se um microcomputador PENTIUM IV de 2.0 GHz, é de aproximadamente 155 minutos. Acredita-se que todos os dígitos apresentados nas tabelas estejam corretos, visto que os mesmos resultados podem ser obtidos mediante a metodologia empregada na seção anterior, bem como, comparando-os com os respectivos resultados apresentados por Siewert [Siewert, 2000]. Entretanto, é possível determinar resultados com dois a três dígitos corretos em um tempo computacional de aproximadamente quinze segundos, usando parâmetros de entrada menores, como por exemplo: $L = 10$, $N_r = 30$, $N_y = 40$ e $N_r = 40$, especialmente nos casos em que o duto cilíndrico possui valores de R pequenos.

3.3 Considerações Finais

Ambas as abordagens utilizadas mostram ser eficientes no sentido de possibilitarem a obtenção de resultados para as quantidades de interesse físico dos dois problemas mencionados com uma precisão de cinco a seis dígitos. Porém, apesar do sistema matricial obtido através da utilização da expansão em polinômios de Legendre ser simétrico (possibilitando assim o cálculo de apenas parte dos elementos do sistema), tal metodologia ainda demanda maior esforço computacional para obtenção de resultados com boa precisão, o que se deve principalmente pela dificuldade de se avaliar as integrais triplas que surgem nesta formulação e, também, devido à necessidade de se usar um número elevado de pontos de quadratura para se avaliar os polinômios de Legendre de ordens maiores, uma vez que estes possuem muitas oscilações no intervalo $[-1, 1]$ para o qual são definidos.

O uso da expansão em termos das splines cúbicas de Hermite mostrou necessitar de menor esforço computacional, uma vez que neste caso há somente integrais duplas e também pelo fato de se poder avaliar as integrais, com boa precisão, com um número não tão grande de pontos de quadratura, o que em parte, se deve ao fato das integrais em y poderem ser avaliadas apenas em pequenos subintervalos onde as funções splines assumem valores não-nulos. Ressalta-se, no entanto, que o principal problema associado ao uso de esquemas de colocação, que é o de poder resultar em sistemas mal condicionados, no caso dos problemas aqui abordados, parece ter sido contornado com a escolha adequada dos pontos de colocação.

Comparando os valores apresentados nas tabelas e os respectivos tempos computacionais requeridos, percebe-se que mediante a utilização da expansão em termos de funções splines, se obteve um dígito de precisão a mais do que mediante a utilização da metodologia que utiliza a expansão em termos de polinômios de Legendre e, isso, em menos da metade do tempo computacional requerido.

Salienta-se, também, a importância de se utilizar a técnica da soma e subtração de uma integral, com o intuito de amenizar as singularidades do núcleo da integral $\mathcal{K}(t \rightarrow r)$, sendo que este fato possibilita a avaliação deste termo mediante o uso do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, com precisão de seis dígitos, com apenas trinta pontos de quadratura, apesar da singularidade apresentada pela função. Diante disso, o tempo computacional requerido para obtenção dos resultados, para as quantidades de interesse físico, mediante a utilização dessa técnica, em geral, fica reduzido em mais de 50% quando comparado ao tempo computacional necessário para obtenção de resultados, com a mesma precisão, mediante a utilização da técnica que se baseia na subdivisão do intervalo de integração usada na Ref. [Kamphorst et al., 2007a].

A seguir são apresentados alguns gráficos visando evidenciar a influência do valor de R sobre os valores das quantidades de interesse físico dos dois problemas estudados.

Na figura 3.1 são apresentados os gráficos dos perfis de velocidade para o problema do fluxo de Poiseuille em dutos cilíndricos com raios $R = 0.1$, $R = 0.5$ e $R = 1$. Nela, é possível observar que o aumento do valor de R implica no aumento do valor das velocidades macroscópicas do fluxo, bem como, no aumento da velocidade no centro do duto, quando comparado com as velocidades nas proximidades da parede.

Na figura 3.2 é apresentado o gráfico da taxa de fluxo do problema de Poiseuille em

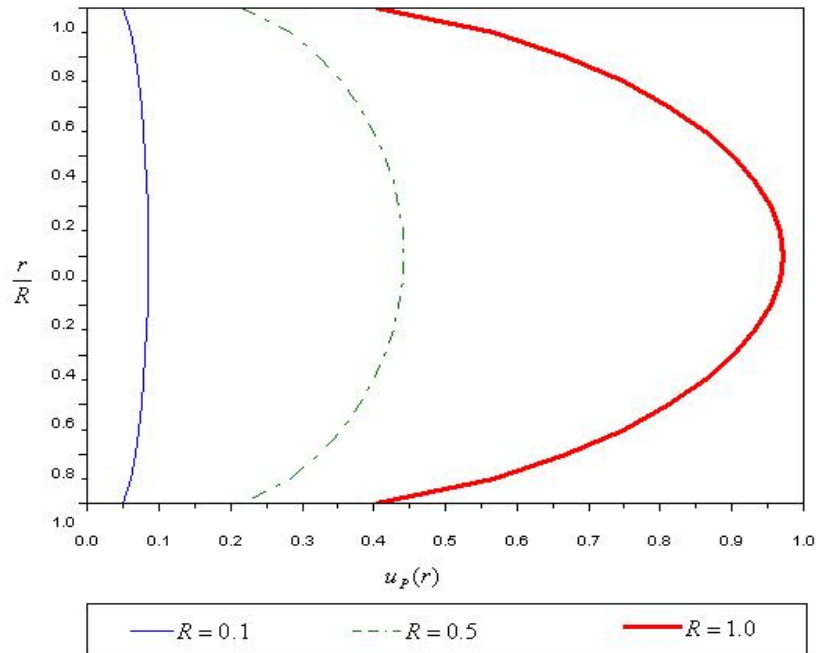


Figura 3.1 – Perfis de Velocidade do Fluxo de Poiseuille

dutos cilíndricos em função do raio R . Nesta, pode-se observar que a taxa de fluxo apresenta um ponto de mínimo para o valor $R \cong 0.3$.

Na figura 3.3 são apresentados os gráficos dos perfis de velocidade para o problema *creep* térmico em dutos cilíndricos com raios $R = 0.1$, $R = 0.5$ e $R = 1$. Nela, é possível observar que o aumento do valor de R também implica num aumento do valor das velocidades macroscópicas do fluxo, bem como, no aumento do valor da velocidade no centro do duto quando comparado com as velocidades nas proximidades das paredes.

Na figura 3.4 é apresentado o gráfico da taxa de fluxo do problema *creep* térmico em função do raio R . Nesta, pode-se observar que a taxa de fluxo diminui com o aumento do valor de R .

No capítulo seguinte, as duas abordagens aqui utilizadas na resolução dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em um duto cilíndrico a partir da formulação integral do modelo BGK, também são empregadas na resolução dos mesmos problemas, porém formulados a partir da formulação integral do modelo S.

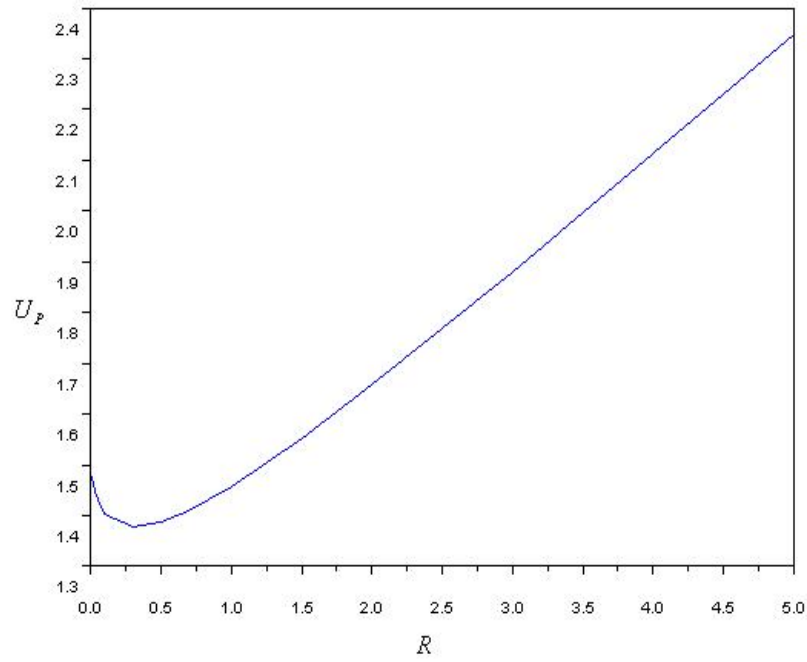


Figura 3.2 – Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille

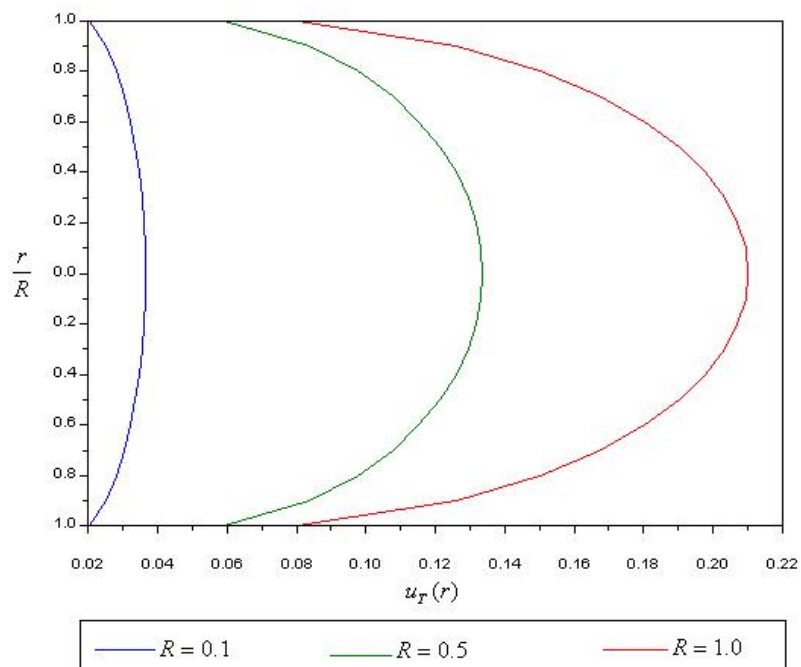


Figura 3.3 – Perfis de Velocidade do *Creep* Térmico

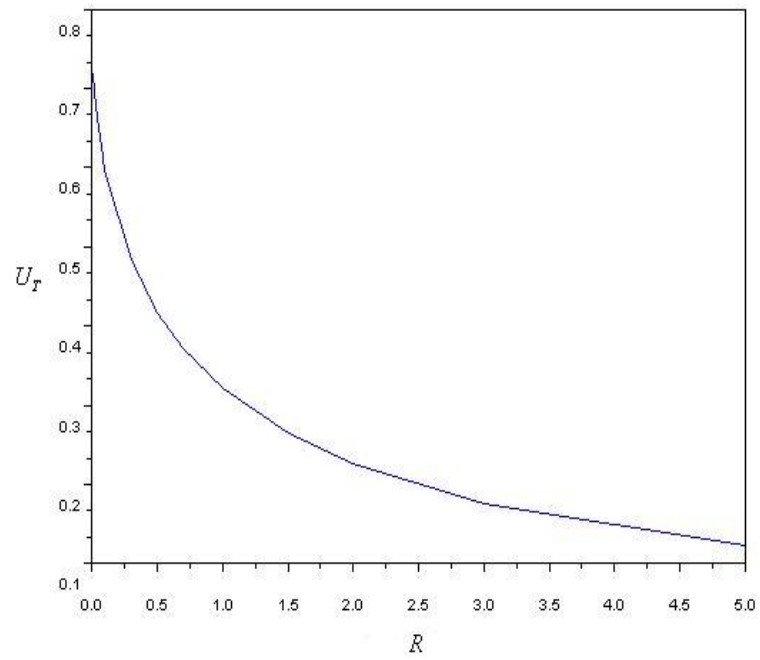


Figura 3.4 – Taxas de Fluxo do Problema *Creep* Térmico

MODELO S: UMA SOLUÇÃO ESPECTRAL

As formulações espectrais propostas anteriormente para a resolução dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos de comprimento infinito mediante a utilização da formulação integral do modelo BGK, agora, serão empregadas na resolução dos mesmos problemas, porém mediante a utilização da formulação integral do modelo S indicada na seção (2.2).

No entanto, convém salientar que a formulação integral do modelo S difere do modelo BGK pelo fato de utilizar uma abordagem vetorial, além de considerar um outro termo não homogêneo e usar outra definição para o núcleo da equação integral.

4.1 Solução Via Expansão em Splines Cúbicas de Hermite

Para a obtenção de soluções de caráter analítico para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos infinitos de raio R , a partir da formulação integral do modelo cinético S, propõe-se a utilização de uma expansão em splines cúbicas de Hermite, da forma

$$\mathbf{Z}(r) = \sum_{\alpha=0}^L \mathbf{v}_{\alpha} \mathfrak{S}_{\alpha} \left(\frac{r}{R} \right), \quad (4.1)$$

sendo \mathbf{v}_{α} os vetores

$$\mathbf{v}_{\alpha} = [a_{\alpha} \ b_{\alpha}]^T \quad (4.2)$$

de componentes constantes a_{α} e b_{α} a serem determinados. Nesta, o valor da constante L é determinado pelo número M de nós, usados para definir os subintervalos do domínio de definição das funções splines, através da expressão $L = 2M + 1$. Isso se deve porque, como já

mencionado no capítulo anterior, as funções splines aqui usadas são definidas a partir destes nós, conforme definido na Ref. [Schultz, 1973].

Substituindo a Eq. (4.1) na Eq. (2.73) é possível escrever

$$\sum_{\alpha=0}^L \left\{ \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha \left(\frac{r}{R} \right) - \int_0^R t \mathbf{K}(t \rightarrow r) \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha \left(\frac{t}{R} \right) dt \right\} = \mathbf{B}(r) + \mathbf{\Gamma}. \quad (4.3)$$

Nessa equação, os termos não homogêneos $\mathbf{\Gamma}$ e $\mathbf{B}(r)$ são definidos, respectivamente, pelas Eqs. (2.79) e (2.80). O primeiro corresponde ao termo fonte e, o segundo, é o termo que depende da condição de contorno do problema, que para o caso específico de superfícies com reflexão perfeitamente difusa (em que se tem $\alpha = 1$) é nulo.

Devido à descontinuidade do núcleo da equação $\mathbf{K}(t \rightarrow r)$, dado pela Eq. (2.74), em $r = t$ (o que se deve à presença do termo $F_0(t/\tau, r/\tau)$, que não está definido para o caso $r = t$, conforme indicado na Eq. (2.14)), optou-se novamente por subdividir o intervalo de integração da variável t da Eq. (4.3). Bem como, também promover as trocas de variáveis

$$x(r) = \frac{r}{R} \quad (4.4)$$

e

$$y(t) = \frac{t}{R}, \quad (4.5)$$

para o caso de superfícies com reflexão perfeitamente difusa, é possível reescrever a Eq. (4.3) na forma

$$\sum_{\alpha=0}^L \left\{ \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(x) - R^2 [\mathbf{U}_\alpha(x) + \mathbf{V}_\alpha(x)] \right\} = \mathbf{\Gamma}, \quad (4.6)$$

com

$$\mathbf{U}_\alpha(x) = \int_0^x y \mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(y) dy \quad (4.7)$$

e

$$\mathbf{V}_\alpha(x) = \int_x^1 y \mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(y) dy. \quad (4.8)$$

Avaliando-se a Eq. (4.6) nos pontos de colocação, já definidos anteriormente por

$$x_i = \left(\frac{i}{L}\right)^2, \quad i = 0, 1, 2, \dots, L, \quad (4.9)$$

obtém-se

$$\sum_{\alpha=0}^L \{\mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(x_i) - R^2 [\mathbf{U}_\alpha(x_i) + \mathbf{V}_\alpha(x_i)]\} = \mathbf{\Gamma}. \quad (4.10)$$

Uma vez avaliadas as integrais da Eq. (4.10), tem-se um sistema linear cuja solução é constituída pelos vetores \mathbf{v}_α usados na expansão proposta para a função incógnita.

4.1.1 Avaliação do Núcleo da Integral

Tal como também ocorre mediante a formulação do modelo BGK, a principal dificuldade quanto à avaliação das integrais que surgem mediante a utilização da formulação do modelo S, refere-se ao núcleo da equação integral.

Na Eq. (4.10), o núcleo $\mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx)$ está presente nos termos $\mathbf{U}_\alpha(x_i)$ e $\mathbf{V}_\alpha(x_i)$, dados pela Eqs. (4.7) e (4.8) e, apesar da divisão do intervalo de integração da variável t (agorrra y), já realizada com o objetivo de contornar a dificuldade imposta por uma descontinuidade, ainda existe outra singularidade nesta expressão, especialmente quando τ tende a zero. Uma proposta, utilizada neste trabalho, para superar tal dificuldade consiste em reescrever o núcleo na forma

$$\mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) = \mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx)\mathbf{\Delta}_0 + \mathcal{K}_2(Ry \rightarrow Rx)\mathbf{\Delta}_2 + \mathcal{K}_4(Ry \rightarrow Rx)\mathbf{\Delta}_4, \quad (4.11)$$

com

$$\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} F_0(Ry/\tau, Rx/\tau) \frac{d\tau}{\tau^2}, \quad (4.12)$$

$$\mathcal{K}_2(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} F_0(Ry/\tau, Rx/\tau) d\tau, \quad (4.13)$$

$$\mathcal{K}_4(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} F_0(Ry/\tau, Rx/\tau) \tau^2 d\tau \quad (4.14)$$

e, Δ_0 , Δ_2 e Δ_4 definidos pelas Eqs. (2.76), (2.77) e (2.78).

As integrais das Eqs. (4.13) e (4.14) podem ser avaliadas com a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, mediante a realização da troca de variável

$$z(\tau) = 2e^{-\tau} - 1, \quad (4.15)$$

sendo que desta forma

$$\mathcal{K}_2(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \sum_{n=0}^{N_\tau} \omega_n h_n(y, x) \quad (4.16)$$

e

$$\mathcal{K}_4(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \sum_{n=0}^{N_\tau} \omega_n h_n(y, x) \sigma_n^2, \quad (4.17)$$

onde N_τ corresponde ao número de pontos de quadratura $\mu_n \in [-1, 1]$ e seus respectivos pesos ω_n usados na avaliação das integrais,

$$h_n(y, x) = C_n F_0(Ry/\sigma_n, Rx/\sigma_n) \quad (4.18)$$

e

$$\sigma_n = -\ln\left(\frac{\mu_n + 1}{2}\right), \quad (4.19)$$

com

$$C_n = \frac{e^{-\sigma_n^2}}{\mu_n + 1} \quad (4.20)$$

e $F_0(Ry/\sigma_n, Rx/\sigma_n)$ avaliado na Eq. (3.16). Aqui a Eq. (4.19) resulta da troca de variável indicada na Eq. (4.15).

Contudo, a integral da Eq. (4.12) necessita de um tratamento diferenciado para poder ser integrada mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, visto que corresponde a mesma expressão do núcleo da equação integral referente ao modelo BGK, indicado pela Eq. (2.13). Portanto sua avaliação pode ser realizada mediante a mesma metodologia empregada no capítulo anterior e apresentada na subseção 3.1.1.1. Desse modo,

o termo $\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx)$ pode ser avaliado pela Eq. (3.17) se $|Ry - Rx| \geq 0.05$ ou, pela Eq. (3.31) se $|Ry - Rx| < 0.05$.

Propõe-se, ainda, reescrever a Eq. (4.11) na forma matricial

$$\mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) = \begin{bmatrix} k_{11}(Ry \rightarrow Rx) & k_{12}(Ry \rightarrow Rx) \\ k_{21}(Ry \rightarrow Rx) & k_{22}(Ry \rightarrow Rx) \end{bmatrix}, \quad (4.21)$$

obtida mediante a substituição dos termos Δ_0 , Δ_2 e Δ_4 , definidos pelas Eqs. (2.76), (2.77) e (2.78), de modo que se tenha

$$k_{11}(Ry \rightarrow Rx) = \frac{3}{10}\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx) - \frac{2}{5}\mathcal{K}_2(Ry \rightarrow Rx) + \frac{2}{15}\mathcal{K}_4(Ry \rightarrow Rx), \quad (4.22)$$

$$k_{12}(Ry \rightarrow Rx) = -(1/30)^{1/2}\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx) + (2/15)^{1/2}\mathcal{K}_2(Ry \rightarrow Rx), \quad (4.23)$$

$$k_{21}(Ry \rightarrow Rx) = k_{12}(Ry \rightarrow Rx) \quad (4.24)$$

e

$$k_{22}(Ry \rightarrow Rx) = \mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx). \quad (4.25)$$

4.1.2 Avaliação dos Termos $\mathbf{U}_\alpha(x_i)$ e $\mathbf{V}_\alpha(x_i)$

Do mesmo modo como realizado no capítulo anterior, para a avaliação dos termos $\mathbf{U}_\alpha(x_i)$ e $\mathbf{V}_\alpha(x_i)$, considera-se apenas o subintervalo de integração $[d_\alpha, e_\alpha]$ para o qual a função spline $\mathfrak{S}_\alpha(y)$ é definida como sendo não nula. Assim sendo, a Eq. (4.7) pode ser expressa por

$$\mathbf{U}_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \leq d_\alpha \quad (4.26a)$$

e

$$\mathbf{U}_\alpha(x_i) = \int_{d_\alpha}^{n_{\alpha,i}} y \mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx_i) \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(y) dy, \quad \text{se } x_i > d_\alpha, \quad (4.26b)$$

com

$$n_{\alpha,i} = \min(x_i, e_\alpha). \quad (4.27)$$

Enquanto que a Eq. (4.8) pode ser expressa por

$$\mathbf{V}_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \geq e_\alpha \quad (4.28a)$$

e

$$\mathbf{V}_\alpha(x_i) = \int_{m_{\alpha,i}}^{e_\alpha} y \mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx_i) \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(y) dy, \quad \text{se } x_i < e_\alpha, \quad (4.28b)$$

com

$$m_{\alpha,i} = \max(x_i, d_\alpha). \quad (4.29)$$

Ainda reescreve-se o vetor $\mathbf{U}_\alpha(x_i)$, definido pelas Eqs. (4.26a) e (4.26b), na forma matricial

$$\mathbf{U}_\alpha(x_i) = \begin{bmatrix} u_1^\alpha(x_i) \\ u_2^\alpha(x_i) \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

onde

$$u_1^\alpha(x_i) = a_\alpha g_{1,1}^\alpha(x_i) + b_\alpha g_{1,2}^\alpha(x_i) \quad (4.31)$$

e

$$u_2^\alpha(x_i) = a_\alpha g_{2,1}^\alpha(x_i) + b_\alpha g_{2,2}^\alpha(x_i), \quad (4.32)$$

com a_α e b_α correspondendo às componentes (constantes) do vetor \mathbf{v}_α indicado na Eq. (4.2) e, os termos $g_{p,q}^\alpha(x_i)$, para $p = \{1, 2\}$ e $q = \{1, 2\}$, definidos em termos das expressões $k_{pq}(Ry \rightarrow Rx_i)$ dadas nas Eqs. (4.22) a (4.25), de modo que

$$g_{p,q}^\alpha(x_i) = 0 \quad (4.33a)$$

se $x_i \leq d_\alpha$ e,

$$g_{p,q}^\alpha(x_i) = \int_{d_\alpha}^{n_{\alpha,i}} y k_{pq}(Ry \rightarrow Rx_i) \mathfrak{S}_\alpha(y) dy \quad (4.33b)$$

se $x_i > d_\alpha$.

Do mesmo modo, o vetor $\mathbf{V}_\alpha(x_i)$, definido pelas Eqs. (4.28a) a (4.28b), é reescrito na forma matricial

$$\mathbf{V}_\alpha(x_i) = \begin{bmatrix} v_1^\alpha(x_i) \\ v_2^\alpha(x_i) \end{bmatrix}, \quad (4.34)$$

onde

$$v_1^\alpha(x_i) = a_\alpha h_{1,1}^\alpha(x_i) + b_\alpha h_{1,2}^\alpha(x_i) \quad (4.35)$$

e

$$v_2^\alpha(x_i) = a_\alpha h_{2,1}^\alpha(x_i) + b_\alpha h_{2,2}^\alpha(x_i), \quad (4.36)$$

com

$$h_{p,q}^\alpha(x_i) = 0 \quad (4.37a)$$

se $x_i \geq e_\alpha$ e,

$$h_{p,q}^\alpha(x_i) = \int_{m_{\alpha,i}}^{e_\alpha} y k_{pq}(Ry \rightarrow Rx_i) \mathfrak{S}_\alpha(y) dy \quad (4.37b)$$

se $x_i < e_\alpha$.

Seguindo a proposta de avaliar as integrais utilizando o esquema de quadratura de Gauss-Legendre usual, com pontos definidos no intervalo $[-1, 1]$, propõe-se efetuar as trocas de variáveis

$$\sigma_{\alpha,i}^a(y) = \frac{2y - d_\alpha - n_{\alpha,i}}{n_{\alpha,i} - d_\alpha} \quad (4.38)$$

e

$$\sigma_{\alpha,i}^b(y) = \frac{2y - m_{\alpha,i} - e_\alpha}{e_\alpha - m_{\alpha,i}}, \quad (4.39)$$

nas expressões $g_{p,q}^\alpha(x_i)$ e $h_{p,q}^\alpha(x_i)$, respectivamente. Desse modo, o termo $g_{p,q}^\alpha(x_i)$ passa a ser avaliado pela expressão

$$g_{p,q}^\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \leq d_\alpha \quad (4.40a)$$

ou

$$g_{p,q}^\alpha(x_i) = c_{\alpha,i}^a \sum_{m=0}^{N_y} \omega_m S_{\alpha,i,m}^a k_{pq}(RS_{\alpha,i,m}^a \rightarrow Rx_i) \mathfrak{S}_\alpha(S_{\alpha,i,m}^a), \quad (4.40b)$$

se $x_i \leq d_\alpha$. Enquanto que o termo $h_{p,q}^\alpha(x_i)$, por

$$h_{p,q}^\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \geq e_\alpha \quad (4.41a)$$

ou

$$h_{p,q}^\alpha(x_i) = c_{\alpha,i}^b \sum_{m=0}^{N_y} \omega_m S_{\alpha,i,m}^b k_{pq}(RS_{\alpha,i,m}^b \rightarrow Rx_i) \mathfrak{S}_\alpha(S_{\alpha,i,m}^b) \quad (4.41b)$$

se $x_i < e_\alpha$.

Nas Eqs. (4.40b) e (4.41b), N_y corresponde ao número de pontos de quadratura $\mu_m \in [-1, 1]$ e de seus respectivos pesos ω_m , usados para a avaliação das integrais,

$$c_{\alpha,i}^a = \frac{(n_{\alpha,i} - d_\alpha)}{2}, \quad (4.42)$$

$$c_{\alpha,i}^b = \frac{(e_\alpha - m_{\alpha,i})}{2}, \quad (4.43)$$

$$S_{\alpha,i,m}^a = \frac{(n_{\alpha,i} - d_\alpha) \mu_m + d_\alpha + n_{\alpha,i}}{2} \quad (4.44)$$

e

$$S_{\alpha,i,m}^b = \frac{(e_\alpha - m_{\alpha,i})\mu_m + d_\alpha + m_{\alpha,i}}{2}. \quad (4.45)$$

4.1.3 Obtenção das quantidades de Interesse Físico

Usando $\mathbf{U}_\alpha(x_i)$ e $\mathbf{V}_\alpha(x_i)$ conforme definidos nas Eqs. (4.30) e (4.34), é possível escrever o sistema algébrico linear dado pela Eq. (4.10) de modo que

$$\sum_{\alpha=0}^L \{a_\alpha [\mathfrak{S}_\alpha(x_i) - R^2 A_{1,1}(x_i)] - b_\alpha R^2 A_{1,2}(x_i)\} = B_1 \quad (4.46a)$$

e

$$\sum_{\alpha=0}^L \{a_\alpha [\mathfrak{S}_\alpha(x_i) - R^2 A_{2,1}(x_i)] - b_\alpha R^2 A_{2,2}(x_i)\} = B_2, \quad (4.46b)$$

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

$$A_{p,q} = g_{p,q}^\alpha(x_i) + h_{p,q}^\alpha(x_i), \quad (4.47)$$

para $p = \{1, 2\}$ e $q = \{1, 2\}$ e sendo $g_{p,q}^\alpha(x_i)$ e $h_{p,q}^\alpha(x_i)$ dados pelas expressões indicadas nas Eqs. (4.40a), (4.40b), (4.41a) e (4.41b). E, os termos B_1 e B_2 dados pelas componentes do termo fonte $\mathbf{\Gamma}$, de modo que

$$B_1 = -\frac{\pi^{1/2}}{2} \left(\frac{15}{2}\right)^{1/2} k_2 \quad (4.48)$$

e

$$B_2 = -\frac{\pi^{1/2}}{2} k_1. \quad (4.49)$$

O sistema linear determinado pelas Eqs. (4.46a) e (4.46b), é de ordem $2L + 2 = 4M + 4$ e sua solução é composta pelas constantes a_α e b_α presentes na expansão proposta para $\mathbf{Z}(r)$ na Eq. (4.1). Diante disso, torna-se possível também, determinar as quantidades de interesse físico, como o perfil de velocidade

$$u(r) = \pi^{-1/2} [0 \ 1] \mathbf{G}(r) \quad (4.50)$$

e o perfil do fluxo de calor

$$q(r) = [15/(2\pi)]^{1/2}[1 \ 0]\mathbf{G}(r), \quad (4.51)$$

lembrando que

$$\mathbf{G}(r) = \mathbf{Z}(r) - \mathbf{\Gamma}, \quad (4.52)$$

sendo que $\mathbf{\Gamma}$ é definido pela Eq. (2.79). Bem como, a taxa de fluxo do gás

$$U = \frac{2}{R^2} \sum_{h=1}^{N_r} \omega_h r_h^* u(r_h^*) \quad (4.53)$$

e a taxa de fluxo de calor

$$Q = \frac{2}{R^2} \sum_{h=1}^{N_r} \omega_h r_h^* q(r_h^*). \quad (4.54)$$

Aqui, as expressões que representam tais taxas são obtidas a partir da troca de variável, já utilizada no capítulo anterior,

$$\eta(r) = \frac{2r}{R} - 1, \quad (4.55)$$

nas Eqs. (2.89) e (2.90). Assim sendo, N_r indica o número de pontos de quadratura μ_h e de seus respectivos peso ω_h , e

$$r_h^* = (\mu_h + 1) \frac{R}{2}. \quad (4.56)$$

4.1.4 Resultados Numéricos

Para a obtenção de resultados numéricos, novamente fez-se uma implementação em FORTRAN. Os parâmetros de entrada utilizados na implementação da formulação apresentada nesse capítulo são a magnitude do raio R do duto cilíndrico, as constantes N_τ , N_y e N_r , que representam os números de pontos de quadratura usados nas avaliações das integrais nas respectivas variáveis, bem como a constante M que determina o número de nós utilizados na definição das splines cúbicas de Hermite e o valor da constante L que define a ordem $2L + 2 = 4M + 4$ do sistema linear definido pelas Eqs. (4.46a) e (4.46b).

Após a avaliação das integrais envolvidas, mediante a utilização do esquema de pontos de quadratura de Gauss-Legendre, o sistema linear é resolvido usando-se as subrotinas DGEFA e DGESL do pacote LINPACK [Dongarra et al., 1979]. A solução desse sistema consiste nos vetores \mathbf{v}_α que constituem a expansão proposta para o termo $\mathbf{Z}(r)$ na Eq. (4.1). Consequentemente, sua obtenção possibilita a avaliação das quantidades de interesse físico mediante a utilização das Eqs. (4.50) a (4.54).

Desse modo, usando-se como parâmetros de entrada as constantes $M = 300$, $N_\tau = 60$, $N_y = 80$ e $N_r = 50$, obtém-se os resultados apresentados nas tabelas a seguir em um tempo computacional de aproximadamente 210 minutos. Salienta-se, que os resultados assim obtidos concordam em seis dígitos com os resultados apresentados por Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2002], obtidos mediante a utilização da transformação proposta por Mitsis e a posterior aplicação do método ADO. Entretanto, usando parâmetros de entrada menores, como por exemplo $M = 10$, $N_\tau = 30$, $N_y = 30$ e $N_r = 30$, já é possível obter resultados com três a quatro dígitos corretos em um tempo computacional inferior a quatro segundos, especialmente nos casos em que os dutos cilíndricos possuem valores de R pequenos.

Tabela 4.1 – Velocidades e Fluxos de Calor em um Duto de $R = 1$

r/R	$-u_p(r)$	$q_p(r)$	$u_T(r)$	$-q_T(r)$
0.00	9.85725(-1)	2.73671(-1)	2.64663(-1)	1.04388(0)
0.05	9.84648(-1)	2.73381(-1)	2.64404(-1)	1.04312(0)
0.10	9.81416(-1)	2.72509(-1)	2.63627(-1)	1.04084(0)
0.15	9.76014(-1)	2.71049(-1)	2.62325(-1)	1.03701(0)
0.20	9.68422(-1)	2.68987(-1)	2.60489(-1)	1.03160(0)
0.25	9.58609(-1)	2.66308(-1)	2.58103(-1)	1.02456(0)
0.30	9.46533(-1)	2.62988(-1)	2.55148(-1)	1.01581(0)
0.35	9.32139(-1)	2.58999(-1)	2.51600(-1)	1.00525(0)
0.40	9.15359(-1)	2.54301(-1)	2.47425(-1)	9.92763(-1)
0.45	8.96106(-1)	2.48849(-1)	2.42585(-1)	9.78205(-1)
0.50	8.74269(-1)	2.42582(-1)	2.37028(-1)	9.61381(-1)
0.55	8.49707(-1)	2.35426(-1)	2.30690(-1)	9.42050(-1)
0.60	8.22242(-1)	2.27283(-1)	2.23491(-1)	9.19905(-1)
0.65	7.91638(-1)	2.18030(-1)	2.15326(-1)	8.94546(-1)
0.70	7.57578(-1)	2.07498(-1)	2.06054(-1)	8.65440(-1)
0.75	7.19622(-1)	1.95456(-1)	1.95483(-1)	8.31853(-1)
0.80	6.77128(-1)	1.81567(-1)	1.83333(-1)	7.92722(-1)
0.85	6.29081(-1)	1.65304(-1)	1.69168(-1)	7.46392(-1)
0.90	5.73681(-1)	1.45731(-1)	1.52223(-1)	6.89979(-1)
0.95	5.06946(-1)	1.20787(-1)	1.30821(-1)	6.17220(-1)
1.00	4.08449(-1)	7.98670(-2)	9.64522(-2)	4.97276(-1)

Tabela 4.2 – Velocidades e Fluxos de Calor em um Duto de $R = 0,5$

r/R	$-u_p(r)$	$q_p(r)$	$u_T(r)$	$-q_T(r)$
0.00	4.46969(-1)	1.57382(-1)	1.55160(-1)	6.60251(-1)
0.05	4.46557(-1)	1.57231(-1)	1.55017(-1)	6.59758(-1)
0.10	4.45319(-1)	1.56776(-1)	1.54587(-1)	6.58275(-1)
0.15	4.43250(-1)	1.56015(-1)	1.53867(-1)	6.55791(-1)
0.20	4.40340(-1)	1.54943(-1)	1.52852(-1)	6.52287(-1)
0.25	4.36574(-1)	1.53551(-1)	1.51536(-1)	6.47735(-1)
0.30	4.31934(-1)	1.51831(-1)	1.49908(-1)	6.42098(-1)
0.35	4.26394(-1)	1.49769(-1)	1.47958(-1)	6.35329(-1)
0.40	4.19923(-1)	1.47348(-1)	1.45670(-1)	6.27365(-1)
0.45	4.12482(-1)	1.44548(-1)	1.43025(-1)	6.18132(-1)
0.50	4.04020(-1)	1.41342(-1)	1.39999(-1)	6.07532(-1)
0.55	3.94475(-1)	1.37699(-1)	1.36561(-1)	5.95445(-1)
0.60	3.83766(-1)	1.33576(-1)	1.32674(-1)	5.81717(-1)
0.65	3.71788(-1)	1.28918(-1)	1.28286(-1)	5.66148(-1)
0.70	3.58401(-1)	1.23653(-1)	1.23332(-1)	5.48473(-1)
0.75	3.43412(-1)	1.17681(-1)	1.17720(-1)	5.28327(-1)
0.80	3.26541(-1)	1.10857(-1)	1.11317(-1)	5.05187(-1)
0.85	3.07351(-1)	1.02953(-1)	1.03916(-1)	4.78238(-1)
0.90	2.85076(-1)	9.35736(-2)	9.51566(-2)	4.46069(-1)
0.95	2.58045(-1)	8.18520(-2)	8.42528(-2)	4.05632(-1)
1.00	2.17931(-1)	6.34539(-2)	6.72906(-2)	3.42058(-1)

Tabela 4.3 – Velocidades e Fluxos de Calor em um Duto de $R = 0, 1$

r/R	$-u_p(r)$	$q_p(r)$	$u_T(r)$	$-q_T(r)$
0.00	8.51991(-2)	3.80868(-2)	3.80318(-2)	1.73296(-1)
0.05	8.51377(-2)	3.80579(-2)	3.80031(-2)	1.73176(-1)
0.10	8.49532(-2)	3.79709(-2)	3.79167(-2)	1.72816(-1)
0.15	8.46447(-2)	3.78253(-2)	3.77722(-2)	1.72214(-1)
0.20	8.42103(-2)	3.76203(-2)	3.75686(-2)	1.71365(-1)
0.25	8.36476(-2)	3.73546(-2)	3.73049(-2)	1.70264(-1)
0.30	8.29533(-2)	3.70265(-2)	3.69792(-2)	1.68905(-1)
0.35	8.21231(-2)	3.66338(-2)	3.65894(-2)	1.67277(-1)
0.40	8.11514(-2)	3.61737(-2)	3.61328(-2)	1.65370(-1)
0.45	8.00314(-2)	3.56429(-2)	3.56059(-2)	1.63168(-1)
0.50	7.87546(-2)	3.50368(-2)	3.50044(-2)	1.60652(-1)
0.55	7.73101(-2)	3.43501(-2)	3.43229(-2)	1.57800(-1)
0.60	7.56841(-2)	3.35757(-2)	3.35545(-2)	1.54581(-1)
0.65	7.38587(-2)	3.27046(-2)	3.26901(-2)	1.50957(-1)
0.70	7.18103(-2)	3.17248(-2)	3.17180(-2)	1.46878(-1)
0.75	6.95065(-2)	3.06198(-2)	3.06218(-2)	1.42273(-1)
0.80	6.69005(-2)	2.93659(-2)	2.93781(-2)	1.37042(-1)
0.85	6.39202(-2)	2.79265(-2)	2.79507(-2)	1.31030(-1)
0.90	6.04404(-2)	2.62379(-2)	2.62765(-2)	1.23970(-1)
0.95	5.61917(-2)	2.41632(-2)	2.42202(-2)	1.15286(-1)
1.00	4.98666(-2)	2.10364(-2)	2.11236(-2)	1.02200(-1)

Tabela 4.4 – Taxas de Fluxo

R	$-U_p$	Q_p	U_T	$-Q_T$
0.1	1.40902(0)	6.20876(-1)	6.20876(-1)	2.88006(0)
0.5	1.40054(0)	4.78435(-1)	4.78435(-1)	2.13603(0)
1.0	1.47644(0)	3.96750(-1)	3.96750(-1)	1.67455(0)

4.2 Solução via Expansão em Polinômios de Legendre

Também visando obter soluções de caráter analítico a partir da formulação integral do modelo cinético S, mediante a utilização de um método espectral, propõe-se agora, o uso de uma expansão em termos de Polinômios de Legendre para representar a função incógnita da equação integral correspondente, na forma

$$\mathbf{Z}(r) = \sum_{\alpha=0}^L \mathbf{v}_{\alpha} P_{\alpha} \left(\frac{2r}{R} - 1 \right), \quad (4.57)$$

sendo \mathbf{v}_{α} os vetores

$$\mathbf{v}_{\alpha} = [a_{\alpha} \ b_{\alpha}]^T \quad (4.58)$$

de componentes constantes a_{α} e b_{α} a serem determinadas.

Substituindo a Eq. (4.57) na Eq. (2.73) e considerando uma condição de contorno de superfície refletora totalmente difusa ($\alpha = 1$) é possível escrever

$$\sum_{\alpha=0}^L \left\{ \mathbf{v}_{\alpha} P_{\alpha} \left(\frac{2r}{R} - 1 \right) - \int_0^R t \mathbf{K}(t \rightarrow r) \mathbf{v}_{\alpha} P_{\alpha} \left(\frac{2r}{R} - 1 \right) dt \right\} = \mathbf{\Gamma}, \quad (4.59)$$

visto que para esse caso, tem-se o termo não homogêneo $\mathbf{B}(r)$, igual a zero.

Dividindo o intervalo de integração da variável t , efetuando a multiplicação da Eq. (4.59) por

$$\phi_{\beta}(r) = r P_{\beta} \left(\frac{2r}{R} - 1 \right) \quad (4.60)$$

para $\beta = 0, 1, \dots, L$ e integrando-a em r , tem-se

$$\sum_{\alpha=0}^L \{ \mathbf{A}_{\beta,\alpha} - [\mathbf{B}_{\beta,\alpha} + \mathbf{C}_{\beta,\alpha}] \} = \mathbf{D}_{\beta}, \quad (4.61)$$

onde

$$\mathbf{A}_{\beta,\alpha} = \int_0^R \mathbf{v}_{\alpha} \phi_{\beta}(r) \phi_{\alpha}(r) dr/r, \quad (4.62)$$

$$\mathbf{B}_{\beta,\alpha} = \int_0^R \int_0^r \mathbf{K}(t \rightarrow r) \mathbf{v}_\alpha \phi_\beta(r) \phi_\alpha(t) dt dr, \quad (4.63)$$

$$\mathbf{C}_{\beta,\alpha} = \int_0^R \int_r^R \mathbf{K}(t \rightarrow r) \mathbf{v}_\alpha \phi_\beta(r) \phi_\alpha(t) dt dr \quad (4.64)$$

e

$$\mathbf{D}_\beta = \mathbf{\Gamma} \int_0^R \phi_\beta(r) dr. \quad (4.65)$$

Promovendo as trocas de variáveis indicadas nas Eqs. (4.55), (3.61) e (3.62) e, utilizando o esquema de pontos de quadratura de Gauss-Legendre com os pontos $\mu_k \in [-1, 1]$ e seus respectivos pesos ω_k , é possível reescrever as Eqs. (4.62) a (4.65) na forma matricial

$$\mathbf{A}_{\beta,\alpha} = \mathbf{T}_{\beta,\alpha} \mathbf{v}_\alpha, \quad (4.66)$$

$$\mathbf{B}_{\beta,\alpha} = \mathbf{X}^{\beta,\alpha} \mathbf{v}_\alpha, \quad (4.67)$$

$$\mathbf{C}_{\beta,\alpha} = \mathbf{Y}^{\beta,\alpha} \mathbf{v}_\alpha \quad (4.68)$$

e

$$\mathbf{D}_\beta = \mathbf{W}_\beta \mathbf{\Gamma}, \quad (4.69)$$

com

$$\mathbf{T}_{\beta,\alpha} = \frac{R}{2} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n P_\beta(\mu_n) P_\alpha(\mu_n) \quad (4.70)$$

e

$$\mathbf{W}_\beta = \frac{R}{2} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n P_\beta(\mu_n). \quad (4.71)$$

Enquanto que os elementos das matrizes $\mathbf{X}^{\beta,\alpha}$ e $\mathbf{Y}^{\beta,\alpha}$, presentes nas Eqs. (4.67) e (4.68), são

definidos, para cada par (β, α) , de modo que

$$X_{i,j}^{\beta,\alpha} = \frac{R}{4} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n^2 P_\beta(\mu_n) \sum_{m=1}^{N_t} \omega_m g_{m,n} k_{i,j}(g_{m,n} \rightarrow f_n) P_\alpha(\gamma_{m,n}) \quad (4.72)$$

e

$$Y_{i,j}^{\beta,\alpha} = \frac{R}{4} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n (R - f_n) P_\beta(\mu_n) \sum_{m=1}^{N_t} \omega_m h_{m,n} k_{i,j}(h_{m,n} \rightarrow f_n) P_\alpha(\gamma_{m,n}^*) \quad (4.73)$$

para $i = 1, 2$ e $j = 1, 2$.

Nas Eqs. (4.72) e (4.73), as constantes N_r e N_t indicam o número de pontos e pesos da quadratura de Gauss-Legendre usados na avaliação das integrais nas variáveis r e t , respectivamente; os termos $k_{i,j}(g_{m,n} \rightarrow f_n)$ e $k_{i,j}(h_{m,n} \rightarrow f_n)$ são avaliados pelas Eqs. (4.22) a (4.25); enquanto que os demais termos envolvidos nesta formulação são definidos de modo que

$$f_n = \frac{\mu_n + 1}{2} R, \quad (4.74)$$

$$g_{m,n} = \frac{\mu_m + 1}{2} f_n, \quad (4.75)$$

$$h_{m,n} = \frac{(R - f_n)\mu_m + f_n + R}{2}, \quad (4.76)$$

$$\gamma_m = \frac{(\mu_m + 1)f_n - R}{R} \quad (4.77)$$

e

$$\gamma_{m,n}^* = \frac{(R - f_n)\mu_m + f_n}{R}. \quad (4.78)$$

Assim sendo, a Eq. (4.61) constitui o sistema algébrico linear

$$\sum_{\alpha=0}^L \left\{ a_\alpha \left[T_{\beta,\alpha} - X_{1,1}^{\beta,\alpha} - Y_{1,1}^{\beta,\alpha} \right] - b_\alpha \left[X_{1,2}^{\beta,\alpha} + Y_{1,2}^{\beta,\alpha} \right] \right\} = C_1 \quad (4.79a)$$

e

$$\sum_{\alpha=0}^L \left\{ -a_{\alpha} \left[X_{2,1}^{\beta,\alpha} + Y_{2,1}^{\beta,\alpha} \right] + b_{\alpha} \left[T_{\beta,\alpha} - X_{2,2}^{\beta,\alpha} - Y_{2,2}^{\beta,\alpha} \right] \right\} = C_2, \quad (4.79b)$$

com

$$C_1 = - \left(\frac{15\pi}{8} \right)^{1/2} W_{\beta} k_2 \quad (4.80)$$

e

$$C_2 = - \left(\frac{\pi^{1/2}}{2} \right) W_{\beta} k_1, \quad (4.81)$$

para $\beta = 0, 1, \dots, L$.

O sistema linear dado pela Eqs. (4.79a) e (4.79b) é simétrico e de ordem $2L + 2$ e, sua solução é composta pelas constantes a_{α} e b_{α} usadas na expansão proposta para $\mathbf{Z}(r)$ na Eq. (4.57).

4.2.1 Resultados Numéricos

Conforme já realizado nos demais casos, neste também realizou-se uma implementação em FORTRAN. Em tal implementação usou-se como parâmetros de entrada a magnitude do raio R do duto cilíndrico e as constantes N_r , N_t e N_z , que representam os números de pontos de quadratura usados nas avaliações das integrais nas respectivas variáveis. Outro parâmetro de entrada foi a constante L que determina a ordem $2L + 2$ do sistema linear definido pelas Eqs. (4.79a) e (4.79b).

Após a avaliação das integrais envolvidas, mediante a utilização do esquema de pontos de quadratura de Gauss-Legendre e a posterior resolução do sistema linear através da utilização das subrotinas DGEFA e DGESL do pacote LINPACK [Dongarra et al., 1979], determinou-se as quantidades de interesse físico dos problemas considerados, tais como o perfil de velocidade, o perfil do fluxo de calor, a taxa de fluxo do gás e a taxa de fluxo de calor, utilizando as Eqs. (4.50), (4.51), (4.53) e (4.54), respectivamente.

Desse modo, usando-se como parâmetros de entrada as constantes $L = 60$, $N_r = 180$, $N_t = 160$ e $N_z = 50$, obtém-se os resultados apresentados nas tabelas a seguir em um tempo computacional de aproximadamente 380 minutos. Os resultados assim obtidos concordam em

quatro a cinco dígitos com os respectivos resultados apresentados por Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2002] e obtidos mediante a utilização da transformação proposta por Mitsis e a posterior aplicação do método ADO. Entretanto, usando parâmetros de entrada menores, como por exemplo $L = 20$, $N_r = 60$, $N_t = 50$ e $N_z = 30$, já é possível obter resultados com dois dígitos corretos em um tempo computacional de aproximadamente três minutos, especialmente para os dutos com valores de R pequenos.

Tabela 4.5 – Perfis de Velocidade e de Fluxo de Calor em um Duto de $R = 1$

r/R	$-u_p(r)$	$q_p(r)$	$u_T(r)$	$-q_T(r)$
0.00	9.857(-1)	2.737(-1)	2.647(-1)	1.044(0)
0.05	9.846(-1)	2.734(-1)	2.644(-1)	1.043(0)
0.10	9.814(-1)	2.725(-1)	2.636(-1)	1.041(0)
0.15	9.760(-1)	2.710(-1)	2.623(-1)	1.037(0)
0.20	9.684(-1)	2.690(-1)	2.605(-1)	1.032(0)
0.25	9.586(-1)	2.663(-1)	2.581(-1)	1.025(0)
0.30	9.465(-1)	2.630(-1)	2.551(-1)	1.016(0)
0.35	9.321(-1)	2.590(-1)	2.516(-1)	1.005(0)
0.40	9.154(-1)	2.543(-1)	2.474(-1)	9.782(-1)
0.45	8.961(-1)	2.488(-1)	2.426(-1)	9.614(-1)
0.50	8.743(-1)	2.426(-1)	2.370(-1)	9.421(-1)
0.55	8.497(-1)	2.354(-1)	2.307(-1)	9.199(-1)
0.60	8.222(-1)	2.273(-1)	2.235(-1)	8.945(-1)
0.65	7.916(-1)	2.180(-1)	2.153(-1)	8.654(-1)
0.70	7.576(-1)	2.075(-1)	2.061(-1)	8.319(-1)
0.75	7.196(-1)	1.955(-1)	1.955(-1)	7.927(-1)
0.80	6.771(-1)	1.816(-1)	1.833(-1)	7.464(-1)
0.85	6.291(-1)	1.653(-1)	1.692(-1)	6.900(-1)
0.90	5.737(-1)	1.457(-1)	1.522(-1)	6.172(-1)
0.95	5.069(-1)	1.208(-1)	1.308(-1)	9.928(-1)
1.00	4.084(-1)	7.987(-2)	9.645(-2)	4.973(-1)

Tabela 4.6 – Perfis de Velocidade e de Fluxo de Calor em um Duto de $R = 0,5$

r/R	$-u_p(r)$	$q_p(r)$	$u_T(r)$	$-q_T(r)$
0.00	4.470(-1)	1.574(-1)	1.552(-1)	6.603(-1)
0.05	4.466(-1)	1.572(-1)	1.550(-1)	6.598(-1)
0.10	4.453(-1)	1.568(-1)	1.546(-1)	6.583(-1)
0.15	4.433(-1)	1.560(-1)	1.539(-1)	6.558(-1)
0.20	4.403(-1)	1.549(-1)	1.529(-1)	6.523(-1)
0.25	4.366(-1)	1.536(-1)	1.515(-1)	6.477(-1)
0.30	4.319(-1)	1.518(-1)	1.499(-1)	6.421(-1)
0.35	4.264(-1)	1.498(-1)	1.480(-1)	6.353(-1)
0.40	4.199(-1)	1.473(-1)	1.457(-1)	6.274(-1)
0.45	4.125(-1)	1.445(-1)	1.430(-1)	6.181(-1)
0.50	4.040(-1)	1.413(-1)	1.400(-1)	6.075(-1)
0.55	3.945(-1)	1.377(-1)	1.366(-1)	5.954(-1)
0.60	3.838(-1)	1.336(-1)	1.327(-1)	5.817(-1)
0.65	3.718(-1)	1.289(-1)	1.283(-1)	5.661(-1)
0.70	3.584(-1)	1.237(-1)	1.233(-1)	5.485(-1)
0.75	3.434(-1)	1.177(-1)	1.177(-1)	5.283(-1)
0.80	3.265(-1)	1.109(-1)	1.113(-1)	5.052(-1)
0.85	3.074(-1)	1.030(-1)	1.039(-1)	4.782(-1)
0.90	2.851(-1)	9.357(-2)	9.516(-2)	4.461(-1)
0.95	2.580(-1)	8.185(-2)	8.425(-2)	4.056(-1)
1.00	2.179(-1)	6.345(-2)	6.729(-2)	3.421(-1)

Tabela 4.7 – Perfis de Velocidade e de Fluxo de Calor em um Duto de $R = 0, 1$

r/R	$-u_p(r)$	$q_p(r)$	$u_T(r)$	$-q_T(r)$
0.00	8.520(-2)	3.809(-2)	3.803(-2)	1.733(-1)
0.05	8.514(-2)	3.806(-2)	3.800(-2)	1.731(-1)
0.10	8.495(-2)	3.797(-2)	3.792(-2)	1.728(-1)
0.15	8.464(-2)	3.783(-2)	3.777(-2)	1.722(-1)
0.20	8.421(-2)	3.762(-2)	3.757(-2)	1.714(-1)
0.25	8.365(-2)	3.735(-2)	3.730(-2)	1.703(-1)
0.30	8.295(-2)	3.703(-2)	3.698(-2)	1.689(-1)
0.35	8.212(-2)	3.663(-2)	3.659(-2)	1.673(-1)
0.40	8.115(-2)	3.617(-2)	3.613(-2)	1.654(-1)
0.45	8.003(-2)	3.564(-2)	3.561(-2)	1.632(-1)
0.50	7.875(-2)	3.504(-2)	3.500(-2)	1.607(-1)
0.55	7.731(-2)	3.435(-2)	3.432(-2)	1.578(-1)
0.60	7.568(-2)	3.358(-2)	3.355(-2)	1.546(-1)
0.65	7.386(-2)	3.270(-2)	3.269(-2)	1.510(-1)
0.70	7.181(-2)	3.172(-2)	3.172(-2)	1.469(-1)
0.75	6.951(-2)	3.062(-2)	3.062(-2)	1.423(-1)
0.80	6.690(-2)	2.937(-2)	2.938(-2)	1.370(-1)
0.85	6.392(-2)	2.793(-2)	2.795(-2)	1.310(-1)
0.90	6.044(-2)	2.624(-2)	2.628(-2)	1.240(-1)
0.95	5.619(-2)	2.416(-2)	2.422(-2)	1.153(-1)
1.00	4.987(-2)	2.104(-2)	2.112(-2)	1.022(-1)

Tabela 4.8 – Taxas de Fluxo

R	$-U_p$	Q_p	U_T	$-Q_T$
0.1	1.409(0)	6.209(-1)	6.209(-1)	2.880(0)
0.5	1.401(0)	4.784(-1)	4.784(-1)	2.136(0)
1.0	1.476(0)	3.968(-1)	3.968(-1)	1.675(0)

4.3 Considerações Finais

Do mesmo modo que ocorreu no capítulo anterior, a utilização da expansão em termos de polinômios de Legendre, quando comparada com a expansão em termos de splines cúbicas de Hermite, acarreta em um tempo computacional maior, apesar do sistema assim definido ser simétrico.

Comparando os tempos computacionais requeridos para a obtenção de resultados do modelo BGK e do modelo S, o segundo modelo requer tempos computacionais maiores, fato este que é justificado pela abordagem vetorial utilizada no modelo S que faz com que o sistema algébrico obtido tenha o dobro da dimensão, quando comparado com o sistema algébrico relacionado ao modelo BGK.

Enquanto que, comparando os resultados obtidos para as velocidades macroscópicas e a taxa de fluxo dos dois modelos estudados, percebe-se que no caso do fluxo de Poiseuille há uma concordância de 1 a 2 dígitos, enquanto que para o problema *creep* térmico a concordância, de um modo geral, é de no máximo 1 dígito. O fato de haver uma concordância melhor entre os resultados do problema de Poiseuille, quando comparados os respectivos resultados obtidos mediante a utilização dos modelos BGK e S, justifica-se pelo fato de que neste problema o fluxo do gás se deve exclusivamente à existência de um gradiente de pressão, problema no qual o modelo BGK pode ser empregado satisfatoriamente, apesar de não resultar no valor correto para o número de Prandtl (conforme mencionado no Apêndice A para o caso de canais planos). No caso do problema *creep* térmico, por sua vez, o fluxo de calor e a dinâmica de transporte são igualmente importantes, logo, neste caso o modelo BGK não fornecerá resultados tão precisos quanto o modelo S, visto que ele pode ser ajustado para determinar a viscosidade cinemática ou a difusividade térmica correta, mas não ambas.

Cabe ressaltar também, que a avaliação do núcleo da equação integral do modelo S mediante a estratégia indicada na Eq. (4.11), que consiste em reescrevê-lo de modo que se possa avaliá-lo, por quadratura, decomposto em três expressões escalares, mostrou-se bastante eficiente, visto que, apesar da dificuldade imposta pela singularidade no termo original, duas destas expressões puderam ser avaliadas, diretamente, mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, enquanto a outra, por ser idêntica ao núcleo do modelo BGK, pode ser avaliada utilizando-se a mesma estratégia usada anteriormente na avaliação do núcleo do referido modelo (que consiste em somar e subtrair outra integral).

Salienta-se ainda, que os resultados das tabelas, para o caso de um duto com superfície refletora perfeitamente difusa, concordam com os resultados apresentados por Siewert e Valougeorgis [Siewert e Valougeorgis, 2002]. Entretanto, acredita-se que a metodologia aqui utilizada também possa ser empregada nos casos em que a superfície não possua reflexão perfeitamente difusa, onde a transformação de Mitsis empregada na Ref. [Siewert e Valougeorgis, 2002] não se aplica. Neste sentido, no próximo capítulo traz-se uma tentativa preliminar para obter soluções de forma fechada, mediante a utilização da mesma metodologia aqui empregada, para o caso do fluxo de um gás rarefeito em um duto cilíndrico que inclui uma condição de contorno de superfície refletora.

DUTOS CILÍNDRICOS: O CASO DE REFLEXÃO ESPECULAR

Neste capítulo, traz-se uma tentativa preliminar no sentido da busca por soluções de forma fechada para fluxos de gases rarefeitos em dutos cilíndricos com superfícies refletoras, modelados a partir da equação integral do modelo BGK.

Salienta-se, que a inclusão da condição de superfície refletora inviabiliza a obtenção de resultados analíticos mediante a utilização da transformação proposta por Mitsis, que é utilizada nas Refs. [Siewert, 2000; Siewert e Valougeorgis, 2002].

5.1 Formulação do Problema

Segundo Barichello et al. [Barichello et al., 2002], a formulação integral do modelo BGK para os problemas da DGR em dutos cilíndricos retos de raio R e comprimento infinito, mediante a inclusão de uma condição de contorno de superfície refletora

$$F(\xi, \mu) = (1 - \alpha)G(R, \xi, \mu), \quad \mu \in [0, 1], \quad (5.1)$$

faz com que a Eq. (2.12) deva ser modificada, uma vez que o termo $B(r)$, indicado na Eq. (2.15), não pode ser considerado conhecido. Ainda segundo Barichello et al. [Barichello et al., 2002], neste caso, a Eq. (2.12) pode ser escrita na forma da equação integral

$$G(r) = C(r) + C_S(r) + \int_0^R tG(t) [\mathcal{K}(t \rightarrow r) + \mathcal{K}_S(t \rightarrow r)] dt, \quad (5.2)$$

onde os termos de índice S , que não constam na Eq. (2.12), correspondem aos termos que traduzem os efeitos da condição de superfície refletora indicada na Eq. (5.1) e, são expressos

por

$$\mathcal{K}_S(t \rightarrow r) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \exp\{-\xi^2 - p(t, r, \mu)/\xi\} \frac{T(t, r, \mu, \xi)}{p(t, r, \mu)(1 - \mu^2)^{1/2}} d\mu d\xi \quad (5.3)$$

e

$$C_S(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^R \int_0^\infty \int_{-1}^1 tQ(\xi) \frac{\exp\{-\xi^2 - p(t, r, \mu)/\xi\}}{p(t, r, \mu)(1 - \mu^2)^{1/2}} T(t, r, \mu, \xi) d\mu d\xi dt. \quad (5.4)$$

Enquanto que os termos $\mathcal{K}(t \rightarrow r)$ e $C(r)$, correspondem às expressões indicadas nas Eqs. (2.13) e (2.16), respectivamente.

Nas Eqs. (5.3) e (5.4), tem-se

$$T(t, r, \mu, \xi) = \frac{2(1 - \alpha)\exp\{-2R\mu_0[R, r, \beta(t, r, \mu)]/\xi\}}{1 - (1 - \alpha)\exp\{-2R\mu_0[R, r, \beta(t, r, \mu)]/\xi\}}, \quad (5.5)$$

onde

$$\beta(t, r, \mu) = \frac{r - \mu t}{p(t, r, \mu)}, \quad (5.6)$$

$$\mu_0(t, r, \mu) = \frac{1}{t} (t^2 - r^2 + r^2\mu^2)^{1/2} \quad (5.7)$$

e

$$p(t, r, \mu) = (t^2 + r^2 - 2tr\mu)^{1/2}. \quad (5.8)$$

Nessa formulação, tem-se ainda, nos termos $C(r)$ e $C_S(r)$, a presença do termo fonte $Q(\xi)$, que para os problemas aqui tratados, segundo [Williams, 1971], pode ser expresso por

$$Q(\xi) = \frac{1}{2}[k_1 - k_2(\xi^2 - 1)], \quad (5.9)$$

sendo que conforme já mencionado no capítulo 2, k_1 e k_2 são constantes que, para o problema de Poiseuille assumem os valores $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$, enquanto que para o problema *creep* térmico correspondem aos valores $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$.

5.2 Resolução Mediante a Utilização da Expansão em Splines Cúbicas

A fim de estender a formulação usada nos capítulos anteriores, propõe-se a utilização da expansão

$$G(r) = \sum_{\alpha=0}^L a_{\alpha} \mathfrak{S}_{\alpha} \left(\frac{r}{R} \right), \quad (5.10)$$

para representar a função incógnita $G(r)$ da equação integral indicada na Eq. (5.2). Nela, os termos a_{α} representam os coeficientes constantes que devem ser determinados e $\mathfrak{S}_{\alpha}(x)$ indica a função spline de ordem α definida a partir de $M + 1$ nós, de modo que se tenha $L = 2M + 1$.

Assim sendo, substituindo a Eq. (5.10) na Eq. (5.2), obtém-se

$$\sum_{\alpha=0}^L a_{\alpha} \left[\mathfrak{S}_{\alpha} \left(\frac{r}{R} \right) - \int_0^{\infty} t \mathfrak{S}_{\alpha} \left(\frac{t}{R} \right) [\mathcal{K}(t \rightarrow r) + \mathcal{K}_S(t \rightarrow r)] dt \right] = C(r) + C_S(r). \quad (5.11)$$

E, promovendo as trocas de variáveis

$$x = \frac{r}{R} \quad (5.12)$$

e

$$y = \frac{t}{R}, \quad (5.13)$$

é possível reescrever a Eq. (5.11) na forma

$$\sum_{\alpha=0}^L a_{\alpha} \{ \mathfrak{S}_{\alpha}(x) - R^2 [U_{\alpha}(x) + V_{\alpha}(x)] \} = C(Rx) + C_S(Rx), \quad (5.14)$$

onde

$$U_{\alpha}(x) = \int_0^x y \mathfrak{S}_{\alpha}(y) [\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) + \mathcal{K}_S(Ry \rightarrow Rx)] dy \quad (5.15)$$

e

$$V_{\alpha}(x) = \int_x^{\infty} y \mathfrak{S}_{\alpha}(y) [\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx) + \mathcal{K}_S(Ry \rightarrow Rx)] dy. \quad (5.16)$$

Avaliando a Eq. (5.14) nos pontos de colocação

$$x_i = \left(\frac{i}{L}\right)^2, \quad i = 0, 1, 2, \dots, L, \quad (5.17)$$

obtém-se a expressão

$$\sum_{\alpha=0}^L a_\alpha \{ \mathfrak{S}_\alpha(x_i) - R^2 [U_\alpha(x_i) + V_\alpha(x_i)] \} = C(Rx_i) + C_S(Rx_i) \quad (5.18)$$

que, após a avaliação das integrais envolvidas na formulação, corresponde ao sistema linear que fornece as constantes a_α da expansão proposta na Eq. (5.10).

5.2.1 Avaliação das Integrais

A fim de determinar os coeficientes a_α do sistema linear definido pela Eq. (5.18), faz-se necessária a avaliação das integrais presentes nos termos $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx)$, $\mathcal{K}_S(Ry \rightarrow Rx)$, $U_\alpha(x_i)$, $V_\alpha(x_i)$, $C(Rx_i)$ e $C_S(Rx_i)$. Para tanto, é proposta de forma geral, a utilização da quadratura de Gauss-Legendre. No entanto algumas particularidades que serão citadas a seguir, devem ser levadas em conta.

5.2.1.1 Avaliação do Termo $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx_i)$

Na formulação deste problema, o termo $\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx_i)$ corresponde à parte do núcleo da equação integral que não sofre a influência da reflexão do gás na parede, já presente na formulação apresentada no capítulo 2. Logo, este termo será aqui avaliado do mesmo modo proposto anteriormente, com a utilização da Eq. (3.17) para o caso de se ter $|Ry - Rx_i| \geq 0,05$ ou, pela Eq. (3.31), quando $|Ry - Rx_i| < 0,05$.

5.2.1.2 Avaliação do Termo $\mathcal{K}_S(Ry \rightarrow Rx_i)$

Para a avaliação do termo $\mathcal{K}_S(Ry \rightarrow Rx_i)$, indicado pela Eq. (5.3), através da utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, propõe-se, primeiramente, a realização da troca de variável

$$\varpi(\xi) = 2e^{-\xi} - 1. \quad (5.19)$$

Desse modo tem-se

$$\mathcal{K}_S(Ry \rightarrow Rx_i) = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{Y_i(y, \mu, \varpi) T(Ry, Rx_i, \mu, \xi(\varpi))}{p(Ry, Rx_i, \mu)(1 - \mu^2)^{1/2}} d\mu d\varpi, \quad (5.20)$$

onde

$$Y_i(y, \mu, \varpi) = \frac{\exp\{-\xi(\varpi)^2 - p(Ry, Rx_i, \mu)/\xi(\varpi)\}}{\varpi + 1} \quad (5.21)$$

e

$$\xi(\varpi) = -\ln\left(\frac{\varpi + 1}{2}\right). \quad (5.22)$$

Entretanto, a Eq. (5.20) impõe dificuldades quanto à avaliação, por quadratura, das integrais envolvidas, especialmente para os valores da variável μ próximos de ± 1 , o que se deve pela presença das singularidades associadas ao termo $(1 - \mu^2)^{1/2}$ do denominador. Uma estratégia inicial aqui utilizada, para o tratamento destas singularidades, consiste na subdivisão do domínio de integração da variável μ perto das singularidades em subintervalos que ficam cada vez menores à medida que se tenha valores para esta variável mais próximos de ± 1 . Neste sentido, após alguns testes realizados no software Maple, optou-se por subdividir o intervalo de integração da variável μ em treze subintervalos, aqui definidos pelos pontos

$$c_N = \begin{cases} -1, & \text{se } N = 1 \\ -1 + 10^{2N-15}, & \text{se } 2 \leq N \leq 7 \\ 1 - 10^{15-2N}, & \text{se } 8 \leq N \leq 13 \\ 1, & \text{se } N = 14 \end{cases}, \quad (5.23)$$

para valores de N inteiros positivos menores ou iguais a 14. Logo, tem-se

$$\mathcal{K}_S(Ry \rightarrow Rx_i) = \frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^{N_\xi} \sum_{N=1}^{13} \sum_{h=1}^{N_\mu} \frac{D_N \omega_m \omega_h Y_i(y, C_{N,h}, \mu_m) T(Ry, Rx_i, C_{N,h}, \xi(\mu_m))}{p(Ry, Rx_i, C_{N,h})(1 - C_{N,h}^2)^{1/2}}, \quad (5.24)$$

onde

$$D_N = \frac{c_{N+1} - c_N}{2}, \quad (5.25)$$

$$C_{N,h} = \frac{(c_{N+1} - c_N) \mu_h + c_{N+1} + c_N}{2}, \quad (5.26)$$

N_ξ corresponde ao número de pontos e pesos de quadratura, μ_m e ω_m , usados na avaliação da integral da variável ϖ , enquanto que N_μ corresponde ao número de pontos e pesos, μ_h e ω_h , usados para avaliação de cada uma das treze integrais definidas nos subintervalos $[c_N, c_{N+1}]$.

Salienta-se que, mediante a utilização do software Maple é viável constatar que através da utilização da estratégia da subdivisão do intervalo de integração da variável μ em treze subintervalos, é possível obter resultados com cinco a seis dígitos de precisão, para esta integral, mediante a utilização de apenas trinta pontos de quadratura em cada um dos subintervalos, enquanto que sem a utilização destas subdivisões, a mesma precisão só é alcançada mediante a utilização de aproximadamente três mil pontos de quadratura. Fato esse, que também contribui significativamente para a redução do tempo computacional requerido para avaliação desta integral.

5.2.1.3 Avaliação do Termo $U_\alpha(x_i)$

Do mesmo modo que nos capítulos anteriores, é importante do ponto de vista do tempo computacional, que se avalie a integral do termo $U_\alpha(x_i)$, indicado na Eq. (5.15), somente nos subintervalos de integração $[d_\alpha, e_\alpha]$ para os quais as funções splines $\mathfrak{S}_\alpha(y)$ assumem valores não nulos. Pode-se, então, escrever

$$U_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \leq d_\alpha \quad (5.27a)$$

e

$$U_\alpha(x_i) = \int_{d_\alpha}^{m_{\alpha,i}} y \mathfrak{S}_\alpha(y) [\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx_i) + \mathcal{K}_S(Ry \rightarrow Rx_i)] dy, \quad \text{se } x_i > d_\alpha, \quad (5.27b)$$

onde

$$m_{\alpha,i} = \min\{x_i, e_\alpha\}. \quad (5.28)$$

Logo, efetuando-se a troca de variável

$$p_{\alpha,i}(y) = \frac{2y - d_\alpha - m_{\alpha,i}}{m_{\alpha,i} - d_\alpha}, \quad (5.29)$$

tem-se

$$U_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \leq d_\alpha \quad (5.30a)$$

e

$$U_\alpha(x_i) = \sum_{j=1}^{N_y} \omega_j g_{\alpha,i,j}^* [\mathcal{K}(Rp_{\alpha,i,j} \rightarrow Rx_i) + \mathcal{K}_S(Rp_{\alpha,i,j} \rightarrow Rx_i)], \quad \text{se } x_i > d_\alpha, \quad (5.30b)$$

onde, conforme já visto anteriormente,

$$g_{\alpha,i,j}^* = \frac{(m_{\alpha,i} - d_\alpha)p_{\alpha,i,j}\mathfrak{S}_\alpha(p_{\alpha,i,j})}{2}, \quad (5.31)$$

$$p_{\alpha,i,j} = \frac{(m_{\alpha,i} - d_\alpha)\mu_j + d_\alpha + m_{\alpha,i}}{2} \quad (5.32)$$

e N_y corresponde ao número de pontos e pesos, μ_j e ω_j , da quadratura da Gauss-Legendre, utilizados na avaliação da integral da variável y . Ainda na Eq. (5.30b), o termo $\mathcal{K}(Rp_{\alpha,i,j} \rightarrow Rx_i)$ é avaliado na Eq. (3.17) ou (3.31) e, o termo $\mathcal{K}_S(Rp_{\alpha,i,j} \rightarrow Rx_i)$ é avaliado mediante a Eq. (5.24).

5.2.1.4 Avaliação do Termo $V_\alpha(x_i)$

Procedendo do mesmo modo, para a avaliação da integral do termo $V_\alpha(x_i)$, tem-se

$$V_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \geq e_\alpha \quad (5.33a)$$

e

$$V_\alpha(x_i) = \int_{n_{\alpha,i}}^{e_\alpha} y \mathfrak{S}_\alpha(y) [\mathcal{K}(Ry \rightarrow Rx_i) + \mathcal{K}_S(Ry \rightarrow Rx_i)] dy, \quad \text{se } x_i < e_\alpha, \quad (5.33b)$$

onde

$$n_{\alpha,i} = \max\{x_i, d_\alpha\}. \quad (5.34)$$

Logo, efetuando-se a troca de variável

$$q_{\alpha,i}(y) = \frac{2y - e_\alpha - n_{\alpha,i}}{e_\alpha - n_{\alpha,i}}, \quad (5.35)$$

tem-se

$$V_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \geq e_\alpha \quad (5.36a)$$

e

$$V_\alpha(x_i) = \sum_{j=1}^{N_y} \omega_j h_{\alpha,i,j}^* [\mathcal{K}(Rq_{\alpha,i,j} \rightarrow Rx_i) + \mathcal{K}_S(Rq_{\alpha,i,j} \rightarrow Rx_i)], \quad \text{se } x_i < e_\alpha, \quad (5.36b)$$

onde

$$h_{\alpha,i,j}^* = \frac{(e_\alpha - n_{\alpha,i})q_{\alpha,i,m}\mathfrak{S}_\alpha(q_{\alpha,i,m})}{2} \quad (5.37)$$

e

$$q_{\alpha,i,j} = \frac{(e_\alpha - n_{\alpha,i})\mu_j + e_\alpha + n_{\alpha,i}}{2}. \quad (5.38)$$

5.2.1.5 Avaliação do Termo $C(Rx_i)$

Segundo Barichello et al. [Barichello et al., 2002], para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, o termo $C(Rx_i)$ indicado pela Eq. (2.16), pode ser reescrito mediante a substituição do termo fonte $Q(\xi)$ da Eq. (5.9), juntamente, com a posterior utilização da identidade das funções modificadas de Bessel dada na Eq. (2.21). Contudo, o termo $C(Rx_i)$ continua apresentando a mesma expressão já indicada pela Eq. (2.22). Ainda, efetuando a troca de variável

$$z(\tau) = 2e^{-\tau} - 1 \quad (5.39)$$

na Eq. (2.22), obtém-se

$$C(Rx_i) = \frac{k_1}{2} - \frac{R}{\pi^{1/2}} \int_{-1}^1 J(z) K_1(R/\tau(z)) I_0(Rx_i/\tau(z)) \mathbf{d}z, \quad (5.40)$$

onde

$$J(z) = \frac{[k_1 - k_2(\tau(z)^2 - 1/2)]}{(z+1)\tau(z)} e^{-\tau(z)^2} \quad (5.41)$$

e

$$\tau(z) = -\ln\left(\frac{z+1}{2}\right). \quad (5.42)$$

A Eq. (5.40) impõe dificuldades para a avaliação da integral mediante o esquema de quadratura de Gauss-Legendre devido à existência de uma singularidade em $z = 1$, especialmente quando r e R estiverem próximos, fato este que se deve à presença do termo $\tau(z)$ no denominador. Uma alternativa aqui utilizada com o intuito de tratar tal singularidade, consiste em subdividir o intervalo de integração, de modo que se tenha

$$C(Rx_i) = \frac{k_1}{2} - \frac{R}{\pi^{1/2}} [M_i(z) + N_i(z)], \quad (5.43)$$

com

$$M_i(z) = \int_{-1}^{0.99} J(z) K_1(R/\tau(z)) I_0(Rx_i/\tau(z)) \mathbf{d}z \quad (5.44)$$

e

$$N_i(z) = \int_{0.99}^1 J(z) K_1(R/\tau(z)) I_0(Rx_i/\tau(z)) \mathbf{d}z. \quad (5.45)$$

Diante disso, a Eq. (5.44) não impõe maiores dificuldades para ser avaliada mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, logo, tem-se

$$M_i(z) = 0.995 \sum_{n=0}^{N_\tau} \omega_n J(z_n^*) K_1(R/\tau(z_n^*)) I_0(Rx_i/\tau(z_n^*)), \quad (5.46)$$

onde

$$z_n^* = \frac{1.99\mu_n - 0.01}{2}, \quad (5.47)$$

sendo N_τ igual ao número de pontos de quadratura de Gauss-Legendre μ_n e de seus respectivos pesos ω_n . Enquanto que, para avaliar a expressão $N_i(z)$ da Eq. (5.45), propõe-se ainda realizar a troca de variável

$$v(z) = \ln\left(\frac{1}{z}\right), \quad (5.48)$$

com o objetivo de transformar o integrando em uma expressão que, graficamente, corresponde a uma curva suave e que, conseqüentemente, possa ser avaliado mais facilmente mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre. Assim sendo, obtém-se

$$N_i(z) = \frac{e^{-0.99} - e^{-1}}{2} \sum_{n=0}^{N_\tau} \omega_n e^{-v_n} J(v_n) K_1(R/\tau(v_n)) I_0(r/\tau(v_n)), \quad (5.49)$$

onde

$$v_n = \frac{(e^{-0.99} - e^{-1})\mu_n + e^{-0.99} + e^{-1}}{2}. \quad (5.50)$$

Desse modo, nesse trabalho, a avaliação do termo $C(Rx_i)$ é realizada através da Eq. (5.43) em conjunto com as Eqs. (5.46) e (5.49).

5.2.1.6 Avaliação do Termo $C_S(Rx_i)$

A fim de possibilitar a avaliação do termo $C_S(Rx_i)$, dado pela Eq. (5.4), também com a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, propõe-se inicialmente a realização das trocas de variáveis indicadas nas Eqs. (5.13) e (5.19), de modo que se tenha

$$C_S(Rx_i) = \frac{2R^2}{\pi} \int_0^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 B_i(y, \mu, \varpi) d\mu d\varpi dy, \quad (5.51)$$

sendo

$$B_i(y, \mu, \varpi) = \frac{Q(\xi(\varpi))T(Ry, Rx_i, \mu, \xi(\varpi))e^{-\xi(\varpi)^2 - p(Ry, Rx_i, \mu)/\xi(\varpi)}}{(\varpi + 1)p(Ry, Rx_i, \mu)(1 - \mu^2)^{1/2}} \quad (5.52)$$

e as expressões $T(Ry, Rx_i, \mu, \xi(\varpi))$, $p(Ry, Rx_i, \mu)$, $Q(\xi(\varpi))$ e $\xi(\varpi)$, dadas pelas Eqs. (5.5), (5.8), (5.9) e (5.22), respectivamente. Além disso, propõe-se também, subdividir o intervalo de integração da variável y de modo que

$$C_S(Rx_i) = \frac{2R^2}{\pi} (C_i^* + D_i^*), \quad (5.53)$$

onde

$$C_i^* = \int_0^{x_i} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 B_i(y, \mu, \varpi) d\mu d\varpi dy \quad (5.54)$$

e

$$D_i^* = \int_{x_i}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 B_i(y, \mu, \varpi) d\mu d\varpi dy. \quad (5.55)$$

Nas Eqs. (5.54) e (5.55), propõe-se ainda efetuar as trocas de variáveis

$$\psi_i(y) = \frac{2y - x_i}{x_i} \quad (5.56)$$

e

$$\zeta_i(y) = \frac{2y - x_i - 1}{1 - x_i}, \quad (5.57)$$

respectivamente. Assim sendo, e novamente utilizando as subdivisões do intervalo de integração da variável μ indicadas na Eq. (5.23), tem-se

$$C_S(Rx_i) = \frac{2R^2}{\pi} \left\{ \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{m=1}^{N_\xi} \sum_{N=1}^{13} \sum_{h=1}^{N_\mu} \eta(i, j, m, h, N) B_i(\psi_{i,j}, C_{N,h}, \mu_m) + \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{m=1}^{N_\xi} \sum_{N=1}^{13} \sum_{h=1}^{N_\mu} \eta^*(i, j, m, h, N) B_i(\psi_{i,j}, C_{N,h}, \mu_m) \right\}, \quad (5.58)$$

onde

$$\eta(i, j, m, h, N) = \frac{\omega_j \omega_m \omega_h D_N x_i}{2} \quad (5.59)$$

e

$$\eta^*(i, j, m, h, N) = \frac{\omega_j \omega_m \omega_h D_N (1 - x_i)}{2}, \quad (5.60)$$

enquanto que as expressões $B_i(\psi_{i,j}, C_{N,h}, \mu_m)$, $C_{N,h}$ e D_N , são dadas pela Eqs. (5.52), (5.26) e (5.25), respectivamente. Ainda na Eq. (5.58), as constantes N_y , N_ξ e N_μ correspondem ao número de pontos de quadratura usados nas avaliações das integrais nas respectivas variáveis e, $N = 13$ corresponde ao número de subdivisões consideradas para o intervalo de integração da variável μ .

5.2.2 Resultados Numéricos

Avaliadas todas as integrais da Eq. (5.18), tem-se um sistema algébrico linear cuja solução corresponde aos coeficientes constantes usados na expansão proposta na Eq. (5.10). A obtenção destes coeficientes possibilita a determinação das grandezas de interesse físico, tais como as velocidades macroscópicas do fluxo de gás

$$u_P(r) = \sum_{\alpha=0}^L a_\alpha \mathfrak{S}_\alpha \left(\frac{r}{R} \right) \quad (5.61)$$

e

$$u_T(r) = \sum_{\alpha=0}^L a_\alpha \mathfrak{S}_\alpha \left(\frac{r}{R} \right), \quad (5.62)$$

salientando novamente que os coeficiente a_α usados nas Eqs. (5.61) e (5.62) correspondem às soluções dos sistemas lineares definidos para os problemas de Poiseuille e "creep" térmico mediante a utilização dos respectivos termos fonte, respectivamente. Bem como, as taxas de fluxo do gás

$$U_P = \frac{2}{R^2} \sum_{s=1}^{N_r} \omega_s u_P(r_s^*) r_s^* \quad (5.63)$$

e

$$U_T = \frac{2}{R^2} \sum_{s=1}^{N_r} \omega_s u_T(r_s^*) r_s^*. \quad (5.64)$$

Aqui os índices P e T , são usados para identificar os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, respectivamente. As expressões usadas para determinar as velocidades macroscópicas dos dois problemas tratados diferem-se apenas pelo uso das constantes k_1 e k_2 do termo de fonte indicado na Eq. (5.9) e que está presente nos termos $C(r)$ e $C_S(r)$ da Eq. (5.18).

Nas Eqs. (5.63) e (5.64), N_r é o número de pontos de quadratura de Gauss-Legendre $\mu_s \in [-1, 1]$ e de seus respectivos pesos ω_s utilizados na avaliação da integral e,

$$r_s^* = \frac{R}{2}(\mu_s + 1). \quad (5.65)$$

Salienta-se ainda, que tais expressões são obtidas a partir das Eqs. (2.31) e (2.33), mediante a utilização da troca de variável

$$\eta(r) = \frac{2r}{R} - 1. \quad (5.66)$$

Neste trabalho optou-se por utilizar números de pontos de quadratura diferentes para avaliar as integrais de variáveis distintas, tendo em vista os diferentes tratamentos dados, bem como os diferentes comportamentos das funções a serem integradas.

Os resultados numéricos para as grandezas de interesse físico descritas anteriormente, são novamente obtidos a partir de uma implementação em FORTRAN. Entretanto, reforça-se aqui, que este trabalho se trata de uma tentativa preliminar que ainda necessita de uma investigação maior no tratamento das singularidades que esta formulação apresenta.

Nas tabelas 5.1 e 5.2 são apresentados alguns resultados obtidos para a taxa de fluxo do gás nos problemas de Poiseuille e *creep* térmico, respectivamente, em função dos parâmetros R e M , mediante a utilização dos parâmetros de entrada: $N_\mu = 30$, $N_\xi = 50$, $N_\tau = 50$, $N_y = 100$, $N_r = 50$ e $\alpha = 0.92$. Através delas é possível observar que os resultados convergem mais rapidamente para os casos em que se tem os menores valores de R , ou seja, em fluxos de gases que tendem a estarem em regime de moléculas livres ou de transição.

Na tabela 5.3 são apresentados alguns resultados para a taxa de fluxo do gás no problema de Poiseuille em função de alguns valores de α , mediante a utilização dos parâmetros de entrada: $M = 60$, $N_\mu = 30$, $N_\xi = 50$, $N_\tau = 50$, $N_y = 100$ e $N_r = 50$. Através da observação de tais valores pode-se constatar que o valor de α tem efeitos sobre as taxas de fluxo do problema de Poiseuille em dutos cilíndricos, de modo que quanto menor o valor de

α , ou seja, quanto menos difusa for a reflexão do gás nas superfícies do duto, maiores são as taxas de fluxo de gás. Tal fato é mais evidente nos casos em que se tem os menores valores de R , que correspondem aos casos em que os fluxos tendem para o regime de moléculas livres ou de transição. Fato este, que vem ao encontro com a literatura, visto que nestes regimes os efeitos de superfície afetam sensivelmente o fluxo dos gases.

Na tabela 5.4 são apresentados alguns resultados para a taxa de fluxo do gás no problema *creep* térmico em função de alguns valores de α , mediante a utilização dos parâmetros de entrada: $M = 60$, $N_\mu = 30$, $N_\xi = 50$, $N_\tau = 50$, $N_y = 100$ e $N_r = 50$. Nela, constata-se que o valor de α tem efeitos distintos sobre as taxas de fluxo do problema *creep* térmico em dutos cilíndricos. Para valores de R menores e iguais a 0.5, quanto menos difusa for a reflexão do gás na superfície (ou seja, quanto menores os valores de α), maiores são as taxas de fluxo, entretanto para valores de R maiores, ocorre justamente o inverso. Também é possível constatar que nos casos em que se tem os maiores valores de R , tem-se menos influência dos efeitos de superfície.

Cabe salientar ainda, que grande parte dos resultados apresentados nas tabelas 5.3 e 5.4, já haviam sido determinados por Loyalka [Loyalka, 1975], mediante a utilização de um método numérico variacional. Bem como, salienta-se também, que para o caso de se ter $\alpha = 1$, ou seja, no caso em que se admite que a reflexão do gás na superfície do duto cilíndrico é perfeitamente difusa, os resultados aqui apresentados são aproximadamente iguais aos resultados encontrados, para os mesmos problemas, sem a inclusão da condição de contorno de superfície refletora, conforme pode ser visto no capítulo 3 deste trabalho.

A figura 5.1 apresenta os perfis de velocidade o problema de Poiseuille com $R = 0.2$, onde é possível observar que quanto menos difusa for a reflexão do gás na superfície do duto, maiores serão as velocidades macroscópicas do fluxo de gás. Para o problema *creep* térmico tal característica pode ser observada apenas nos dutos com os menores valores de R , como pode ser visto na figura 5.2. Entretanto, nos dutos com valores de R maiores, ocorre justamente o oposto, conforme pode ser observado na figura 5.3.

Tabela 5.1 – Convergência das Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille com $\alpha = 0.92$

R	$M = 6$	$M = 12$	$M = 18$	$M = 24$	$M = 30$	$M = 36$	$M = 42$	$M = 48$	$M = 54$	$M = 60$	$M = 66$	U_P
0.01	1.7153	1.7168	1.7172	1.7174	1.7174							1.7174
0.05	1.6342	1.6359	1.6363	1.6363								1.6363
0.10	1.5835	1.5854	1.5858	1.5859	1.5859							1.5859
0.20	1.5318	1.5339	1.5344	1.5346	1.5346							1.5346
0.50	1.4909	1.4940	1.4946	1.4949	1.4950	1.4950						1.4950
1.00	1.5237	1.5283	1.5293	1.5297	1.5299	1.5300	1.5301	1.5301				1.5301
2.00	1.6828	1.6911	1.6930	1.6937	1.6941	1.6943	1.6945	1.6946	1.6946			1.6946
10.00	3.5242	3.5408	3.5548	3.5631	3.5702	3.5751	3.5783	3.5795	3.5802	3.5804	3.5804	3.5804

Tabela 5.2 – Convergência das Taxas de Fluxo do Problema *Creep* Térmico com $\alpha = 0.92$

R	$M = 6$	$M = 12$	$M = 18$	$M = 24$	$M = 30$	$M = 36$	$M = 42$	$M = 48$	$M = 54$	$M = 60$	$M = 66$	U_T
0.01	0.8263	0.8274	0.8276	0.8276								0.8276
0.05	0.7231	0.7239	0.7241	0.7241								0.7241
0.10	0.6487	0.6496	0.6498	0.6498								0.6498
0.20	0.5566	0.5576	0.5578	0.5579	0.5579							0.5579
0.50	0.4183	0.4196	0.4198	0.4199	0.4200	0.4200						0.4200
1.00	0.3138	0.3154	0.3157	0.3158	0.3159	0.3160	0.3160					0.3160
2.00	0.2189	0.2211	0.2216	0.2218	0.2219	0.2220	0.2220	0.2221	0.2221			0.2221
10.00	0.0592	0.0654	0.0670	0.0676	0.0679	0.0681	0.0684	0.0686	0.0687	0.0687		0.0687

Tabela 5.3 – Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille

R	$\alpha = 1.0$	$\alpha = 0.96$	$\alpha = 0.92$	$\alpha = 0.88$	$\alpha = 0.84$	$\alpha = 0.80$
0.01	1.4763	1.5920	1.7174	1.8538	2.0028	2.1662
0.05	1.4303	1.5293	1.6363	1.7524	1.8788	2.0170
0.10	1.4037	1.4913	1.5859	1.6883	1.7996	1.9211
0.20	1.3814	1.4552	1.5346	1.6203	1.7132	1.8144
0.50	1.3863	1.4389	1.4950	1.5550	1.6193	1.6884
1.00	1.4578	1.4931	1.5301	1.5690	1.6100	1.6531
2.00	1.6571	1.6756	1.6946	1.7141	1.7342	1.7548
10.00	3.5791	3.5797	3.5804	3.5810	3.5816	3.5823

Tabela 5.4 – Taxas de Fluxo do Problema *Creep* Térmico

R	$\alpha = 1.0$	$\alpha = 0.96$	$\alpha = 0.92$	$\alpha = 0.88$	$\alpha = 0.84$	$\alpha = 0.80$
0.01	0.7177	0.7705	0.8276	0.8894	0.9566	1.0299
0.05	0.6493	0.6855	0.7241	0.7644	0.8098	0.8577
0.10	0.5972	0.6228	0.6498	0.6784	0.7088	0.7411
0.20	0.5294	0.5433	0.5579	0.5729	0.5889	0.6052
0.50	0.4169	0.4186	0.4200	0.4212	0.4220	0.4225
1.00	0.3216	0.3189	0.3160	0.3128	0.3092	0.3053
2.00	0.2271	0.2246	0.2221	0.2194	0.2167	0.2139
10.00	0.0688	0.0688	0.0687	0.0687	0.0686	0.0686

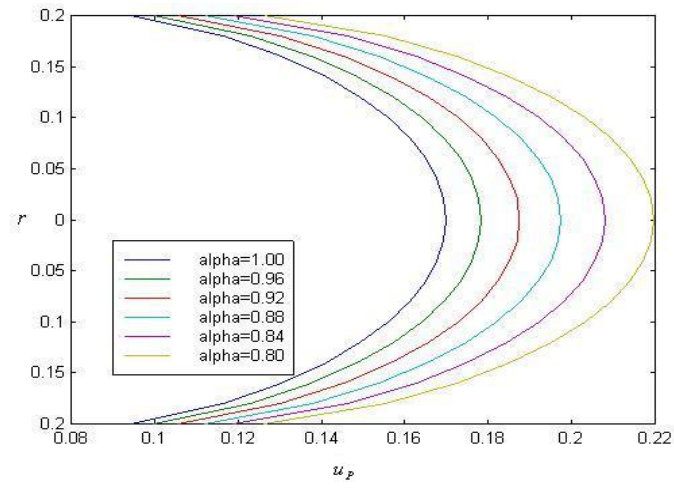


Figura 5.1 – Perfis de Velocidade do Poiseuille com $R = 0.2$

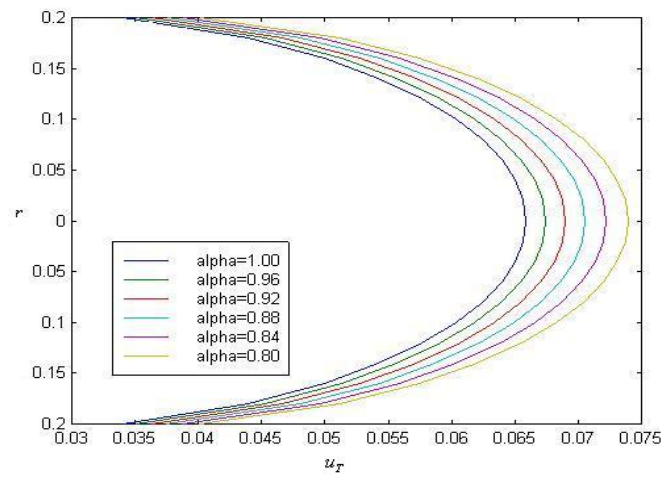


Figura 5.2 – Perfis de Velocidade do *Creep* Térmico com $R = 0.2$

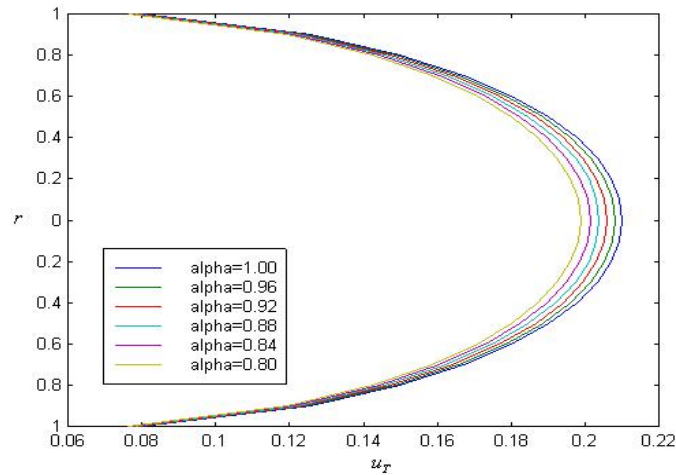


Figura 5.3 – Perfis de Velocidade do *Creep* Térmico com $R = 1$

5.3 Solução via Expansão em Polinômios de Legendre

Também buscando-se realizar uma tentativa preliminar de se calcular quantidades de interesse físico para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos com superfícies refletoras, propõe-se a utilização da expansão

$$G(r) = \sum_{\alpha=0}^L a_{\alpha} P_{\alpha} \left(\frac{2r}{R} - 1 \right), \quad (5.67)$$

onde $P_{\alpha}(x)$ representa o polinômio de Legendre de ordem α , aqui definido pela fórmula de recorrência indicada na Eq. (3.53).

Substituindo a Eq. (5.67) na Eq. (5.2), tem-se

$$\sum_{\alpha=0}^L a_{\alpha} \left\{ P_{\alpha} \left(\frac{2r}{R} - 1 \right) - \int_0^R t P_{\alpha} \left(\frac{2t}{R} - 1 \right) \mathcal{N}(t \rightarrow r) dt \right\} = C(r) + C_S(r), \quad (5.68)$$

onde

$$\mathcal{N}(t \rightarrow r) = \mathcal{K}(t \rightarrow r) + \mathcal{K}_S(t \rightarrow r). \quad (5.69)$$

Propõe-se, então, efetuar a divisão do intervalo de integração em t e a multiplicação

da Eq. (5.68) por

$$\phi_\beta(r) = rP_\beta\left(\frac{2r}{R} - 1\right) \quad (5.70)$$

para $\beta = 0, 1, 2, \dots, L$. Dessa forma, integrando a expressão resultante em r , obtém-se

$$\sum_{\alpha=0}^L a_\alpha \{A_{\beta,\alpha} - [B_{\beta,\alpha} + C_{\beta,\alpha}]\} = D_\beta \quad (5.71)$$

onde

$$A_{\beta,\alpha} = \int_0^R \phi_\beta(r)\phi_\alpha(r)dr/r, \quad (5.72)$$

$$B_{\beta,\alpha} = \int_0^R \int_0^r \phi_\beta(r)\phi_\alpha(t)\mathcal{N}(t \rightarrow r)dt dr, \quad (5.73)$$

$$C_{\beta,\alpha} = \int_0^R \int_r^R \phi_\beta(r)\phi_\alpha(t)\mathcal{N}(t \rightarrow r)dt dr \quad (5.74)$$

e

$$D_\beta = \int_0^R \phi_\beta(r) [C(r) + C_S(r)] dr. \quad (5.75)$$

O fator indicado na Eq. (5.70) foi assim escolhido com o propósito de determinar um sistema algébrico simétrico. Fato este, que possibilita a redução do número de cálculos necessários para determinar o sistema.

Para avaliar numericamente as integrais nas variáveis r e t , que surgem nas expressões $A_{\beta,\alpha}$, $B_{\beta,\alpha}$, $C_{\beta,\alpha}$ e D_β , mediante a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, primeiramente, faz-se necessário efetuar algumas trocas de variáveis. Para a variável r , propõe-se usar a mesma troca de variável já apresentada na Eq. (5.66). Enquanto que para a variável t , serão usadas as expressões

$$\eta_1(t) = \frac{2t}{r} - 1, \quad (5.76)$$

para o intervalo $[0, r]$ e

$$\eta_2(t) = \frac{2t - r - R}{R - r}, \quad (5.77)$$

para o intervalo $[r, R]$.

Dessa forma, as expressões indicadas nas Eqs. (5.72), (5.73), (5.74) e (5.75) podem ser avaliadas pelas expressões

$$A_{\beta,\alpha} = \frac{R}{2} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n P_\beta(\mu_n) P_\alpha(\mu_n), \quad (5.78)$$

$$B_{\beta,\alpha} = \frac{R}{4} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n^2 P_\beta(\mu_n) \sum_{m=1}^{N_t} \omega_m g_{m,n} P_\alpha(\gamma_{m,n}) \mathcal{N}(g_{m,n} \rightarrow f_n) \quad (5.79)$$

$$C_{\beta,\alpha} = \frac{R}{4} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n (R - f_n) f_n P_\beta(\mu_n) \sum_{m=1}^{N_t} \omega_m h_{m,n} P_\alpha(\gamma_{m,n}^*) \mathcal{N}(h_{m,n} \rightarrow f_n) \quad (5.80)$$

e

$$D_\beta = \frac{R}{2} \sum_{n=1}^{N_r} \omega_n f_n P_\beta(\mu_n) [C(f_n) + C_S(f_n)]. \quad (5.81)$$

Nestas equações, as constantes N_r e N_t indicam o número de pontos e pesos da quadratura de Gauss-Legendre usados na avaliação das integrais nas variáveis r e t , respectivamente. As expressões $\mathcal{N}(g_{m,n} \rightarrow f_n)$ e $\mathcal{N}(h_{m,n} \rightarrow f_n)$, conforme definidos pela Eq. (5.69), têm seus termos \mathcal{K} avaliados mediante a utilização das Eqs. (3.17) ou (3.31), dependendo do módulo da diferença de seus argumentos; enquanto que seus termos \mathcal{K}_S são avaliados pela Eq. (5.24). As expressões $C(f_n)$ e $C_S(f_n)$, presentes na Eq. (5.81), são avaliados com as Eqs. (5.43) e (5.58), respectivamente. Enquanto que os demais termos presentes nesta formulação são definidos de modo que

$$f_n = \frac{\mu_n + 1}{2} R, \quad (5.82)$$

$$g_{m,n} = \frac{\mu_m + 1}{2} f_n, \quad (5.83)$$

$$h_{m,n} = \frac{R(\mu_m + 1) - f_n(\mu_m - 1)}{2}, \quad (5.84)$$

$$\gamma_{m,n} = \frac{(\mu_m + 1)f_n - R}{R} \quad (5.85)$$

e

$$\gamma_{m,n}^* = \frac{(R - f_n)\mu_m + f_n}{R}. \quad (5.86)$$

5.3.1 Resultados Numéricos

Do mesmo modo que nas situações anteriores, os resultados para as grandezas de interesse físico dos problemas em questão são determinadas a partir de um programa em FORTRAN, onde a solução do sistema linear simétrico, indicado pela Eq. (5.71), é composta pelos coeficientes da expansão proposta na Eq. (5.67) e, a partir dela, é possível determinar as velocidades macroscópicas dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico, mediante a utilização das Eqs.(5.61) e (5.62), bem como as taxas de fluxo do gás, através das Eqs. (5.63) e (5.64), respectivamente.

Nas tabelas 5.5 e 5.6 são apresentados alguns resultados para a taxa de fluxo do problema de Poiseuille e *creep* térmico, respectivamente, em função de alguns valores de α e mediante a utilização dos parâmetros de entrada: $L = 10$, $N_\mu = 30$, $N_\xi = 50$, $N_\tau = 50$, $N_y = 100$ e $N_r = 50$. Deste modo, é possível obter três dígitos de precisão em um tempo computacional de aproximadamente doze horas.

Tabela 5.5 – Taxas de Fluxo do Problema de Poiseuille

R	$\alpha = 1.0$	$\alpha = 0.96$	$\alpha = 0.92$	$\alpha = 0.88$	$\alpha = 0.84$	$\alpha = 0.80$
0.01	1.476	1.592	1.717	1.854	2.003	2.166
0.10	1.404	1.491	1.586	1.688	1.800	1.921
0.20	1.381	1.455	1.535	1.620	1.713	1.814
1.00	1.458	1.493	1.530	1.569	1.610	1.653
2.00	1.657	1.676	1.695	1.714	1.734	1.755
5.00	2.349	2.353	2.357	2.361	2.364	2.368
10.00	3.579	3.580	3.580	3.581	3.582	3.582

Tabela 5.6 – Taxas de Fluxo do Problema do *Creep* Térmico

R	$\alpha = 1.0$	$\alpha = 0.96$	$\alpha = 0.92$	$\alpha = 0.88$	$\alpha = 0.84$	$\alpha = 0.80$
0.01	0.718	0.771	0.828	0.890	0.957	1.030
0.10	0.597	0.623	0.650	0.678	0.709	0.741
0.20	0.529	0.543	0.558	0.573	0.589	0.605
1.00	0.322	0.319	0.316	0.313	0.309	0.305
2.00	0.227	0.225	0.222	0.219	0.217	0.214
5.00	0.122	0.122	0.121	0.121	0.121	0.120
10.00	0.069	0.069	0.069	0.069	0.069	0.069

5.4 Considerações Finais

Conforme já salientado anteriormente, alguns dos resultados aqui expostos já haviam sido apresentados por Loyaka [Loyalka, 1975]. Embora os resultados para as taxas de fluxo apresentadas por Loyaka, com quatro dígitos de precisão, coincidem com os respectivos resultados aqui apresentados, o que difere os dois trabalhos é o fato deste ser de caráter analítico e, portanto, a metodologia aqui empregada possibilita a obtenção de resultados de forma fechada.

Do mesmo modo, também já foi mencionado que no caso em que se admite que a reflexão do gás na superfície do duto cilíndrico ser perfeitamente difusa (quando $\alpha = 1$), os resultados aqui apresentados são exatamente iguais aos resultados encontrados, para os mesmos problemas, sem a inclusão da condição de contorno de superfície refletora, conforme pode ser visto no capítulo 3. Isso pode ser justificado pelo fato da expressão $T(t, r, \mu, \xi)$, apresentada na Eq. (5.5), ser nula quando se tem $\alpha = 1$, o que conseqüentemente torna nulos também os termos $\mathcal{K}_S(t \rightarrow r)$ e $C_S(r)$, indicados nas Eqs. (5.3) e (5.4). Com isso, a Eq. (5.2) torna-se equivalente à Eq. (2.24), sendo que a diferença existente entre estas consiste no fato da última ser definida em termos da expressão $Z(r)$ indicada pela Eq. (2.23)

Em relação às duas expansões aqui utilizadas, do mesmo modo que já havia ocorrido nos demais problemas resolvidos, salienta-se que ambas podem ser utilizadas na obtenção de resultados de caráter analítico para estes problemas. Entretanto, mediante a utilização da expansão em termos de splines cúbicas de Hermite, juntamente com um esquema de pontos de colocação, é possível obter resultados com menos esforço computacional, apesar da utilização da expansão em termos de polinômios de Legendre resultar em um sistema simétrico.

A metodologia aqui empregada é capaz de fornecer resultados de caráter analítico

para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos com superfícies refletoras. Fato este, que inviabiliza a aplicação da transformação de Mitsis. Entretanto, esta metodologia ainda trata-se apenas de uma tentativa numérica inicial para verificar a possibilidade de utilização destas expansões, necessitando ainda de um melhor tratamento das singularidades envolvidas em alguns termos da formulação. Mas, tendo em vista os resultados aqui obtidos, tudo indica que esta metodologia poderá ser empregada em uma classe mais ampla de problemas desta área do que quando comparado com a transformação proposta por Mitsis.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES

Neste trabalho foi possível constatar a eficiência do uso de métodos semi-analíticos para o tratamento de problemas da dinâmica de gases rarefeitos em dutos cilíndricos, formulados através de equações integrais. Mostrou-se que mediante a aplicação de métodos espectrais baseados na utilização de expansões em termos de funções conhecidas, como as splines cúbicas de Hermite e os polinômios de Legendre, é possível obter soluções de caráter analítico para uma classe mais ampla de problemas desta área do que, por exemplo, mediante a utilização da transformação proposta por Mitsis.

Com relação aos resultados obtidos neste trabalho, salienta-se que são apresentadas expressões e resultados numéricos para as quantidades de interesse físico dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos, obtidos a partir da equação integral do modelo BGK e do modelo S. Bem como, também são apresentados resultados para um caso fisicamente mais complexo, que consiste na resolução dos mesmos problemas em dutos cilíndricos com superfícies refletoras, também modelados a partir da equação integral do modelo BGK.

Em ambos os casos, considerou-se duas abordagens, sendo a primeira baseada na utilização de uma expansão em splines cúbicas de Hermite e um esquema de pontos de colocação e, a segunda, baseada na utilização de uma expansão em termos de polinômios de Legendre. Tais abordagens mostraram-se eficientes, entretanto, nos casos considerados, a primeira mostrou-se mais eficiente no sentido de requerer menos tempo computacional, visto que nela algumas integrais são avaliadas apenas em pequenos subintervalos onde as splines cúbicas são não nulas e, também, porque deste modo tem-se integrais de ordens inferiores às correspondentes integrais obtidas mediante a utilização da segunda abordagem.

Observando os resultados obtidos para as quantidades de interesse físico dos pro-

blemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos, modelados pelas equações integrais dos modelos BGK e S, percebe-se que no caso do fluxo de Poiseuille há uma concordância de 1 a 2 dígitos entre os resultados obtidos nos dois modelos, enquanto que para o problema do *creep* térmico a concordância, de um modo geral, é de no máximo 1 dígito.

Quanto aos resultados apresentados para o caso do fluxo de gás rarefeito em dutos cilíndricos com superfícies refletoras, é possível observar que os efeitos de superfície são mais sensíveis nos escoamentos em dutos como valores de R menores, ou seja nos escoamentos que se aproximam dos regimes de moléculas livres e de transição, visto que segundo a formulação utilizada R corresponde ao parâmetro de rarefação (o inverso do número de Knudsen). Fato este, que também está de acordo com as referências analisadas.

Em geral, para a obtenção de resultados para as grandezas de interesse físico com até três dígitos corretos, a metodologia aqui empregada é muito rápida. Entretanto, a obtenção de resultados com mais casas decimais corretas para os problemas em questão, ainda requer um tempo computacional bastante elevado, especialmente para os dutos que apresentam os maiores valores de R .

Uma das dificuldades impostas por esta metodologia consiste na avaliação das integrais, que aqui é realizada mediante a aplicação do esquema de pontos de quadratura de Gauss-Legendre. Esta merece uma atenção especial no sentido de permitir a avaliação, bem como no intuito de tentar diminuir o tempo computacional requerido. Alguns aspectos considerados neste trabalho e que se julga serem importantes neste sentido, são:

- Usar a técnica de soma e subtração de outra integral para amenizar as singularidades do núcleo da equação integral do modelo BGK, conforme indicado na Eq. (3.31);
- Reescrever o núcleo da equação integral do modelo S de forma a permitir um tratamento escalar, conforme indicado na Eq. (4.11);
- Separar o intervalo de integração das integrais na variável $t \in [0, R]$, que contém o núcleo das equações integrais do modelo BGK e S, em $t \in [0, r]$ e $t \in [r, R]$, visto que os núcleos destas equações possuem descontinuidades em $r = t$;
- Na abordagem que considera o uso da expansão em splines cúbicas de Hermite, considerar apenas os subintervalos de integração na variável t para os quais as splines cúbicas não são nulas;

- No caso dos gases em dutos cilíndricos com superfícies refletoras, subdividir o intervalo de integração na variável μ em pequenos subintervalos de integração, conforme indicado na Eq. (5.23).

Diante dos resultados obtidos com este trabalho, especialmente mediante a realização da tentativa preliminar com a inclusão de uma condição de contorno refletora, realizada no capítulo 5, abre-se caminho, também, para se trabalhar com outras condições de contorno, como por exemplo as condições de Cercignani-Lampis.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abramowitz, M. and Stegun, I. A., 1965. “**Handbook of Mathematical Function**”. Dover Pub., New York.

Aubert, C., 1999. “**Écoulements compressibles de gaz dans les microcanaux: effets de raréfaction, effets instationnaires**”, Docteur these, Université Paul Sabatier, Soutenue, France.

Baal, T., 2004. “Biomicrotechnology”, **MST News**, vol. 1, pp. 05–08.

Bahukudumbi, P., Park, J. H., and Beskok, A., 2003. “A Unified Engineering Model for Steady and Quasi-Steady Shear-Driven Gas Microflows”, **Microscale Thermophysical Engineering**, vol. 7, pp. 291–315.

Bao, F. and Lin, J., 2008. “Burnett Simulations of Gas Flow in Microchannels”, **Fluid Dynamics Research**, vol. 40, pp. 679–694.

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 (ZAMP)**, vol. 52, pp. 517–534.

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 (ZAMP)**, vol. 53, pp. 769–781.

Barichello, L. B., Rodrigues, P., and Siewert, C. E., 2004. “On Computing the Chapman-Enskog and Burnett Functions”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 86, pp. 109–114.

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. 665–675.

Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 2003. “Some Comments on Modeling the Linearized Boltzmann Equation”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 77, pp. 43–59.

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. 511–525.

Boltzmann, L., 1872. “Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen”, **Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften**, vol. 60, pp. 275–370.

Boyd, J. P., 2000. “**Chebyshev and Fourier Spectral Methods**”. Dover Pub., New York.

Cabrera, L. C. and Barichello, L. B., 2006. “Unified Solutions to Some Classical Problems in Rarefied Gas Dynamics Based on the S-Model Equations”, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)**, vol. 57, pp. 285–312.

Camargo, M. and Barichello, L. B., 2004. “Unified Approach for Variable Collision Frequency Models in Rarefied Gas Dynamics”, **Transp. Theory and Stat. Phys.**, vol. 33, pp. 227–260.

Cao, B. Y., Chen, M., and Guo, Z. Y., 2006. “Effect of surface roughness on gas flow in microchannels by molecular dynamics simulation”, **International Journal of Engineering Science**, vol. 44, pp. 927–937.

Cercignani, C., 1966. “The Method of Elementary Solutions for Kinetic Models With Velocity-Dependent Collision Frequency”, **Annals of Physics**, vol. 40, pp. 469–481.

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

Cercignani, C., 1988. “**The Boltzmann Equation and Its applications**”. Springer-Verlay, New York.

Cercignani, C. and Lampis, M., 1971. “Kinetic Models for Gas-Surface Interaction”, **Transport Theory and Statis. Phys.**, vol. 1, pp. 101–114.

Cercignani, C. and Sergiotto, F., 1966. “Cylindrical Poiseuille Flow of a Rarefied Gas”, **The Physics of Fluids**, vol. 9, pp. 40–44.

Cercignani, C. and Sergiotto, F., 1967. “Cylindrical Couette Flow of a Rarefied Gas”, **The Physics of Fluids**, vol. 10, pp. 1200–1204.

Chandrasekhar, S., 1950. “**Radiative Transfer**”. Oxford University Press, London.

Davison, B., 1957. “**Neutron Transport Theory**”. Oxford University Press, London.

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

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

Duderstadt, J. J. and Martin, W. R., 1979. “**Transport Theory**”. John Wiley & Sons, Inc., New York.

Ferziger, J. H., 1967. “Flow of a Rarefied Gas Through a Cylindrical Tube”, **The Physics of Fluids**, vol. 10, pp. 1448–1453.

Frangi, A., Frezzotti, A., and Lorenzani, S., 2007a. “On the Application of the BGK Kinetic Model to the Analysis of Gas-Structure Interactions in MEMS”, **Computers and Structures**, vol. 85, pp. 810–817.

Frangi, A., Ghisi, A., and Frezzotti, A., 2007b. “Analysis of Gas Flow in MEMS by a Deterministic 3D BGK Kinetic Model”, **Sensor Letters**, vol. 6, pp. 1–7.

Gad-el-Hak, M., 2005. “**The MEMS Handbook**”, volume 1. Mechanical Engineering Handbook Series, 2a. edition.

Garcia, R. D. M. and Siewert, C. E., 2006. “The Linearized Boltzmann Equation: Sound-Wave Propagation in a Rarefied Gas”, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 57, pp. 94–122.

Gross, E. P. and Jackson, E. A., 1959. “Kinetic Models and the Linearized Boltzmann Equation”, **The Physics of Fluids**, vol. 2, pp. 432–441.

Kakaç, S., Vasiliev, L., Bayazitoglu, Y., and Yener, Y., 2005. “**Microscale Heat Transfer: Fundamentals and Applications**”. Springer Netherlands, New York.

Kamphorst, C. H., Rodrigues, P., and Barichello, L. B., 2007a. “Solução via Splines de Equação Integral Relativa ao Fluxo de Gás Rarefeito em Duto Cilíndrico”, **Anais do XXX Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - CNMAC**, pages 01–05.

Kamphorst, C. H., Rodrigues, P., and Barichello, L. B., 2008. “Spectral Approach Compute Rarefied Gas Dynamics Flows in Cylindrical Geometry”, **Submetido a Publicação**.

Kamphorst, C. H., Rodrigues, P., and Camargo, M., 2007b. “Fluxo de Gases em Microcanais: Um Estudo da Influência de Coeficientes de Acomodação”, **Revista TEMA**, vol. 8, pp. 53–62.

Karniadakis, G. E. and Beskok, A., 2002. “**Micro Flows**”. Springer-Verlag, New York.

Knackfuss, R. F. and Barichello, L. B., 2006. “On the Temperature-Jump Problem in Rarefied Gas Dynamics: The Effect of the Cercignani-Lampis Boundary Condition”, **SIAM Journal on Applied Mathematics**, vol. 66, pp. 2149–2186.

Krueger, S., 2007. “Sensors for Mobility”, **MST News**, vol. 3, pp. 6–10.

Li, D., 2008. “**Micro and Nanoscale Gas Dynamics**”. Springer, New York.

Lilly, T. C., Duncan, J. A., Nothnagel, S. L., Gimelshein, S. F., Gimelshein, N. E., Ketsdever, A. D., and Wysong, I. J., 2007. “Numerical and experimental investigation of microchannel flow rough surfaces”, **Physics of Fluids**, vol. 19, pp. 106101(1)–106101(9).

Lilly, T. C., Gimelshein, S. F., Ketsdever, A. D., and Markelov, G. N., 2006. “Measurements and Computations of Mass Flow and Momentum Flux Through Short Tubes in Rarefied Gases”, **Physics of Fluids**, vol. 18, pp. 093601(1)–093601(12).

Liu, L., Cao, W., Wu, J., Wen, W., Chang, D. C., and Sheng, P., 2008. “Design and Integration of an all-in-one Biomicrofluid”, **Biomicrofluidics**, vol. 2, pp. 034103(1)–034103(8).

Loyalka, S. K., 1975. “Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. II”, **The Journal of Chemical Physics**, vol. 63, pp. 4054–4060.

Loyalka, S. K. and Ferziger, J. H., 1968. “Model Dependence of the Slip Coefficient”, **Physics of Fluids A**, vol. 11, pp. 1668–1671.

Loyalka, S. K. and Hickey, K. A., 1989. “Plane Poiseuille flow: near continuum results for a rigid sphere gas.”, **Physics of Fluids A**, vol. 160, pp. 395–408.

M. N. Özişik, t. .

McCormack, F. J., 1973. “construction of Linearized Kinetic Models for Gaseous Mixtures and Molecular Gases”, **International Journal of Engineering Science**, vol. 16, pp. 2095–2105.

Mitsis, G. J., 1963. “**Transport Solutions to the Monoenergetic Critical Problems**”, Tese de doutorado, Argone National Laboratory, Chicago.

Müller-Fiedler, R., Axten, E., Ernest, P., and Schie, J., 2007. “Inertial Sensors for Automotive Safety Systems”, **MST News**, vol. 3, pp. 10–13.

Myong, R. S., Reese, J. M., Barber, R. W., and Emerson, D. R., 2005. “Velocity Slip in Microscale Cylindrical Couette Flow: The Langmuir Model”, **The Physics of Fluids**, vol. 17, pp. 087105(1)–087105(11).

Pekeris, C. L. and Alterman, Z., 1957. “Solution of the Boltzmann-Hilbert Integral Equation II. The Coefficients of Viscosity and Heat Conduction”, **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, vol. 43, pp. 998–1007.

Pourmahmoud, N., 2008. “Rarefied Gas Flow Modeling inside Rotating Circular Cylinder”, **American J. of Engineering and Applied Sciences**, vol. 1, pp. 62–65.

Rodrigues, P., 2003. “**Dinâmica de Gases Rarefeitos e Transferência Radiativa: Aplicações em Geometria Cilíndrica**”, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Rodrigues, P. and Barichello, L. B., 2004. “An Integral Equation Approach to Radiative Transfer in Cylindrical Media”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 33, pp. 765–776.

Rodrigues, P., Kamphorst, C. H., and Barichello, L. B., 2009. “A Spectral Method for Rarefied Gas Dynamics Problems in Cylindrical Geometry”, **International Journal of Pure and Applied Mathematics**, vol. 51, pp. 181–187.

Roy, S., Raju, R., Chuang, H. F., Cruden, B. A., and Meyyappan, M., 2003. “Modeling Gas Flow Through Microchannels and Nanopores”, **Journal of Applied Physics**, vol. 93, pp. 4870–4879.

Scherer, C. S., Filho, J. F. P., and Barichello, L. B., 2009. “An Analytical Approach to the Unified Solution of Kinetic Equations in Rarefied Gas Dynamics”, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)**, vol. 60, pp. 70–115.

Schlichting, H., 1979. “**Boundary Layer Theory**”. McGraw-Hill, New York, 7 th edition.

Schultz, M. N., 1973. “**Spline Analysis**”. Prentice Hall, Englewood Cliffs.

Shakhov, E. M., 1968. “Generalization of the Krook Kinetic Relaxation Equation”, **Fluid Dynamics**, vol. 3, pp. 142–145.

Sharipov, F., 2008. “Modeling and Calculations of Gas Flows in Microfluids: DMSC Vs Kinetic Equation”, **Microfluids**, vol. 8, pp. 1–10.

Sharipov, F. and Seleznev, V., 1998. “Data on Internal Gas Flows”, **The Journal of Chemical Physics**, vol. 27, pp. 657–706.

Shen, C., Fan, J., and Xie, C., 2003. “Statistical Simulation of Rarefied Gas Flows in Micro-Channels”, **Journal of Computational Physics**, vol. 189, pp. 512–526.

Siewert, C. E., 2000. “Poiseuille and Thermal-Creep Flow in a Cylindrical Tube”, **Journal of Computational Physics**, vol. 160, pp. 470–480.

Siewert, C. E., 2002. “Generalized boundary conditions for the S-model kinetic equations basic to flow in a plane channel”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer (JQSRT)**, vol. 72, pp. 75–88.

Siewert, C. E. and Valougeorgis, D., 2002. “An Analytic Discrete-Ordinates Solution of the S model in Rarefied Gas Dynamics: Poiseuille and Thermal-Creep Flow in a Cylindrical Tube”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 72, pp. 531–550.

Song, X. and Chen, J. K., 2008. “A Comparative Study on Poiseuille Flow of Simple Fluids Through Cylindrical and Slit-Like Nanochannels”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 51, pp. 1770–1779.

Turner, S. E., Lam, L. C., Faghri, M., and Gregory, O. J., 2004. “Experimental investigation of gas flow in microchannels”, **ASME J. Heat Transfer**, vol. 126, pp. 753–762.

Valougeorgis, D., 2003. “An Analytical Solution of the S-model kinetic equations”, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)**, vol. 54, pp. 112–124.

Valougeorgis, D. and Thomas Jr., J. R., 1986. “Exact numerical results for Poiseuille and thermal creep flow in a cylindrical tube”, **The Physics of Fluids**, vol. 29, pp. 423–429.

Wang, M. and Li, Z., 2004. “Simulations for Gas Flows in Microgeometries Using the Direct Simulation Monte Carlo Method”, **International Journal of Heat and Fluid Flow**, vol. 25, pp. 975–985.

Weng, H. C. and Chen, C., 2008. “On the Importance of Thermal Creep in Natural Convective Gas Microflow with Wall Heat Fluxes”, **J. Phys. D: Appl. Phys.**, vol. 41, pp. 115501(1)–115501(10).

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 Physik**, vol. 52, pp. 500–516.

Yoshida, H. and Aoki, K., 2006. “Linear Stability of the Cylindrical Couette Flow of a Rarefied Gas”, **Physical Review**, vol. 73, pp. 021201(1)–021201(18).

Zahid, W. A., Yin, Y., and Zhu, K., 2007. “Couette-Poiseuille Flow of a Gas in Long Microchannels”, **Microfluid Nanofluid**, vol. 3, pp. 55–64.

APÊNDICE A

A Equação de Boltzmann e os Modelos Cinéticos

A Equação de Boltzmann (EB) é uma equação que modela o transporte de partículas, e foi introduzida por Ludwig Boltzmann em 1872 [Boltzmann, 1872] na teoria cinética dos gases. Ela estabelece um balanço entre os mecanismos de perda e ganho de partículas em um volume qualquer no espaço de fase. Tal equação baseia-se na função de distribuição $f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c})$ que contém informação sobre a distribuição espacial e de velocidade das partículas de um gás num determinado instante de tempo. Considerando a hipótese das moléculas do gás serem monoatômicas, sem carga elétrica, sofrerem apenas colisões binárias e serem do tipo esferas rígidas, a equação de Boltzmann pode ser escrita na forma [Williams, 1971; Cercignani, 1988]

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}) + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{s}} f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}) = J(f', f). \quad (\text{A.1})$$

Nesta, $f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c})$ é a função de distribuição, t é o tempo, \mathbf{s} é o vetor posição, \mathbf{c} é o vetor de velocidade molecular e $J(f', f)$ é o operador de colisão (f' e f estão associadas às distribuições antes e após as colisões, respectivamente) dado por

$$J(f', f) = \int \int \int W(\mathbf{c} \rightarrow \mathbf{c}'; \mathbf{c}_1 \rightarrow \mathbf{c}'_1) \times [f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}') f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}'_1) - f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}) f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}_1)] d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}'_1 d\mathbf{c}', \quad (\text{A.2})$$

onde \mathbf{c} e \mathbf{c}_1 correspondem às velocidades pós-colisionais e $W(\mathbf{c} \rightarrow \mathbf{c}'; \mathbf{c}_1 \rightarrow \mathbf{c}'_1)$ à frequência de espalhamento diferencial para a colisão entre dois corpos de velocidades pré-colisionais \mathbf{c}' e \mathbf{c}'_1 .

Nesse contexto, também se faz necessária a utilização de condições de contorno apropriadas. Uma alternativa nesse sentido, consiste na utilização do modelo de Maxwell [Williams, 2001], que especifica a forma como as partículas interagem com a superfície, considerando a fração de partículas que é refletida difusamente e outra fração que é refletida especularmente, através da utilização de coeficientes de acomodação térmica e de momento

tangencial que representam a fração de moléculas que é refletida difusamente pela parede. Outros modelos mais refinados também podem ser usados na descrição das interações entre as partículas do gás e a superfície, como por exemplo o modelo de Cercignani-Lampis [Cercignani e Lampis, 1971], que usa coeficientes de acomodação normais e tangenciais para descrever melhor o processo de colisão das partículas de gás com as paredes.

De um modo geral, a condição de contorno para uma superfície localizada na posição \mathbf{s}^* é dada por [Williams, 1971]

$$-\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} f(t, \mathbf{s}^*, \mathbf{c}) = \int_{\mathbf{c}' \cdot \mathbf{n} > 0} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{n} \Gamma(\mathbf{s}^*, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) f(t, \mathbf{s}^*, \mathbf{c}') d\mathbf{c}', \quad \mathbf{c} \cdot \mathbf{n} > 0, \quad (\text{A.3})$$

onde \mathbf{n} é um vetor normal unitário externo à região ocupada pelo gás e $\Gamma(\mathbf{s}^*, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c})$ é a probabilidade de uma partícula que colide na superfície \mathbf{s}^* com velocidade \mathbf{c}' ser refletida com velocidade \mathbf{c} .

Deste modo, fica evidente que a EB é uma equação integro-diferencial muito complicada, uma vez que, originalmente, é não linear e envolve sete variáveis independentes (as três componentes da variável espacial, as três componentes da velocidade e o tempo). Portanto, a proposição de metodologias de caráter analítico a partir desta equação, em geral, é muito restrita, aplicando-se apenas aos problemas fisicamente mais simples.

Uma alternativa usada nos casos em que o fluxo de gás está fracamente fora do equilíbrio ou em regime permanente, consiste em escrever a função de distribuição em termos de uma função de perturbação, como por exemplo

$$f(\mathbf{s}, \mathbf{c}) = f_0(\mathbf{s}, \mathbf{c}) [1 + h(\mathbf{s}, \mathbf{c})], \quad (\text{A.4})$$

onde $h(\mathbf{s}, \mathbf{c})$ é a função de perturbação da distribuição Maxwelliana local $f_0(\mathbf{s}, \mathbf{c})$ [Williams, 1971; Williams, 2001]. Desse modo, substituindo-se a Eq. (A.4) na Eq. (A.1) e usando algumas propriedades do operador de colisão J , obtém-se a equação linearizada de Boltzmann (ELB).

Segundo Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2003], na ELB unidimensional é usada a função de distribuição na forma

$$f(x, \mathbf{c}) = f_0(\mathbf{c}) [1 + h(x, \mathbf{c})], \quad (\text{A.5})$$

onde $c(2k_B T_0/m_0)^{1/2}$ é a magnitude da velocidade da partícula, x é a variável espacial (medida em cm) e $h(x, \mathbf{c})$ é uma perturbação causada à distribuição Maxwelliana

$$f_0(\mathbf{c}) = n_0 [m_0 / (2\pi k_B T_0)]^{3/2} e^{-c^2}. \quad (\text{A.6})$$

Nesta formulação ρ_0 é a densidade (constante) das partículas do gás, m_0 a massa, k_B a constante de Boltzmann e T_0 a temperatura (constante) de referência. Substituindo a Eq. (A.5) na Eq. (A.1) e considerando algumas propriedades de simetria da função frequência de espalhamento diferencial para a colisão de dois corpos [Williams, 1971; Williams, 2001], obtém-se a equação

$$c\mu \frac{\partial}{\partial x} h(x, \mathbf{c}) = \sigma_0^2 \rho_0 \pi^{1/2} \mathcal{L}\{h\}(x, \mathbf{c}). \quad (\text{A.7})$$

Ainda seguindo a Ref. [Barichello e Siewert, 2003], considera-se que σ_0 é o diâmetro de colisão das partículas de gás (aproximado segundo esferas rígidas [Williams, 1971]) e que o operador de colisão seja

$$\mathcal{L}\{h\}(x, \mathbf{c}) = -\nu(c)h(x, \mathbf{c}) + \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} h(x, \mathbf{c}') K(\mathbf{c}, \mathbf{c}') c'^2 d\chi' d\mu' dc' \quad (\text{A.8})$$

onde

$$\nu(c) = \frac{2c^2 + 1}{c} \int_0^c e^{-x^2} dx + e^{-c^2} \quad (\text{A.9})$$

é a frequência de colisão das partículas, $K(\mathbf{c}, \mathbf{c}')$ é o núcleo de espalhamento e as coordenadas esféricas $(c, \arccos \mu, \chi)$ são usadas para definir o vetor velocidade.

Nesse contexto, Pekeris e Alterman [Pekeris e Alterman, 1957] propõem o uso de uma expansão em termos de polinômios de Legendre (como funções do ângulo de espalhamento entre as direções antes e depois da colisão) para descrever o núcleo de espalhamento exato para esferas rígidas, como sendo

$$K(\mathbf{c}, \mathbf{c}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (2n+1) (2 - \delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) k_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi) \quad (\text{A.10})$$

onde $P_n^m(\mu)$ são as funções normalizadas de Legendre

$$P_n^m(\mu) = \left[\frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right]^{1/2} (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_n(\mu), \quad n \geq m \quad (\text{A.11})$$

e $P_n(\mu)$ são os polinômios de Legendre. Os elementos $k_n(c', c)$, presentes na expansão do núcleo, são apresentados por Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2003] para $n = 0, 1, 2, 3$. Tais expressões caracterizam-se pelo fato da igualdade $k_n(c', c) = k_n(c, c')$ ser válida para todo n e por possuírem derivadas descontínuas em $c = c'$.

Esta última particularidade impõe dificuldades do ponto de vista analítico e numérico, para resolver a ELB. Por esta razão, outras abordagens têm sido propostas na teoria cinética dos gases no sentido de simplificar a expressão do núcleo de espalhamento, mas que conservem as propriedades físicas do processo de colisão, tais como a conservação de massa, momento e energia. Tais aproximações dão origem às chamadas equações cinéticas ou equações modelo [Cercignani, 1988; Barichello e Siewert, 2003].

Diante disso, atualmente há vários modelos cinéticos que buscam simplificar o núcleo de espalhamento presente no termo de colisão da equação de transporte de partículas. Entre esses, pode-se citar como exemplos:

- BGK [Bhatnagar et al., 1954], Gross-Jackson [Gross e Jackson, 1959], S [Shakhov, 1968] e MRS [Garcia e Siewert, 2006] para um gás com frequência de colisão constante;
- CLF [Cercignani, 1966; Loyalka e Ferziger, 1968], CES e CEBS [Barichello e Siewert, 2003] para um gás com frequência de colisão variável;
- o modelo de McCormack [McCormack, 1973] para misturas gasosas.

Algumas destas equações modelo, entre outras, vem sendo usadas há muitos anos com o propósito de resolver problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos e mais recentemente devido às aplicações em MEMS e NEMS. Entre outros, se pode destacar trabalhos nos quais são apresentadas soluções “unificadas” para problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos em canais planos, como por exemplo: [Barichello et al., 2001], [Valougeorgis, 2003], [Camargo e Barichello, 2004], [Cabrera e Barichello, 2006], [Frangi et al., 2007a], [Scherer et al., 2009].

Assim sendo, com o propósito de fornecer maiores informações a respeito dos modelos

cinéticos BGK e S, utilizados neste trabalho, inicia-se a partir da equação cinética escrita em termos da variável espacial $\tau = x/l$ (adimensionalizada em termos do livre caminho médio l), em coordenadas cartesianas,

$$c_x \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} h(\tau, \mathbf{c}) + \epsilon h(\tau, \mathbf{c}) = \epsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) d\mathbf{c}'_x d\mathbf{c}'_y d\mathbf{c}'_z + S(\mathbf{c}), \quad (\text{A.12})$$

onde $S(\mathbf{c})$ é o termo fonte não homogêneo, $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ é o núcleo de espalhamento das partículas do gás, $\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)$ é o vetor velocidade adimensionalizado de modo que $c(2k_B T_0/m_0)^{1/2}$ corresponda à magnitude da velocidade,

$$\epsilon = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} l \quad (\text{A.13})$$

e $h(\tau, \mathbf{c})$ é uma perturbação causada à distribuição Maxwelliana

$$f_0(\mathbf{c}) = n_0 [m_0 / (2\pi k_B T_0)]^{3/2} e^{-c^2}. \quad (\text{A.14})$$

Nesta formulação, ainda, σ_0 é o diâmetro molecular, k_B é a constante de Boltzmann, T_0 a temperatura de referência, m_0 a massa de uma partícula de gás e n_0 é a densidade molecular de equilíbrio. Cabe ressaltar também, que a função de distribuição das partículas de gás, neste caso, é dada por

$$f(\tau, \mathbf{c}) = f_0(\mathbf{c}) [1 + h(\tau, \mathbf{c})]. \quad (\text{A.15})$$

Para esferas rígidas, o núcleo de espalhamento $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ exato pode ser expandido em termos de funções de Legendre [Pekeris e Alterman, 1957]. Entretanto, atualmente há vários modelos cinéticos que buscam simplificar o núcleo de espalhamento baseadas em formas truncadas da expansão proposta por Pekeris e Alterman.

Segundo Siewert [Siewert, 2002], os núcleos de espalhamento correspondentes aos modelos cinéticos BGK [Bhatnagar et al., 1954] e S [Shakhov, 1968] podem ser escritos simultaneamente pela expressão

$$K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + 2\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} + \frac{2}{3} \left(c'^2 - \frac{3}{2} \right) \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) + \beta M(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad (\text{A.16})$$

com

$$M(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{4}{15} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} \left(c'^2 - \frac{5}{2} \right) \left(c^2 - \frac{5}{2} \right), \quad (\text{A.17})$$

de modo que o núcleo de espalhamento do modelo BGK corresponde à Eq. (A.16) tomando-se o parâmetro $\beta = 0$, enquanto que para o modelo S tem-se $\beta = 1$. Consequentemente, do ponto de vista da formulação matemática, a principal diferença existente na formulação dos modelos BGK e S, consiste na inclusão de um termo adicional na expressão utilizada para representar o núcleo de espalhamento do modelo S. Outra diferença marcante está no fato do modelo cinético S resultar numa formulação vetorial, conforme pode ser visto no Apêndice C.

O termo ϵ , definido na Eq. (A.13) e que depende do livre caminho médio l , pode ser avaliado em termos da viscosidade (ϵ_p) mediante a utilização das Eqs. (1.2) e (1.3), ou então, em termos da condutividade térmica (ϵ_t) mediante a utilização das Eqs. (1.5) e (1.6). Desse modo, segundo Barichello e Siewert [Barichello e Siewert, 2003], tem-se

- $\epsilon_p = \epsilon_t = 1$, logo $\epsilon_p/\epsilon_t = 1$, para o modelo BGK;
- $\epsilon_p = 1$, $\epsilon_t = 3/2$, logo $\epsilon_p/\epsilon_t = 2/3$, para o modelo S.

Logo, uma característica que difere os dois modelos em questão é o fato de que o modelo S pode ser usado para a determinação do valor correto do número de Prandtl ($Pr = \epsilon_p/\epsilon_t = 2/3$), enquanto que o modelo BGK fornece o valor $Pr = 1$. Segundo Valougeorgis [Valougeorgis, 2003], tal característica faz com que o modelo S possua a vantagem de poder ser empregado satisfatoriamente tanto em problemas com fluxos isotérmicos como não isotérmicos, fato este que não é observado com o modelo BGK. De fato, segundo a Ref. [Frangi et al., 2007b], o modelo BGK pode ser ajustado para determinar a viscosidade cinemática ou a difusividade térmica correta, mas não para ambos. Entretanto, o modelo BGK pode ser empregado em diversos problemas da DGR, particularmente em problemas onde a dinâmica de transporte e de fluxo de calor não são igualmente importantes [Frangi et al., 2007a; Frangi et al., 2007b; Scherer et al., 2009].

APÊNDICE B

Splines Cúbicas de Hermite

As splines cúbicas de Hermite usadas nesse trabalho são definidas, aos pares, por Schultz [Schultz, 1973]. Nota-se que há duas funções splines $\mathfrak{S}_\alpha(x)$ associadas a cada nó

$$\zeta_\alpha = (\alpha/M)^2, \quad \alpha = 0, 1, \dots, M, \quad (\text{B.1})$$

definido no intervalo $[0, 1]$. Desse modo, as splines cúbicas são definidas diferentemente para valores pares e ímpares de α , de forma que

$$\mathfrak{S}_{2\alpha}(x) = \psi_\beta(x) \quad \text{e} \quad \mathfrak{S}_{2\alpha+1}(x) = \varphi_\beta(x), \quad (\text{B.2})$$

para $\beta = 0, 1, \dots, M$.

De um modo geral, as splines cúbicas de Hermite são definidas por funções cúbicas em pequenos subintervalos determinados pelos nós e, são nulas fora destes subintervalos. Para determinar tais funções e os respectivos intervalos, faz-se necessário considerar as expressões

$$f_\beta(x) = \frac{x - \zeta_{\beta-1}}{\zeta_\beta - \zeta_{\beta-1}} \quad (\text{B.3})$$

e

$$g_\beta(x) = \frac{\zeta_{\beta+1} - x}{\zeta_{\beta+1} - \zeta_\beta}. \quad (\text{B.4})$$

Assim sendo, pode-se escrever as funções ψ , nos subintervalos não-nulos, como sendo

$$\psi_0(x) = g_0^2(x) [3 - 2g_0(x)], \quad x \in [\zeta_0, \zeta_1], \quad (\text{B.5})$$

$$\psi_\beta(x) = \begin{cases} f_\beta^2(x) [3 - 2f_\beta(x)] & x \in [\zeta_{\beta-1}, \zeta_\beta] \\ g_\beta^2(x) [3 - 2g_\beta(x)] & x \in [\zeta_\beta, \zeta_{\beta+1}] \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

para $\beta = 1, 2, \dots, M - 1$, e

$$\psi_M(x) = f_M^2(x) [3 - 2f_M(x)], \quad x \in [\zeta_{M-1}, \zeta_M]. \quad (\text{B.7})$$

Do mesmo modo, as funções φ , nos subintervalos não-nulos, podem ser escritas na forma

$$\varphi_0(x) = xg_0^2(x), \quad x \in [\zeta_0, \zeta_1], \quad (\text{B.8})$$

$$\varphi_\beta(x) = \begin{cases} (x - \zeta_\beta) f_\beta^2(x), & x \in [\zeta_{\beta-1}, \zeta_\beta], \\ (x - \zeta_\beta) g_\beta^2(x), & x \in [\zeta_\beta, \zeta_{\beta+1}], \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

para $\beta = 1, 2, \dots, M - 1$, e

$$\varphi_M(x) = (x - \zeta_M) f_M^2(x), \quad x \in [\zeta_{M-1}, \zeta_M]. \quad (\text{B.10})$$

Lembrando sempre, que as funções splines são definidas para todo o intervalo $x \in [0, 1]$ e, portanto, são iguais a zero nos subintervalos não indicados pelas Eqs. (B.5) a (B.10).

Outras propriedades específicas destas funções podem ser encontradas na Ref. [Schultz, 1973].