

Solução via Splines de Equação Integral Relativa ao Fluxo de Gás Rarefeito em Duto Cilíndrico

Carmo H. Kamphorst **Patricia Rodrigues**

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

Liliane Basso Barichello *

Instituto de Matemática
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Av. Bento Gonçalves 9500, 91509-900, Porto Alegre, RS
E-mail: lbaric@ufrgs.br

5 de junho de 2007

1 Introdução

Estudos científicos referentes aos problemas da dinâmica de gases rarefeitos procedem de longa data [5, 13], e muitos avanços já foram obtidos tanto em relação à aspectos teóricos como em termos do desenvolvimento de métodos numéricos capazes de calcular quantidades relativas aos escoamentos destes referidos gases.

As possibilidades de aplicação dos problemas estudados nesta área da teoria de transporte de partículas, atualmente, estão presentes em situações inovadoras como, por exemplo, em filtros para micropartículas do ar, indústria de lasers, sistemas micro-eleto mecânicos e outras [8].

A modelagem dos problemas clássicos nesta área é baseada na equação íntegro-diferencial de Boltzmann e modelos cinéticos dela derivados [6]. Devido a complexidade da equação, originalmente não linear e envolvendo sete variáveis independentes, a proposição de metodologias de caráter analítico, ou mesmo a obtenção de soluções em forma fechada, fica em geral restrita a problemas mais simples e, na maioria dos casos, formulados em geometria cartesiana. No caso de geometria cilíndrica é mais usual se tratar da forma integral da equação, mesmo porque, neste caso, métodos semi-analíticos são usados em associação com uma conhecida transformação proposta por Mitsis [9], que reduz o problema ao caso de geometria retangular.

Esta proposta, no entanto, não é válida em casos que descrevem modelos físicos mais complexos.

No estudo de procedimentos que possam ser utilizados na solução de problemas mais complexos de transporte de partículas, em geometria cilíndrica, enfocando procedimentos semi-analíticos e buscando soluções em forma fechada, neste trabalho é apresentado um desenvolvimento da solução da forma integral [2] de uma equação cinética derivada da equação linearizada de Boltzmann. Em particular, um método baseado na utilização de splines cúbicas de Hermite e um esquema de colocação é desenvolvido. O referido esquema já tem sido utilizado com sucesso na solução de outras equações integrais de interesse na área [3, 10].

2 A Equação Integral

Na descrição do comportamento do fluxo de um gás rarefeito em um duto cilíndrico de raio R , verifica-se que a obtenção de resultados numéricos para o perfil de velocidade das partículas do gás

$$q(r) = \pi^{-1/2} Z(r) - \frac{1}{2}, \quad (1)$$

bem como a taxa de fluxo

$$Q = \frac{4}{R^3} \int_0^1 q(r) dr, \quad (2)$$

*Este trabalho é parcialmente financiado pelo CNPq do Brasil

depende da avaliação de $Z(r)$ que satisfaz a e equação integral [2]

$$Z(r) = \int_0^R tZ(t)K(t \rightarrow r)dt + S(r), \quad (3)$$

para $r \in [0, R]$, derivada a partir da equação íntegro-diferencial em coordenadas cilíndricas, para o modelo cinético BGK [4]. Na equação (3), $S(r)$ é o termo de fonte, derivado, neste caso, da presença de um gradiente de pressão na direção normal ao fluxo no interior do tubo [2], que resulta na expressão

$$S(r) = \frac{1}{2}\pi^{1/2}. \quad (4)$$

Ainda, o o núcleo $K(t \rightarrow r)$, na equação (3), é dado por

$$K(t \rightarrow r) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-u^2} K_0\left(\frac{r}{u}\right) I_0\left(\frac{t}{u}\right) \frac{du}{u^2}, \quad (5)$$

para $t \in [0, r]$ e

$$K(t \rightarrow r) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-u^2} K_0\left(\frac{t}{u}\right) I_0\left(\frac{r}{u}\right) \frac{du}{u^2}, \quad (6)$$

para $t \in [r, R]$, sendo $I_0(x)$ e $K_0(x)$ as funções de Bessel modificadas de ordem zero, de primeira e de segunda classe, respectivamente. Neste trabalho, apresentamos uma proposta de solução desta formulação integral, baseada em expansões em termos de funções splines.

3 Splines Cúbicas

Aqui são utilizadas as splines cúbicas de Hermite, conforme propostas por Schultz [11]. Para tanto, considera-se inicialmente $M + 1$ nós ζ_α definidos no intervalo $[0, 1]$ por

$$\zeta_\alpha = (\alpha/M)^m, \quad \alpha = 0, 1, \dots, M, \quad (7)$$

neste caso tomando $m = 2$. Propõe-se então uma expansão na forma

$$Z(r) = \sum_{\alpha=0}^K a_\alpha \mathfrak{S}_\alpha\left(\frac{r}{R}\right), \quad (8)$$

onde $K = 2M + 1$ e os coeficientes a_α são constantes. Nota-se que há duas funções splines $\mathfrak{S}_\alpha(x)$ associadas a cada nó e que são definidas diferentemente para valores pares e ímpares de α [11], as quais podem ser escritas como

$$\mathfrak{S}_{2\beta}(x) = \psi_\beta(x) \quad \text{e} \quad \mathfrak{S}_{2\beta+1}(x) = \varphi_\beta(x), \quad (9)$$

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

$$f_\alpha(x) = \frac{x - \zeta_{\alpha-1}}{\zeta_\alpha - \zeta_{\alpha-1}} \quad (10)$$

$$g_\alpha(x) = \frac{\zeta_{\alpha+1} - x}{\zeta_{\alpha+1} - \zeta_\alpha} \quad (11)$$

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

$$\psi_0(x) = g_0^2(x) [3 - 2g_0(x)], \quad x \in [\zeta_0, \zeta_1], \quad (12)$$

$$\psi_\alpha(x) = \begin{cases} f_\alpha^2(x) [3 - 2f_\alpha(x)], & x \in [\zeta_{\alpha-1}, \zeta_\alpha] \\ g_\alpha^2(x) [3 - 2g_\alpha(x)], & x \in [\zeta_\alpha, \zeta_{\alpha+1}] \end{cases} \quad (13)$$

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

$$\psi_M(x) = f_M^2(x) [3 - 2f_M(x)], \quad x \in [\zeta_{M-1}, \zeta_M]. \quad (14)$$

Do mesmo modo, as funções φ podem ser re-escritas na forma

$$\varphi_0(x) = xg_0^2(x), \quad x \in [\zeta_0, \zeta_1], \quad (15)$$

$$\varphi_\alpha(x) = \begin{cases} (x - \zeta_\alpha) f_\alpha^2(x), & x \in [\zeta_{\alpha-1}, \zeta_\alpha] \\ (x - \zeta_\alpha) g_\alpha^2(x), & x \in [\zeta_\alpha, \zeta_{\alpha+1}] \end{cases} \quad (16)$$

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

$$\varphi_M(x) = (x - \zeta_M) f_M^2(x), \quad x \in [\zeta_{M-1}, \zeta_M]. \quad (17)$$

Ainda, outras propriedades específicas destas funções podem ser encontradas na Ref. [11].

4 Desenvolvimento

Dessa forma, substituindo a expansão dada pela equação (8) na equação (3), obtém-se inicialmente

$$\sum_{\alpha=0}^K a_\alpha \left\{ \mathfrak{S}_\alpha\left(\frac{r}{R}\right) - \int_0^R t \mathfrak{S}_\alpha\left(\frac{t}{R}\right) K(t \rightarrow r) dt \right\} = \frac{1}{2}\pi^{1/2}. \quad (18)$$

Seguindo trabalhos anteriores [1, 3, 10], nos quais a utilização de mapeamentos para a avaliação de integrais numéricas pelo esquema de quadratura usual de Gauss-Legendre tem se mostrado eficiente e conveniente, no sentido de ser aplicável a uma classe ampla de problemas, reescreve-se a equação (18) na forma

$$\sum_{\alpha=0}^K a_\alpha \left\{ \mathfrak{S}_\alpha(x) - R^2 \int_0^1 y \mathfrak{S}_\alpha(y) K(Ry \rightarrow Rx) dy \right\} = \frac{1}{2}\pi^{1/2} \quad (19)$$

onde $K(Ry \rightarrow Rx)$ está definida pelas equações (5) e (6) e, claramente,

$$x = \frac{r}{R}, \quad (20)$$

$$y = \frac{t}{R}. \quad (21)$$

Aqui, de fato, deve-se considerar o intervalo $[m_\alpha, n_\alpha]$ para o qual a função spline $\mathfrak{S}_\alpha(y)$ está definida, de forma que

$$\mathfrak{S}_\alpha(y) = 0, \quad y \notin [m_\alpha, n_\alpha], \quad (22)$$

e, logo, a equação (19) pode ser escrita na forma

$$\sum_{\alpha=0}^K a_\alpha \left\{ \mathfrak{S}_\alpha(x) - R^2 \int_{m_\alpha}^{n_\alpha} y \mathfrak{S}_\alpha(y) K(Ry \rightarrow Rx) dy \right\} = \frac{1}{2} \pi^{1/2}. \quad (23)$$

Continuando, a transformação

$$z(u) = e^{-u} \quad (24)$$

é utilizada, de forma que o intervalo de integração, nas equações (5) e (6) também seja mapeado para $[0, 1]$. De fato, o objetivo final é de que posteriormente se possa usar

$$z = \frac{1}{2}(\mu + 1) \quad (25)$$

de forma que estas integrais sejam avaliadas a partir de somatórios utilizando os nós e pesos da quadratura de Gauss-Legendre usual, $\{\mu_k, \omega_k\}$, definidos no intervalo $[-1, 1]$. O mesmo procedimento é adotado na avaliação da integral em y , presente na equação (23), usando apropriado mapeamento do intervalo $[m_\alpha, n_\alpha]$.

Ainda, com relação as equações (5) e (6), por razões computacionais, define-se

$$\hat{I}_0(n) = I_0(n)e^{-n} \quad (26)$$

e

$$\hat{K}_0(n) = K_0(n)e^n \quad (27)$$

de forma que

$$K(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 \exp\{-(\ln z)^2 + R(x-y)/\ln z\} \times \hat{K}_0\left(-\frac{Rx}{\ln z}\right) \hat{I}_0\left(-\frac{Ry}{\ln z}\right) \frac{dz}{z(\ln z)^2}, \quad (28)$$

para $y \in [0, x]$ e

$$K(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 \exp\{-\ln z^2 + R(y-x)/\ln z\} \times \hat{K}_0\left(\frac{Ry}{-\ln z}\right) \hat{I}_0\left(\frac{Rx}{-\ln z}\right) \frac{dz}{z(\ln z)^2}, \quad (29)$$

para $y \in [x, 1]$.

Dessa forma, a avaliação da equação (23), nos pontos de colocação, aqui escolhidos como

$$x_i = \left(\frac{i}{K}\right)^2, \quad i = 0, 1, 2, \dots, K, \quad (30)$$

resulta em

$$\sum_{\alpha=0}^K a_\alpha \left\{ \mathfrak{S}_\alpha(x_i) - R^2 \int_{m_\alpha}^{n_\alpha} y \mathfrak{S}_\alpha(y) \times K(Ry \rightarrow Rx_i) dy \right\} = \frac{1}{2} \pi^{1/2} \quad (31)$$

a qual, determina, considerando ainda a avaliação numérica das integrais conforme descrito, um sistema linear algébrico de ordem $K = 2M + 1$, cuja solução $(a_0, a_1, a_2, \dots, a_K)^T$ é necessária para o cálculo de $Z(r)$, definida na equação (8).

A partir da obtenção de $Z(r)$ pode-se avaliar o perfil de velocidade das partículas do gás, equação (1), e a taxa de fluxo, equação (2).

5 Resultados Numéricos

Para a avaliação das quantidades de interesse implementou-se um programa em FORTRAN, sendo que alguns aspectos devem ser destacados:

- Como parâmetros de entrada, devem ser considerados o valor de M que determina o número $M + 1$ de nós usados na definição da função spline [11] e também estabelece a ordem $2M + 1$ do sistema algébrico dado pela equação (31); ainda, os números nz , ny e nx que indicam o número de pontos de quadratura usados no cálculo das integrais nas variáveis z , y e x , respectivamente. Optou-se em usar números distintos de pontos de quadratura nestas integrais tendo em vista diferentes comportamentos numéricos e presença de singularidades, que exigem uma descrição mais detalhada, em alguns casos. Por exemplo, na avaliação das integrais definidas nas equações (28) e (29), é esperada e observada uma perda de precisão nos casos onde $z \rightarrow 1$ e a diferença entre os argumentos das funções de Bessel é pequena (digamos, menor do que 0,01). Neste caso, em particular, optou-se ainda por subdividir o intervalo de integração em z em subintervalos, quando a diferença entre os argumentos das funções de Bessel é pequena. Já as integrais na variável y , definidas para subintervalos $[m_\alpha, n_\alpha]$ pequenos, não necessitam de um número muito elevado de pontos de quadratura para serem avaliadas com a mesma precisão. Porém, deve-se usar um esquema de mapeamento para os pontos e pesos de quadratura de Gauss-Legendre de

modo que estes possam ser definidos para o intervalo $[m_\alpha, n_\alpha]$. O mesmo acontece com relação a integral em x , na equação (2), que está definida para o intervalo $x \in [0, 1]$ e não apresenta regiões com grandes variações da função a ser integrada. Como dito anteriormente, estes três tipos de integrais são avaliadas a partir do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, definido em $[-1, 1]$, cujos pontos são mapeados, para os respectivos intervalos de integração.

- Além dos parâmetros de entrada, a implementação é composta por uma subrotina para calcular os pontos de quadratura de Gauss-Legendre e seus respectivos pesos; uma subrotina para mapear os pontos de quadratura para os subintervalos de interesse; subrotinas para avaliação das funções splines e das funções de Bessel, e os pontos de colocação; ainda, uma subrotina para determinar os elementos das matrizes que compõem o sistema algébrico (31). O sistema é resolvido usando-se as subrotinas DGEFA e DGESL do pacote LINPACK [7]. Finalmente, são usadas, ainda, uma subrotina para avaliar a velocidade macroscópica com o auxílio da equação (1) e outra para avaliar a taxa de fluxo usando a equação (2).

- Os resultados apresentados nas Tabelas 1 e 2 foram obtidos usando-se os seguintes parâmetros: $M = 300$, $nu = 200$, $ny = 20$ e $nx = 50$. Tendo em vista a análise de variação destes parâmetros, acredita-se que tais resultados estão corretos em todos os dígitos apresentados. Também, os mesmos concordam com os resultados apresentados por Siewert [12], onde a abordagem usada foi a transformação de Mitsis [9] e não a solução da equação integral. Salienta-se no entanto que, para valores menores de M , nu , ny e nx , já se pode obter concordância de 3 a 4 dígitos com a Ref. [12]. O uso da subdivisão de intervalos e maior número de pontos foi feito no intuito de obter-se ainda um número maior de dígitos significativos nos resultados. Observa-se ainda, que a representação com parênteses usada nos resultados expostos na Tabela 2, baseiam-se na notação científica, assim sendo, o número $5,48219(-3)$, por exemplo, representa o número $5,48219 \times 10^{-3}$.

- Para ilustrar, na figura 1 estão representados os valores encontrados na Tabela 1. Percebe-se a ocorrência de um perfil parabólico para a velocidade macroscópica, fato este que é uma característica marcante do fluxo de Poiseuille, do qual trata este trabalho.

Tabela 1: Velocidades para $R = 2$

r/R	$q(r)$
0,0	2,35333
0,1	2,34082
0,2	2,30317
0,3	2,23993
0,4	2,15029
0,5	2,03292
0,6	1,88560
0,7	1,70456
0,8	1,48259
0,9	1,20253
1,0	0,76517

Tabela 2: Velocidades e Taxas de Fluxo

R	$q(R)$	Q
0,01	5,48219(-3)	1,47631
0,03	1,59193(-2)	1,44827
0,05	2,59187(-2)	1,43052
0,1	4,97047(-2)	1,40396
0,3	1,36214(-1)	1,37621
0,5	2,16201(-1)	1,38665
1,0	4,04069(-1)	1,45829
1,5	5,86448(-1)	1,55323
2,0	7,65173(-1)	1,65765
3,0	1,11911	1,87999
5,0	1,82346	2,34833

- Simulações subsequentes tem mostrado também um resultado eficiente para utilização desta técnica na solução de outros problemas, como os de fluxo derivados de gradiente de temperatura. Além disso, seguindo trabalhos anteriores [3] tem-se investigado também a utilização de outra técnica, baseada no uso de Polinômios de Legendre, que no entanto, necessita de um trabalho analítico um pouco maior antes da obtenção dos sistemas a serem avaliados numericamente. De qualquer forma, ambas as técnicas têm se mostrado apropriadas no sentido de poderem ser aplicadas de forma eficiente a uma classe de problemas.

6 Comentários Finais

Uma técnica de solução de uma equação integral, baseada no uso de splines e quadraturas numéricas, associada a um problema clássico da dinâmica de gases rarefeitos foi apresentada. O estudo segue a investigação de uma série de problemas de transporte de partículas para os quais se pretende usar

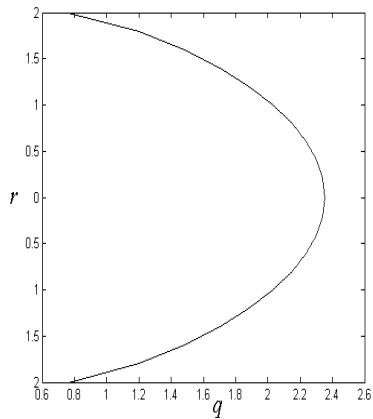


Figura 1: Perfil Parabólico da Velocidade

a modelagem via equação integral. Assim como já observado na solução de outros problemas de interesse, a técnica se mostrou eficiente, embora aspectos numéricos devam ser observados quando uma precisão maior dos resultados é buscada. Em trabalhos futuros a utilização da técnica será estendida a problemas em dutos que apresentem maior dificuldade no tratamento das condições de contorno.

Referências

- [1] L. B. Barichello, M. Camargo, P. Rodrigues and C. E. Siewert, *Unified Solutions to Classical Flow Problems Based on the BGK Model*, *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)*, vol. 52, pp. 517, (2001).
- [2] L. B. Barichello, M. Camargo, P. Rodrigues and C. E. Siewert, *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, (2002).
- [3] L. B. Barichello, P. Rodrigues and C. E. Siewert, *On Computing the Chapman-Enskog and Burnett Functions*, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 86, pp. 109, (2004).
- [4] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross and M. Krook, *A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems*, *Physical Review*, vol. 94, pp. 511, (1954).
- [5] C. Cercignani, *Mathematical Methods in Kinetic Theory*, Plenum Press, New York, 1969.
- [6] C. Cercignani, *The Boltzmann Equation and Its applications*, Springer-Verlay, Lectures Series in Mathematics, vol. 68, 1988.
- [7] J. J. Dongarra, J. R. Bunch, C. B. Moler and G. W. Stewart, *LINPACK User's Guide*, Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM, Philadelphia, 1979.
- [8] M. Gad-el-Hak, *The MEMS Handbook. Mechanical Engineering Handbook Series, Second Edition*, vol. 1 (2005).
- [9] G. J. Mitsis, *Transport Solutions to the Monoenergetic Critical Problems*, Report ANL-6787, Chicago, Argonne National Laboratory, 1963.
- [10] P. Rodrigues and L. B. Barichello, *An Integral Equation Approach to Radiative Transfer in Cylindrical Media*, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 33, pp. 765, (2004).
- [11] M. N. Schultz, *Spline Analysis*, Englewood Cliffs, NJ. Prentice-Hall. 1973.
- [12] C. E. Siewert, *Poiseuille and Thermal-Creep Flow in a Cylindrical Tube*, *Journal of Computational Physics*, vol. 160, pp. 470, (2000).
- [13] M. M. R. Williams, *Mathematical Methods in Particle Transport Theory*, Butterworth, London, 1971.