

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

Derivação e Solução de Equações Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos

por

Luciana Chimendes Cabrera

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Liliâne Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, março de 2003.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Cabrera, Luciana Chimendes

Derivação e Solução de Equações Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos / Luciana Chimendes Cabrera.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2003.

120 p. : il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2003.

Orientadora: Barichello, Liliane Basso

Dissertação: Matemática Aplicada
Equação Linearizada de Boltzmann, Equações Modelo,
Método de Ordenadas Discretas

Derivação e Solução de Equações Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos

por

Luciana Chimendes Cabrera

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte e Transformadas Integrais

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Banca examinadora:

Prof. Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho
LAC/INPE

Prof. Dr. Oleg Khatchatourian
DeFEM/UNIJUI

Profa. Dra. Mariza de Camargo
DMAT/URI-FW

Prof. PhD Leandro Farina
PPGMAp/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
14 de março de 2003.

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Coordenador

*Aos meus filhos,
Cléber Luiz e Cecília,
sementinhas de ternura
em nossa vida...*

AGRADECIMENTO

Muitas realizações em nossa vida não dependem unicamente do nosso empenho e dedicação, mas estão relacionadas a pessoas que estão ao nosso lado nos oferecendo todas as condições para alcançá-las.

Assim, agradeço a professora Dra. Liliane Basso Barichello pelo constante incentivo e compreensão que foram imprescindíveis na realização deste trabalho. Sua dedicação e entusiasmo consegue sempre nos levar além do que pensávamos ser capazes. Por tudo isso, obrigada professora. E acima de tudo, obrigada pela amizade.

A minha família, também agradeço carinhosamente. É sempre bom sentir a presença companheira, afetiva e vibrante de todos vocês. Somente com esse apoio é que consegui vencer as dificuldades e concluir este trabalho. Em especial, agradeço ao Cléber Luiz e a Cecília pelo abraço e pelo sorriso reanimador de cada dia.

Aos professores, da graduação e da pós-graduação, um carinhoso obrigado pelas importantes contribuições na minha formação. Em especial, agradeço ao meu professor da graduação, na Universidade Federal de Santa Maria, Prof. Primo Manoel Brambilla, a quem tenho muita estima e admiração; jamais esquecerei todas suas orientações e incentivos...

Aos colegas da pós-graduação agradeço pela convivência amiga e, sobretudo, enriquecedora, sempre apoiando, animando e dividindo tanto as alegrias, quanto as dificuldades.

E a Deus agradeço pela vida, pela gratificante oportunidade de complementar minha formação e, em especial, por todas as pessoas que não estou citando, mas que de muitas formas: pelo carinho, pelo apoio, pelo companheirismo, pela amizade, pela acolhida... contribuíram muito na conclusão dessa etapa da minha formação.

ÍNDICE

LISTA DE SÍMBOLOS	x
LISTA DE TABELAS	xii
LISTA DE FIGURAS	xiii
RESUMO	xiv
ABSTRACT	xv
1 INTRODUÇÃO	1
2 EQUAÇÃO LINEARIZADA DE BOLTZMANN	6
2.1 Formulação Matemática	6
2.2 Livre Caminho Médio	10
2.3 Soluções da Equação Linearizada de Boltzmann	12
2.4 O modelo CES	16
2.5 O modelo CLF	21
2.6 O modelo CEBS	24
3 O MODELO S	30
3.1 Definição da equação modelo	30
3.2 Formulação vetorial do modelo	35
4 PROBLEMAS NA DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS	38
4.1 Problemas num canal plano	38
4.1.1 Fluxo de Couette	38
4.1.2 Fluxo de Poiseuille	40
4.1.3 “Creep” Térmico	42
4.2 Problemas em meio semi-infinito	44
4.2.1 Deslizamento Térmico	44

4.2.2	Problema de Kramers	45
5	SOLUÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS	47
5.1	Uma reformulação dos problemas	47
5.2	Soluções particulares	50
5.3	Solução em ordenadas discretas	52
6	APLICAÇÕES	56
6.1	Problemas num canal plano	56
6.1.1	Fluxo de Couette	56
6.1.2	Fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico	59
6.2	Problemas em meio semi-infinito	62
6.2.1	Deslizamento Térmico	63
6.2.2	Problema de Kramers	64
7	RESULTADOS NUMÉRICOS	66
7.1	Descrição Geral	66
7.2	Resultados das soluções em ordenadas discretas	67
7.2.1	Fluxo de Couette	68
7.2.2	Fluxo de Poiseuille	71
7.2.3	“Creep” Térmico	72
7.2.4	Deslizamento Térmico e Problema de Kramers	75
8	CONSIDERAÇÕES FINAIS	78
ANEXO A	SOLUÇÃO GERAL DA EQUAÇÃO LINEARIZADA DE BOLTZMANN NO ESTADO ESTACIONÁRIO	80
A.1	Definição do problema	80
A.2	Redução a um problema de autovalores	81
A.3	Resultados Básicos	88

A.3.1	Teorema 1	88
A.3.2	Teorema 2	91
ANEXO B	RELAÇÃO DE ONSAGER	95
ANEXO C	CARACTERIZAÇÃO DO NÚMERO DE KNUDSEN	99
BIBLIOGRAFIA		100

LISTA DE SÍMBOLOS

A_p	Coeficiente de deslizamento viscoso
A_t	Coeficiente de deslizamento térmico
\mathbf{c}	Vetor velocidade
f_0	Distribuição Maxwelliana
$F(\mathbf{c}' : \mathbf{c})$	Núcleo de espalhamento sintético
f_n	Componentes aproximadas do núcleo de espalhamento sintético
h	Perturbação causada a distribuição Maxwelliana
$J(f', f)$	Operador de colisão da equação de Boltzmann
k	Constante de Boltzmann
Kn	Número de Knudsen
$K(\mathbf{c}' : \mathbf{c})$	Núcleo de espalhamento exato
k_n	Componentes exatas do núcleo de espalhamento
l	Livre caminho médio
L	Operador de colisão da Equação Linearizada de Boltzmann
Pr	Número de Prandtl
P_{xy}	Componente do tensor de pressão
$q(x)$	Perfil de fluxo de calor
Q	Taxa de fluxo de calor
\mathbf{r}	Vetor posição
$\mathbf{S}(\mathbf{c})$	Termo de fonte
u_w	Velocidade da placa
$u(x)$	Perfil de velocidade
U	Taxa de fluxo de partículas
$v(c)$	Frequência de colisão das partículas
w_k	Pesos da quadratura
α	Coeficiente de acomodação
λ_*	Condutividade térmica
μ_*	Viscosidade
ν	Constantes de separação
ξ_k	Pontos da quadratura
ψ_α	Invariantes por colisão

Subscritos das quantidades de interesse

- p* relacionado ao problema de fluxo de Poiseuille
t relacionado ao problema de “Creep” Térmico
c relacionado ao fluxo de Couette
k relacionado ao problema de Kramers
d relacionado ao problema de Deslizamento Térmico

Abreviaturas

ADO	(<i>Analytical Discrete Ordinates</i>)	Método Analítico de Ordenadas discretas
BE	(<i>Boltzmann Equation</i>)	Equação de Boltzmann
LBE	(<i>Linearized Boltzmann Equation</i>)	Equação Linearizada de Boltzmann
RGD	(<i>Rarefied Gas Dynamics</i>)	Dinâmica de gases rarefeitos

LISTA DE TABELAS

Tabela 7.1	Fluxo de Couette com $u_w = 1$: perfil de velocidade u_c e de fluxo de calor q_c para o caso $2a = 1$ e $\alpha = 1.0$	68
Tabela 7.2	Fluxo de Couette com $u_w = 1$: perfil de velocidade $-u_c$ para o caso $2a = 1$	69
Tabela 7.3	Fluxo de Couette com $u_w = 1$: perfil de fluxo de calor q_c para o caso $2a = 1$	69
Tabela 7.4	Fluxo de Couette com $u_w = 1$: taxa de fluxo de partículas U_c	70
Tabela 7.5	Fluxo de Couette com $u_w = 1$: taxa de fluxo de calor Q_c	70
Tabela 7.6	Fluxo de Couette com $u_w = 1$: componente do tensor de pressão P_{xy} , para o caso $\alpha = 1.0$	70
Tabela 7.7	Fluxo de Poiseuille : perfil de velocidade u_p para o caso $2a = 2$	71
Tabela 7.8	Fluxo de Poiseuille: taxa de fluxo de partículas U_p	72
Tabela 7.9	“Creep” Térmico: perfil de velocidade u_t para o caso $2a = 2$	73
Tabela 7.10	“Creep” Térmico: taxa de fluxo de partículas U_t	73
Tabela 7.11	Fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico: perfil de fluxo de calor q_p e q_t para o caso $2a = 2$	74
Tabela 7.12	Fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico: taxa de fluxo de calor Q_p e Q_t	75
Tabela 7.13	Deslizamento Térmico: perfil de velocidade u_d	76
Tabela 7.14	Coefficientes de deslizamento térmico A_t e de deslizamento viscoso A_p	76
Tabela 7.15	Problema de Kramers: perfil de velocidade u_k	77

LISTA DE FIGURAS

Figura C.1	Caracterização dos regimes de escoamento de um gás.	99
------------	---	----

RESUMO

Derivação e solução de Equações Modelo na Dinâmica de Gases Rarefeitos

Neste trabalho, duas equações modelo na área da dinâmica de gases rarefeitos, são derivadas a partir de algumas soluções exatas da equação linearizada de Boltzmann homogênea e não homogênea. Em adição, uma versão analítica do método de ordenadas discretas é usado para resolver problemas clássicos nesta área, descritos pelo “Modelo S”. Resultados numéricos são apresentados para os problemas de fluxo de Couette, fluxo de Poiseuille, “Creep” Térmico, Deslizamento Térmico e problema de Kramers.

ABSTRACT

Derivation and solution of model equations in rarefied gas dynamics

In this work two model equations in the general area of rarefied-gas dynamics, are derived from some exact solutions of the homogeneous and the inhomogeneous linearized Boltzmann equation. In addition, an analytical version of the discrete-ordinates method is used to solve classical problems in this area, described by the “S model”. Numerical results are presented for Couette flow, Poiseuille flow, Thermal Creep, Thermal-Slip and Kramers’ problem.

1 INTRODUÇÃO

Os fenômenos que envolvem a dinâmica de gases rarefeitos (RGD: *Rarefied Gas Dynamics*) têm sido o foco de interesse de muitos pesquisadores, estando esse campo científico em desenvolvimento rápido e intensivo [33]. Nota-se que as pesquisas nesta área tem se intensificado nos últimos anos devido a suas várias aplicações; dentre elas podemos citar:

- aplicações em nanotecnologia, relacionada, por exemplo, a micro-máquinas [1] e a micro-fluidos [50];
- estudo de fenômenos da transpiração térmica [27], existentes em escoamentos internos produzidos por um gradiente de temperatura ou pressão, que aplicam-se em sistemas micro-elétricos-mecânicos [32];
- estudos aerodinâmicos [20] e equipamentos de vácuo [33];
- mecânica de aerossóis [53, 56].

Além disso, o estudo de escoamentos internos de gases assume um papel importante e significativo também do ponto de vista teórico [33], pois conforme citado por Siewert [43], o estudo de problemas básicos definidos em um canal plano finito, como: Fluxo de Poiseuille, Fluxo de Couette e “Creep” Térmico, são importantes na avaliação de novos modelos cinéticos da equação linearizada de Boltzmann (LBE: *Linearized Boltzmann Equation*) ou mesmo de novos métodos computacionais.

Apesar desses problemas já virem sendo investigados ao longo dos anos [13, 25, 26, 46], tendo em vista as recentes aplicações mencionadas acima, torna-se necessário continuar a investigação sobre modelos matemáticos e métodos computacionais para tratamento dos problemas da dinâmica de gases rarefeitos, pois atualmente se dispõem de recursos computacionais mais modernos e apropriados, bem como formulações mais elaboradas para os modelos cinéticos.

Em geral a caracterização da rarefação de um gás é feita através do número de Knudsen

$$Kn = \frac{l}{a_*},$$

onde l é o livre caminho médio (distância média viajada por uma molécula entre colisões) e a_* é um comprimento característico. Assim se distingue três regimes de escoamento de um gás. Se o número de Knudsen é muito pequeno ($Kn \ll 1$), então o livre caminho médio é tão pequeno que o gás pode ser considerado como um meio contínuo. Este regime é chamado de hidrodinâmico. Se o número de Knudsen é muito grande ($Kn \gg 1$), o livre caminho médio é tão grande que as colisões das moléculas com as paredes ocorrem mais freqüentemente do que as colisões entre as moléculas. Nestas condições, considera-se que as moléculas movem-se independentemente uma das outras e encontram-se no regime molecular livre. Quando o número de Knudsen assume um valor intermediário o regime é chamado de transição. Tal caracterização também pode ser associada com os números de Reynolds e Mach [veja Anexo C].

O ponto fundamental da RGD encontra-se na equação de Boltzmann (BE: *Boltzmann Equation*), ou sua forma linearizada, pois em muitos casos o gás está em regime de transição e as equações hidrodinâmicas de Navier-Stokes não podem ser aplicadas [33]. Neste contexto, os livros de Cercignani [14, 16] e Williams [54], são um excelente material na área da dinâmica de gases, bem como um recente trabalho de Sharipov e Seleznev [33] (este trabalho também pode ser acessado pela página www.sharipov.com.br) que, além de fornecer uma ampla revisão, é também uma fonte de dados muito útil na comparação de diferentes métodos computacionais e diferentes formulações matemáticas básicas nessa área.

No entanto, devido a complexidade da equação linearizada de Boltzmann (LBE: *Linearized Boltzmann Equation*) [54], a abordagem de problemas da RGD considerando essa equação apresenta certas dificuldades, tornando-se difícil

obter soluções analíticas e mesmo resultados numéricos, com o uso de supercomputadores, somente têm sido obtidos para casos relativamente simples [33].

Para contornar essa dificuldade, outras abordagens para a solução da LBE têm sido propostas na literatura.

A idéia principal, dessas novas abordagens, consiste em simplificar a integral de colisão da LBE, mantendo suas principais propriedades e usar um método exato de solução para se resolver a equação aproximada. A expressão que simplifica a integral de colisão é chamada de modelo de colisão, enquanto a equação aproximada é considerada equação cinética ou equação modelo.

Historicamente, a idéia de uma equação modelo foi proposta por Bhatnagar, Gross e Krook (BGK) [10] e independentemente por Welander [52]. Muitos outros modelos têm sido propostos para tratar de problemas clássicos relacionados a dinâmica de gases rarefeitos, como por exemplo, o modelo proposto por Shakhov (modelo S) [31] e o modelo devido a Cercignani [13], Loyalka e Ferziger (CLF) [25]. Os modelos BGK e S, caracterizam-se basicamente por serem modelos onde a frequência de colisão das partículas de gás é constante, enquanto no modelo CLF a frequência de colisão é variável.

Neste trabalho, pretende-se estudar dois novos modelos recentemente propostos por Barichello e Siewert [9]: o modelo CES e o modelo CEBS. Estes modelos baseiam-se nas soluções exatas da LBE para construção de dois núcleos sintéticos. O primeiro modelo é definido em termos dos invariantes por colisão [16] e das equações de Chapman-Enskog [26] para viscosidade e condutividade térmica; o segundo, como uma extensão do modelo CES, inclui também a primeira e a segunda função de Burnett [26].

Formuladas as equações modelos, pretende-se derivar problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos, como fluxo de Poiseuille, fluxo de Couette, “Creep” Térmico, problema de Kramers e Deslizamento Térmico, baseados num caso particular do modelo CES: o modelo S. Ressalta-se que, neste trabalho, busca-

se descrever as soluções dos problemas de maneira unificada, ou seja, a partir da aplicação do método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO: *Analytical Discrete Ordinates*) pretende-se usar a mesma formulação para descrever e resolver todos problemas mencionados.

No contexto dos métodos determinísticos, o método de ordenadas discretas vem sendo usado para resolver problemas da teoria de transporte. Segundo Garcia [21], a versão original do método de ordenadas discretas foi introduzida por Wick e Chandrasekhar [17] e tem como base a aproximação da integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma quadratura numérica.

Neste trabalho, aplica-se uma versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) desenvolvida por Barichello e Siewert [6], que difere basicamente da proposta de Chandrasekhar pelo uso de um esquema de quadratura mais arbitrário e pela determinação das constantes de separação através da resolução de um problema de autovalores. Imediatamente após o desenvolvimento dessa nova versão, Barichello et al [4] propuseram, com base na função de Green, uma técnica para encontrar soluções particulares de versões não homogêneas da equação em ordenadas discretas.

A partir então desta reformulação do método de ordenadas discretas, vários problemas da dinâmica de gases rarefeitos foram solucionados pela aplicação do método ADO, como por exemplo:

- fluxo de Poiseuille em canal plano descrito pelo modelo BGK [7];
- problema de salto de temperatura descrito segundo o modelo BGK [8] e segundo o modelo CLF [2];
- fluxo de Poiseuille e o problema “Creep” Térmico, também descritos pelo modelo BGK, em geometria cilíndrica [42];
- solução unificada de problemas clássicos de gases rarefeitos baseados no modelo BGK [3];

- fluxo de Poiseuille, “Creep” Térmico e Couette, descritos segundo o modelo CES [43];
- fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico com o modelo S e condições de contorno de Cercignani-Lampis [37];
- fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico com o modelo S [49];
- fluxo de Couette para mistura de dois gases num canal plano, com o modelo BGK [35];
- e mais recentemente, outros problemas relacionados a BE propriamente dita [34, 39] (ver também o site www.chucksiewert.com) têm sido abordados e resolvidos com precisão através do ADO.

Na busca de obtenção de resultados numéricos comparativos entre equações modelos, estende-se, neste trabalho, a aplicação do método ADO para resolver de maneira unificada problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos, que são aqui derivados segundo o modelo S. Diferentemente da Ref. [37], considera-se o processo difuso-especular para descrever a interação entre o gás e a parede. Ainda, além da abordagem dos problemas de Poiseuille e “Creep” Térmico, presentes nas Refs. [37, 49], inclui-se neste trabalho a abordagem dos problemas de Couette, Deslizamento Térmico e Kramers, que segundo nosso conhecimento não estão disponíveis na literatura.

Assim, no capítulo 2, apresenta-se dois novos modelos: o modelo CES e o modelo CEBS. A descrição de algumas características e a formulação do modelo S são apresentadas no capítulo 3; no capítulo 4 são apresentados os problemas que se pretende resolver e suas formulações segundo o modelo S. As soluções particulares e a descrição das soluções em ordenadas discretas são apresentadas no capítulo 5 e, no capítulo 6, se especifica a solução de cada problema, bem como as quantidades de interesse relacionadas a cada um deles. Os resultados numéricos são apresentados e comentados no capítulo 7 e finalmente algumas considerações finais são apresentadas no capítulo 8.

2 EQUAÇÃO LINEARIZADA DE BOLTZMANN

Uma das maiores dificuldades ao se trabalhar com a equação linearizada de Boltzmann, se deve a complicada estrutura da integral de colisão. Assim, muitas expressões alternativas mais simples têm sido propostas para substituir este termo e são chamadas modelos de colisão [33]. A idéia dessa substituição, conforme Cercignani [16], consiste em determinar um operador de colisão, com uma estrutura mais simples, mas que mantenha as principais propriedades do operador verdadeiro.

Assim muitos métodos satisfatórios e sistemáticos para construção de modelos tem sido empregados, como por exemplo, na formulação dos modelos CES e CEBS, recentemente propostos por Barichello e Siewert [9].

Pretende-se então nesse capítulo apresentar-se estes dois modelos: o modelo CES, cujo núcleo de espalhamento sintético baseia-se no uso das soluções exatas da LBE homogênea e das equações integrais de Chapman-Enskog para viscosidade e condutividade térmica [28] e, como uma extensão, apresenta-se o modelo CEBS, que inclui as soluções particulares de alguns problemas da dinâmica de gases rarefeitos e as funções de Burnett [26].

Nota-se ainda que os modelos CLF, BGK e S podem ser obtidos como casos especiais do modelo CES.

2.1 Formulação Matemática

O estado de um gás rarefeito monoatômico é descrito por uma função distribuição de partículas $f(\mathbf{r}, \mathbf{c})$, onde \mathbf{r} é um vetor de coordenadas espaciais e $\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)$ é o vetor velocidade das partículas.

A função distribuição de partículas $f(\mathbf{r}, \mathbf{c})$ satisfaz a equação integro-diferencial não linear de Boltzmann [55]

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

onde $J(f', f)$ representa o operador de colisão [54] e f e f' são, respectivamente, as funções de distribuições de partículas antes e após as colisões.

Seguindo Barichello e Siewert [9], pretende-se trabalhar com a equação linearizada de Boltzmann unidimensional e no estado estacionário. Assim, para situações fracamente fora do equilíbrio [54], escreve-se a função distribuição na forma

$$f(x, \mathbf{c}) = f_0(\mathbf{c})[1 + h(x, \mathbf{c})], \quad (2.2)$$

onde $c(2kT_0/m^{1/2})$ é a magnitude da velocidade da partícula, x é a variável espacial (medida em cm) e $h(x, \mathbf{c})$ é uma perturbação causada a distribuição Maxwelliana

$$f_0(c) = n_0 [m/(2\pi kT_0)]^{3/2} e^{-c^2}. \quad (2.3)$$

Aqui n_0 é a densidade (constante) das partículas de gás, m a massa, k é a constante de Boltzmann e T_0 é a temperatura (constante) de referência.

Usando-se a linearização proposta, Eq.(2.2), na Eq. (2.1) e ainda considerando-se propriedades de simetria da função frequência de espalhamento diferencial para a colisão de dois corpos [11, 55], obtém-se a equação de balanço

$$c\mu \frac{\partial}{\partial x} h(x, \mathbf{c}) = \sigma^2 n_0 \pi^{1/2} L\{h\}(x, \mathbf{c}). \quad (2.4)$$

Seguindo a referência [9], considera-se que σ é o diâmetro de colisão das partículas de gás (na aproximação de esferas rígidas [54]) e que o operador de colisão é descrito por

$$L\{h\}(x, \mathbf{c}) = -v(c)h(x, \mathbf{c}) + \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} h(x, \mathbf{c}') K(\mathbf{c}, \mathbf{c}') c'^2 d\chi' d\mu' dc', \quad (2.5)$$

onde $v(c)$ é a frequência de colisão, $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ é o núcleo de espalhamento e coordenadas esféricas $(c, \arccos \mu, \chi)$ são usadas para definir o vetor velocidade.

Para descrever o núcleo de espalhamento, que define a Eq. (2.5), Pekeris e Alterman [28] propõem uma expansão em termos dos polinômios de Legendre (como funções do ângulo de espalhamento entre as direções “antes” e “depois”). Com o uso do teorema da adição dos harmônicos esféricos, escreve-se o núcleo de espalhamento na forma [28]

$$K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \left(\frac{2n+1}{2} \right) (2 - \delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) k_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi), \quad (2.6)$$

onde as funções de Legendre *normalizadas* são escritas como

$$P_n^m(\mu) = \left[\frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right]^{1/2} (1 - \mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_n(\mu), \quad n \geq m \quad (2.7)$$

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

$$\int_{-1}^1 P_n^m(\mu) P_{n'}^m(\mu) d\mu = \left(\frac{2}{2n+1} \right) \delta_{n,n'}. \quad (2.8)$$

Notando que, para todo n , $k_n(c', c) = k_n(c, c')$, Barichello e Siewert [9] apresentam expressões para os elementos $k_n(c', c)$, presentes na expansão do núcleo

de espalhamento, para $n = 0, 1, 2, 3$, com $c' < c$

$$-(1/2)c'ck_0(c', c) = (2/3)c'^3 + 2c'c^2 - 4P(c'), \quad (2.9)$$

$$-(1/2)c'^2c^2k_1(c', c) = (2/15)c'^5 - 4c' - (2/3)c'^3c^2 - 4(c'^2 - 1)P(c'), \quad (2.10)$$

$$-(1/2)c'^3c^3k_2(c', c) = a_2(c', c) + b_2(c', c)P(c'), \quad (2.11)$$

$$-(1/2)c'^4c^4k_3(c', c) = a_3(c', c) + b_3(c', c)P(c'), \quad (2.12)$$

onde considera-se

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

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

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

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

e

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

2.2 Livre Caminho Médio

Introduzindo o conceito de livre caminho médio l , considera-se a variável adimensional $\tau = x/l$ e reescreve-se a Eq. (2.4) na seguinte forma

$$c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon L\{h\}(\tau, \mathbf{c}), \quad (2.18)$$

onde o operador L é definido pela Eq. (2.5) e o parâmetro ε fica definido por

$$\varepsilon = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} l. \quad (2.19)$$

Nota-se, neste ponto, que a expressão para o livre caminho médio será ainda determinada.

Na literatura, encontra-se que a determinação do livre caminho médio pode ser feita em termos da viscosidade ou da condutividade térmica. Loyalka e Hickey [26] expressam o livre caminho médio em termos da viscosidade μ_*

$$l = l_p = (\mu_*/p_0)(2kT_0/m)^{1/2}, \quad (2.20)$$

onde $p_0 = n_0 kT_0$ é a pressão. Utilizando-se a definição da viscosidade, dada por Pekeris e Alterman [28]

$$\mu_* = \frac{8(2mkT_0)^{1/2}}{15\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2} b(c) c^6 dc, \quad (2.21)$$

pode-se então obter, a partir da Eq. (2.19)

$$\varepsilon = \varepsilon_p = \frac{16}{15} \pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} b(c) c^6 dc. \quad (2.22)$$

Na Eq. (2.21), a função $b(c)$ é solução da equação integral de Chapman-Enskog para viscosidade

$$v(c)c^2b(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2}b(c')k_2(c',c)c'^4 dc' = c^2. \quad (2.23)$$

Em termos da condutividade térmica, Loyalka e Ferziger [25] expressam o livre caminho médio por

$$l = l_t = (4\lambda_*/5n_0k)(m/2kT_0)^{1/2}. \quad (2.24)$$

Como a condutividade térmica pode ser expressa [28] na forma

$$\lambda_* = \frac{4k(2kT_0/m)^{1/2}}{3\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2}a(c)c^6 dc, \quad (2.25)$$

onde $a(c)$ é solução da equação de Chapman-Enskog para a condutividade térmica

$$v(c)ca(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2}a(c')k_1(c',c)c^3 dc' = c(c^2 - 5/2), \quad (2.26)$$

pode-se determinar, usando as Eqs. (2.24) e (2.25) na Eq. (2.19)

$$\varepsilon = \varepsilon_t = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2}a(c)c^6 dc. \quad (2.27)$$

Para avaliar-se as expressões de ε_p e ε_t , dados pela Eqs. (2.22) e (2.27), considera-se os resultados numéricos obtidos nas Refs. [30, 41] ao resolverem as

equações integrais de Chapman-Enskog para viscosidade e condutividade térmica e determina-se

$$\varepsilon_p = 0.449027806... \quad (2.28)$$

e

$$\varepsilon_t = 0.679630049... \quad (2.29)$$

Na próxima seção, apresenta-se algumas soluções exatas da equação linearizada de Boltzmann que serão básicas na busca de condições para determinar-se os núcleos sintéticos das equações modelo que se deseja obter.

2.3 Soluções da Equação Linearizada de Boltzmann

Para que se tenha conservação de massa, momento e energia, o núcleo de espalhamento $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ da Eq. (2.5) deve satisfazer

$$v(c)\mathbf{M}(c, \mu, \chi) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} \mathbf{M}(c', \mu', \chi') K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) c'^2 d\chi' d\mu' dc' \quad (2.30)$$

onde

$$\mathbf{M}(c, \mu, \chi) = \begin{bmatrix} 1 \\ c\mu \\ c(1 - \mu^2)^{1/2} \cos \chi \\ c(1 - \mu^2)^{1/2} \sin \chi \\ c^2 \end{bmatrix}. \quad (2.31)$$

Nota-se que os elementos de $\mathbf{M}(c, \mu, \chi)$ são os chamados invariantes por colisão [14, 16] mencionados no Anexo A desse trabalho.

Agora, substituindo-se a forma de $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$, dada na Eq. (2.6), na Eq. (2.30), obtém-se três condições para a frequência de colisão

$$v(c) = \int_0^\infty e^{-c'^2} k_0(c', c) c'^2 dc', \quad (2.32)$$

$$v(c)c = \int_0^\infty e^{-c'^2} k_1(c', c) c'^3 dc', \quad (2.33)$$

$$v(c)c^2 = \int_0^\infty e^{-c'^2} k_0(c', c) c'^4 dc'. \quad (2.34)$$

Usando ainda as expressões para as componentes k_0 , definidas em (2.9) e k_1 , definida em (2.10), verifica-se as Eqs. (2.33) e (2.34) e usando-se as Eqs. (2.9) e (2.32) encontra-se para a frequência de colisão

$$v(c) = \frac{2c^2 + 1}{c} \int_0^c e^{-x^2} dx + e^{-c^2}. \quad (2.35)$$

Tendo cinco soluções exatas da LBE (2.18), consideradas aqui como

$$h_1(\tau, \mathbf{c}) = 1, \quad (2.36)$$

$$h_2(\tau, \mathbf{c}) = c\mu, \quad (2.37)$$

$$h_3(\tau, \mathbf{c}) = c(1 - \mu^2)^{1/2} \cos \chi, \quad (2.38)$$

$$h_4(\tau, \mathbf{c}) = c(1 - \mu^2)^{1/2} \text{sen} \chi, \quad (2.39)$$

$$h_5(\tau, \mathbf{c}) = c^2 - 5/2. \quad (2.40)$$

e que são independentes da variável espacial, pode-se então determinar, seguindo pensamento análogo ao caso de transporte de neutrons [12], outras soluções que sejam lineares na variável espacial. Três dessas soluções são apresentadas por Barichello e Siewert [9]

$$h_3^*(\tau, \mathbf{c}) = c(1 - \mu^2)^{1/2} \cos \chi[\varepsilon\tau - \mu cb(c)], \quad (2.41)$$

$$h_4^*(\tau, \mathbf{c}) = c(1 - \mu^2)^{1/2} \operatorname{sen} \chi[\varepsilon\tau - \mu cb(c)], \quad (2.42)$$

$$h_5^*(\tau, \mathbf{c}) = (c^2 - 5/2)\varepsilon\tau - \mu ca(c), \quad (2.43)$$

onde $a(c)$ e $b(c)$ são soluções das equações integrais de Chapman-Enskog já mencionadas anteriormente nas Eqs. (2.23) e (2.26).

Nota-se que, enquanto Cercignani [16] tem expressado três propostas de soluções lineares na variável espacial de uma forma diferente e menos explícita, como apresentado no Anexo A, estas três soluções são combinações lineares das apresentadas nas Eqs. (2.41)–(2.43).

Observando-se a forma das equações integrais (2.23) e (2.26) define-se uma classe de equações integrais, dentre as quais as equações para a viscosidade e condutividade térmica podem ser consideradas como um caso particular

$$\mathcal{L}_n\{f\}(c) = r(c), \quad c \in [0, \infty), \quad (2.44)$$

onde $r(c)$ é considerado um termo conhecido e \mathcal{L}_n é definido por

$$\mathcal{L}_n\{f\}(c) = v(c)f(c) - \int_0^\infty e^{-x^2} f(x) k_n(x, c) x^2 dx. \quad (2.45)$$

Desta forma, as equações de Chapman-Enskog podem então serem reescritas como

$$\mathcal{L}_2\{c^2 b\}(c) = c^2 \quad (2.46)$$

e

$$\mathcal{L}_1\{ca\}(c) = c(c^2 - 5/2). \quad (2.47)$$

Dentro desta classe, também pode-se incluir as Eqs. (2.32)–(2.34) e reescrevê-las na forma

$$\mathcal{L}_0\{1\}(c) = 0, \quad (2.48)$$

$$\mathcal{L}_1\{c\}(c) = 0, \quad (2.49)$$

$$\mathcal{L}_0\{c^2\}(c) = 0, \quad (2.50)$$

para $c \in [0, \infty)$. A partir das Eqs. (2.47) e (2.49), concluí-se que uma constante arbitrária pode ser adicionada a $a(c)$ e assim esta função é geralmente normalizada pela imposição da condição [9]

$$\int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^4 dc = 0. \quad (2.51)$$

As Eqs. (2.48)–(2.50) mostram que a versão homogênea da equação integral (2.44)

$$\mathcal{L}_n\{f\}(c) = 0, \quad c \in (0, \infty), \quad (2.52)$$

tem solução para os casos de $n = 0$ e $n = 1$. Fazendo uso desse fato (e uma

adaptação da alternativa de Fredholm [48]) lista-se condições de solubilidade para a Eq. (2.44)

$$\int_0^\infty e^{-c^2} \begin{bmatrix} 1 \\ c^2 \end{bmatrix} r(c)c^2 dc = 0, \quad n = 0 \quad (2.53)$$

e

$$\int_0^\infty e^{-c^2} r(c)c^3 dc = 0, \quad n = 1. \quad (2.54)$$

Pela forma do núcleo das Eqs. integrais (2.46) e (2.47), estas equações são comumente resolvidas numericamente. Assim, encontra-se na literatura resultados numéricos para as funções de Chapman-Enskog, como os recentemente apresentados por Siewert [41] e Rodrigues [30].

Tem-se então, listadas nas Eqs. (2.36)–(2.40) e (2.41)–(2.43), oito soluções da Eq. (2.18), que são linearmente independentes. Prossegue-se agora no objetivo de, usando estas oito soluções, definir um núcleo sintético $F(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ para aproximar o núcleo exato $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ da LBE (expresso na Eq.(2.6)).

2.4 O modelo CES

Conforme Barichello e Siewert [9], uma simplificação do núcleo de espalhamento não depende somente de um truncamento da expansão do núcleo (2.6), pois mesmo para poucos termos, o problema de se resolver a aproximação resultante da LBE é ainda difícil do ponto de vista numérico. A dificuldade numérica acontece basicamente porque as componentes $k_n(c', c)$, exigidas na Eq. (2.6), tem derivadas descontínuas em $c' = c$ [51], mesmo para valores pequenos de n .

Por estas razões, outras abordagens tem sido propostas na teoria cinética dos gases e são conhecidas como equações modelo. As equações modelo buscam simplificar a expressão do núcleo de espalhamento mantendo as principais características deste termo. O modelo BGK, proposto por Bhatnagar, Gross e

Krook [10], o modelo S, proposto por Shakhov [31] e o modelo CLF, devido a Cercignani, Loyalka e Ferziger [25, 54] são alguns exemplos de modelos encontrados na literatura. Salienta-se que nos modelos BGK e S a frequência de colisão é constante, enquanto no CLF, a frequência de colisão é variável. O modelo de frequência de colisão variável (CLF) foi, em dois trabalhos [2, 36], usado na busca de melhorar resultados básicos avaliados pelo modelo BGK.

Num trabalho mais recente [9], Barichello e Siewert propuseram ainda a extensão do modelo de frequência de colisão variável, usado nas Refs. [2] e [36], buscando substituir as componentes exatas $k_n(c', c)$ por uma aproximação sintética $f_n(c', c)$.

Assim, como proposto em [9], inicialmente trunca-se a Eq. (2.6) e escreve-se o núcleo de espalhamento sintético como

$$F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n \left(\frac{2n+1}{2} \right) (2 - \delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) f_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi), \quad (2.55)$$

onde, em vez de usarmos as componentes exatas $k_n(c', c)$ como na Eq. (2.6), pretende-se usar aproximações sintéticas $f_n(c', c)$, para $N = 2$, da forma

$$f_0(c', c) = A_0(c')A_0(c) + B_0(c')B_0(c), \quad (2.56)$$

$$f_1(c', c) = A_1(c')A_1(c) + B_1(c')B_1(c), \quad (2.57)$$

$$f_2(c', c) = A_2(c')A_2(c), \quad (2.58)$$

onde as funções $\{A_n(x), B_n(x)\}$ serão determinadas.

A equação de balanço aproximada fica então escrita na forma

$$c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c}), \quad (2.59)$$

onde o termo $L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c})$ é

$$L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c}) = -v(c)h(\tau, \mathbf{c}) + \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) c'^2 d\chi' d\mu' dc'. \quad (2.60)$$

Para que a equação modelo (2.59) fique completamente definida, deseja-se determinar as componentes $f_n(c', c)$ do núcleo sintético $F(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ expresso na Eq. (2.55), para $N = 2$. Assim usa-se as Eqs. (2.36)–(2.40) na Eq. (2.55) e encontra-se apenas três condições

$$\int_0^\infty e^{-c'^2} f_0(c', c) c'^2 dc' = v(c), \quad (2.61)$$

$$\int_0^\infty e^{-c'^2} f_0(c', c) c'^4 dc' = v(c) c^2, \quad (2.62)$$

$$\int_0^\infty e^{-c'^2} f_1(c', c) c'^3 dc' = v(c) c. \quad (2.63)$$

Agora substituindo as três soluções listadas nas Eqs. (2.41)–(2.43) na Eq. (2.59), encontra-se as outras duas condições adicionais, que são necessárias para se determinar todas as componentes do novo núcleo sintético

$$\int_0^\infty e^{-c'^2} a(c') f_1(c', c) c'^3 dc' = v(c) c a(c) - c(c^2 - 5/2), \quad (2.64)$$

$$\int_0^\infty e^{-c'^2} b(c') f_2(c', c) c'^4 dc' = v(c) c^2 b(c) - c^2. \quad (2.65)$$

Para se determinar as componentes f_n , $n = 0, 1, 2$, Barichello e Siewert [9] substituem as formas dadas pelas Eqs.(2.56)–(2.58) nas Eqs. (2.61)–(2.65) e obtém para $f_0(c', c)$

$$f_0(c', c) = v(c')v(c)[\omega_{01} + \omega_{02}(c'^2 - \omega)(c^2 - \omega)], \quad (2.66)$$

onde

$$\omega_{01} = \frac{1}{v_2}, \quad \omega_{02} = \frac{v_2}{v_2 v_6 - v_4^2}, \quad \omega = \frac{v_4}{v_2} \quad (2.67)$$

e o termo v_n fica definido por

$$v_n = \int_0^\infty e^{-c^2} v(c) c^n dc. \quad (2.68)$$

De forma análoga, obtém para a componente $f_1(c', c)$

$$f_1(c', c) = \frac{1}{v_4} c' v(c') c v(c) + [a_1 - a_2 - a_3^2/v_4]^{-1} \Delta_1(c') \Delta_1(c), \quad (2.69)$$

onde v_n é definido na Eq. (2.68) e Δ_1 , a_n definidos como segue

$$\Delta_1(c) = v(c)[a_3 c/v_4 - ca(c)] + c(c^2 - 5/2). \quad (2.70)$$

$$a_1 = \int_0^\infty e^{-c^2} v(c) a^2(c) c^4 dc, \quad (2.71)$$

$$a_2 = \int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 dc \quad (2.72)$$

e

$$a_3 = \int_0^\infty e^{-c^2} v(c) a(c) c^4 dc. \quad (2.73)$$

E para a componente $f_2(c', c)$ obtém

$$f_2(c', c) = \frac{1}{v_*} [c'^2 - v(c')c'^2 b(c')] [c^2 - v(c)c^2 b(c)], \quad (2.74)$$

onde o termo v_* é estabelecido por

$$v_* = \int_0^\infty e^{-c^2} b(c) [v(c)c^2 b(c) - c^2] c^4 dc. \quad (2.75)$$

A partir daqui, então, tem-se um modelo da Equação Linearizada de Boltzmann completamente definido

$$c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c}), \quad (2.76)$$

onde o termo $L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c})$ fica definido por

$$L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c}) = -v(c)h(\tau, \mathbf{c}) + \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) c'^2 d\chi' d\mu' dc' \quad (2.77)$$

e o núcleo por

$$F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} v(c')v(c) [\omega_{01} + \frac{3}{v_4} (\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}) + \omega_{02} (c'^2 - \omega)(c^2 - \omega)] + M(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad (2.78)$$

onde

$$M(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{3}{4\pi} [a_1 - a_2 - a_3^2/v_4]^{-1} [(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})/(c'e)] \Delta_1(c') \Delta_1(c) + N(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad (2.79)$$

$$N(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{5}{4\pi v_*} \Delta_2(c') \Delta_2(c) \sum_{m=0}^2 (2 - \delta_{0,m}) P_2^m(\mu') P_2^m(\mu) \cos m(\chi' - \chi) \quad (2.80)$$

e considera-se

$$\Delta_2(c) = c^2 - v(c)c^2b(c), \quad (2.81)$$

$$\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} = c'c \sum_{m=0}^1 (2 - \delta_{0,m}) P_1^m(\mu') P_1^m(\mu) \cos m(\chi' - \chi). \quad (2.82)$$

Notando que o termo $M(\mathbf{c}', \mathbf{c})$, na Eq. (2.78), é resultante do uso das funções de Chapman-Enskog, $a(c)$ e $b(c)$, e das condições listadas nas Eqs. (2.64) e (2.65), este modelo é chamado de Modelo **CES**.

Assim o modelo CES se caracteriza por considerar, na sua derivação, as características das equações integrais de Chapman-Enskog, relevantes para viscosidade e condutividade térmica e também usar aproximações sintéticas para as componentes do núcleo de espalhamento., com ordem de truncamento $N = 2$.

Neste modelo, segundo Barichello e Siewert [9], o núcleo resultante satisfaz algumas condições sugeridas por Loyalka e Ferziger [24].

2.5 O modelo CLF

Observa-se que na derivação do modelo CES, descrita na seção anterior, as equações integrais de Chapman-Enskog para viscosidade e condutividade térmica são relevantes para o desenvolvimento do modelo. No entanto a obtenção das funções $a(c)$ e $b(c)$ requer que se resolva as suas correspondentes equações integrais, o que usualmente é feito por meio de métodos numéricos [30, 41].

Pode-se contornar essa dificuldade propondo-se uma aproximação para essas duas funções, obtendo-se assim um modelo de ordem menor, $N=1$ (que pode ser considerado como um caso particular do modelo CES).

Assim, seguindo [9], desconsidera-se o termo integral nas Eqs. (2.23) e (2.26) obtendo-se assim uma primeira aproximação de $a(c)$ e $b(c)$. Nomeia-se estas estimativas como $a_0(c)$ e $b_0(c)$ e escreve-se

$$a_0(c) = v^{-1}(c)(c^2 - 5/2) + \hat{a} \quad (2.83)$$

e

$$b_0(c) = v^{-1}(c). \quad (2.84)$$

Agora aplicando a condição de normalização listada na Eq. (2.51) para $a_0(c)$, encontra-se

$$\hat{a} = -(8/3)\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} v^{-1}(c)(c^2 - 5/2)c^4 dc. \quad (2.85)$$

Se agora $a_0(c)$ e $b_0(c)$ são usadas no lugar das soluções $a(c)$ e $b(c)$, a Eq. (2.78) se reduz a

$$F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} v(c')v(c) [\omega_{01} + \frac{3}{\nu_4}(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}) + \omega_{02}(c'^2 - \omega)(c^2 - \omega)]. \quad (2.86)$$

Obtém-se assim o modelo chamado CLF (modelo de frequência de colisão variável) [2, 36], ou modelo BGK generalizado [54].

Observado que o modelo CLF pode ser obtido como um caso particular do modelo CES, retorna-se então para a definição do livre caminho médio, ou alternativamente, as escolhas correspondentes de ε definido pela Eq. (2.19). Nota-se que no contexto do modelo CLF, pode-se usar as Eqs.(2.83)–(2.85) nas Eqs.(2.22)

e (2.27) para se encontrar os resultados aproximados

$$\varepsilon_{p,0} = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} v^{-1}(c) c^6 dc, \quad (2.87)$$

$$\varepsilon_{t,0} = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} v^{-1}(c) (c^2 - 5/2)^2 c^4 dc. \quad (2.88)$$

Segundo o modelo CLF, as Eqs. (2.87) e (2.88), produzem respectivamente para os caso BGK [$v(c) = 1$], o caso Williams [$v(c) = c$] e o caso de esferas rígidas [$v(c)$, como dado pela Eq. (2.35)], os seguintes resultados:

$$\varepsilon_{p,0} = 1, \quad \varepsilon_{p,0} = 0.601802222... \quad e \quad \varepsilon_{p,0} = 0.278804053... \quad (2.89)$$

junto com:

$$\varepsilon_{t,0} = 1, \quad \varepsilon_{t,0} = 0.677027500... \quad e \quad \varepsilon_{t,0} = 0.275334588... \quad (2.90)$$

Utilizando esses resultados para se avaliar o número de Prandtl

$$Pr = \varepsilon_p / \varepsilon_t \quad (2.91)$$

nota-se que as três variações do modelo CLF, mencionadas acima, não produzem bons resultados para o número de Prandtl, cujo valor normalmente usado na teoria cinética corresponde a $2/3$ [33].

2.6 O modelo CEBS

Ao definir-se o modelo CES da equação linearizada de Boltzmann, estabeleceu-se cinco condições para o núcleo sintético $F(\mathbf{c}', \mathbf{c})$, propondo que as soluções conhecidas (listadas nas Eqs. (2.36)–(2.43)) da ELB, também fossem soluções da equação modelo.

Sendo assim, para se obter uma equação modelo mais geral, precisa-se de outras condições. Com o propósito de determinar estas condições adicionais, observa-se que problemas clássicos, como o fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico, são normalmente definidos em termos de uma versão não-homogênea da LBE [54], logo deseja-se definir uma nova equação modelo propondo que soluções particulares da LBE sejam também uma solução da equação modelo não-homogênea.

Nesse sentido, adiciona-se termos de fonte na Eq. (2.18) e considera-se o fluxo num canal plano, $\tau \in [-a, a]$, definido por

$$c(1 - \mu^2)^{1/2} \cos \chi [k_1 + k_2(c^2 - 5/2)] + c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon L\{h\}(\tau, \mathbf{c}). \quad (2.92)$$

Aqui as componentes cartesianas da velocidade estão definidas por

$$c_x = c\mu, \quad c_y = c(1 - \mu^2)^{1/2} \sin \chi \quad e \quad c_z = c(1 - \mu^2)^{1/2} \cos \chi \quad (2.93)$$

e os termos de fonte na Eq. (2.92) correspondem ao escoamento do gás devido a um gradiente de pressão [fluxo de Poiseuille: $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$], ou a um gradiente de temperatura [“Creep” Térmico: $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$].

Para essa classe de problemas, considera-se que as informações que deseja-se encontrar podem ser expressas em termos do perfil de velocidade

$$u(\tau) = \pi^{-3/2} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c^2} h(\tau, \mathbf{c})(1 - \mu^2)^{1/2} c^3 \cos \chi d\chi d\mu dc \quad (2.94)$$

e do perfil de fluxo de calor

$$q(\tau) = \pi^{-3/2} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c^2} h(\tau, \mathbf{c})(1 - \mu^2)^{1/2} (c^2 - 5/2) c^3 \cos \chi d\chi d\mu dc. \quad (2.95)$$

Aqui define-se

$$g(\tau) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} h(\tau, \mathbf{c}) \cos \chi d\chi \quad (2.96)$$

e assim, pode-se reescrever as Eqs. (2.94) e (2.95) na forma

$$u(\tau) = \pi^{-1/2} \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-c^2} g(\tau, c, \mu)(1 - \mu^2)^{1/2} c^3 d\mu dc \quad (2.97)$$

e

$$q(\tau) = \pi^{-1/2} \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-c^2} g(\tau, c, \mu)(1 - \mu^2)^{1/2} (c^2 - 5/2) c^3 d\mu dc. \quad (2.98)$$

Como os perfis de velocidade e fluxo de calor têm sido expressos em termos de um momento azimutal de $h(\tau, \mathbf{c})$, multiplica-se a Eq. (2.92) por $\cos \chi$, integra-se sobre todo χ e considera-se

$$g(\tau, c, \mu) = (1 - \mu^2)^{1/2} \psi(\tau, c, \mu) \quad (2.99)$$

para se obter a equação não homogênea

$$c[k_1 + k_2(c^2 - 5/2)] + c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\tau, c, \mu) = \varepsilon L_1^* \{\psi\}(\tau, c, \mu), \quad (2.100)$$

onde

$$L_1^* \{\psi\}(\tau, c, \mu) = -v(c)\psi(\tau, c, \mu) + \int_0^\infty e^{-c'^2} \psi(\tau, c', \mu') k(c', \mu' : c, \mu) c'^2 d\mu' dc' \quad (2.101)$$

e o termo $k(c', \mu' : c, \mu)$ é definido por

$$k(c', \mu' : c, \mu) = (1 - \mu'^2) \sum_{n=1}^{\infty} \Pi_n(\mu') \Pi_n(\mu) k_n(c', c). \quad (2.102)$$

Aqui os polinômios

$$\Pi_n(\mu) = \left[\frac{2n+1}{2n(n+1)} \right]^{1/2} \frac{d}{d\mu} P_n(\mu), \quad n \geq 1, \quad (2.103)$$

são tais que

$$\int_{-1}^1 (1 - \mu^2) \Pi_n(\mu) \Pi_{n'}(\mu) d\mu = \delta_{n,n'}. \quad (2.104)$$

Como a Eq. (2.100) tem um termo de fonte, deseja-se definir soluções particulares correspondentes aos dois casos especiais: $k_1 = 1$, $k_2 = 0$ e $k_1 = 0$, $k_2 = 1$, que são próprios dos problemas de Poiseuille e “Creep” Térmico, respectivamente.

Considerando-se primeiramente o caso do “Creep” Térmico, Barichello e Siewert [9] propõem uma solução particular que tenha dependência somente em c , encontrando

$$\psi_{ps}(\tau, c, \mu) = -ca(c)/\varepsilon, \quad k_1 = 0, \quad k_2 = 1, \quad (2.105)$$

onde $a(c)$ é definido pela equação de Chapman-Enskog para condutividade térmica (2.26).

Em relação ao caso do fluxo de Poiseuille, notando que o termo de fonte é ele próprio uma solução da equação homogênea, Barichello e Siewert [9] propõem como solução particular

$$\psi_{ps}(\tau, c, \mu) = [A(c)\tau^2 + D(c)]\Pi_1(\mu) + B(c)\tau\Pi_2(\mu) + E(c)\Pi_3(\mu). \quad (2.106)$$

Substituindo a Eq. (2.106) na Eq. (2.100), obtém-se

$$\psi_{ps}(\tau, c, \mu) = [c(\varepsilon\tau)^2 - 2c^2b(c)\varepsilon\tau\mu + c^3d(c)/5 + c^3e(c)(5\mu^2 - 1)/5]/(\varepsilon\varepsilon_p), \quad (2.107)$$

onde as funções $d(c)$ e $e(c)$ devem satisfazer, respectivamente

$$\mathcal{L}_1 c^3 d(c) = 2c^3 b(c) - 5c\varepsilon_p, \quad (2.108)$$

$$\mathcal{L}_3 c^3 e(c) = 2c^3 b(c) \quad (2.109)$$

e $b(c)$ é definido pela equação integral de Chapman-Enskog para viscosidade (2.23).

Como uma constante múltipla de c pode, pela Eq. (2.47), sempre ser adicionada a $c^3 d(c)$, usa-se a normalização [9]

$$\int_0^\infty e^{-c^2} d(c) c^6 dc = 0 \quad (2.110)$$

e assim, para o fluxo de Poiseuille, a contribuição da solução particular para o perfil de velocidade virá somente do primeiro termo na Eq. (2.107).

Como Loyalka e Hickey [26] referem-se as funções $d(c)$ e $e(c)$ como soluções de Burnett e para distinguir entre estas duas importantes funções, que tem sido discutidas por Simons [46] e que também foram avaliadas nas Refs. [27, 30, 41], considera-se $d(c)$ como a primeira função de Burnett e $e(c)$, como a segunda.

Considerando que as duas funções sejam conhecidas, pode-se estender então o núcleo sintético ao caso $N = 3$, como proposto na Ref. [9], adicionando às condições listadas nas Eqs. (2.61)-(2.65) duas novas condições

$$\int_0^\infty e^{-c'^2} d(c') f_1(c', c) c'^5 dc' = v(c) c^3 d(c) - 2c^3 b(c) + 5c\varepsilon_t, \quad (2.111)$$

e

$$\int_0^\infty e^{-c'^2} e(c') f_3(c', c) c'^5 dc' = v(c) c^3 e(c) - 2c^3 b(c). \quad (2.112)$$

Seguindo o mesmo desenvolvimento apresentado na seção anterior, buscase aproximações da forma

$$f_0(c', c) = A_0(c') A_0(c) + B_0(c') B_0(c), \quad (2.113)$$

$$f_1(c', c) = A_1(c')A_1(c) + B_1(c')B_1(c) + C_1(c')C_1(c), \quad (2.114)$$

$$f_2(c', c) = A_2(c')A_2(c) \quad (2.115)$$

e

$$f_3(c', c) = A_3(c')A_3(c). \quad (2.116)$$

Usa-se então as Eqs. (2.61)–(2.65) e (2.111)–(2.112) para determinar-se as componentes $f_n(c', c)$, $n = 0, 1, 2, 3$, definindo então o novo núcleo sintético.

Por se ter incluído a primeira e a segunda função de Burnett, bem como as funções de Chapman-Enskog para viscosidade e condutividade térmica, este novo modelo, também baseado num núcleo sintético, é chamado de modelo **CEBS** [9].

Observa-se que este modelo tem as oito soluções listadas nas Eqs. (2.36)–(2.40) e (2.41)–(2.43) como soluções da equação modelo homogênea e terá também as soluções particulares exatas, dos problemas de fluxo de Poiseuille e de “Creep” Térmico, como soluções da correspondente equação modelo não-homogênea.

Finalmente, como o modelo CEBS tem um termo a mais ($N = 3$) no núcleo de espalhamento sintético, espera-se que o modelo venha contribuir na classe de equações modelo já desenvolvidas para aproximar a equação linearizada de Boltzmann, em especial nos problemas de fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico.

A partir do próximo capítulo, pretende-se trabalhar com uma equação modelo na solução de problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos. O modelo escolhido para se realizar este trabalho é o modelo S, que consiste numa variação de um dos casos particulares do modelo CES: o modelo BGK.

3 O MODELO S

Apresentada uma formulação de equações modelo da LBE para esferas rígidas e as expressões necessárias para definir livre caminho médio em termos das equações de Chapman-Enskog, para viscosidade e condutividade térmica, deseja-se agora investigar uma das equações modelo.

Para posterior comparação com resultados do modelo BGK e CES [3, 11, 43, 44], decidiu-se então investigar o modelo S, associado ao modelo difuso-especular [54], na resolução de alguns problemas da dinâmica de gases rarefeitos, visto que resultados para este tipo de formulação ainda não existem na literatura para uma classe ampla de problemas.

Assim, apresenta-se neste capítulo a formulação do modelo S, onde deriva-se as equações necessárias para se trabalhar com este modelo, bem como das quantidades de interesse e introduz-se, posteriormente, uma formulação vetorial dessas equações. Como o modelo S, proposto por Shakhov [31], é uma modificação do modelo BGK, conforme mencionado por Sharipov and Seleznev [33], considera-se, neste capítulo, a formulação das equações dos dois modelos cinéticos juntos (somente como uma forma de relacionar suas características).

3.1 Definição da equação modelo

Considerando-se a relação entre coordenadas cartesianas e esféricas, definidas por

$$c_x = c\mu, \quad c_y = c(1 - \mu^2)^{1/2}\text{sen}\chi \quad e \quad c_z = c(1 - \mu^2)^{1/2}\text{cos}\chi \quad (3.1)$$

segue-se [37] e escreve-se a equação linearizada de Boltzmann, para colisões de esferas

rígidas, em coordenadas cartesianas na forma

$$\mathbf{c} \cdot \nabla h(\mathbf{r}, \mathbf{c}) = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} L\{h\}(\mathbf{r}, \mathbf{c}) + S(\mathbf{c}), \quad (3.2)$$

onde $S(\mathbf{c})$ é o termo de fonte, que será específico em cada um dos problemas que pretendemos resolver, pois se deriva da distribuição Maxwelliana em torno da qual se lineariza o problema; \mathbf{r} é o vetor posição, \mathbf{c} é o vetor velocidade com componentes retangulares $\{c_x, c_y, c_z\}$ e magnitude c e o operador L fica definido por

$$L\{h\}(\mathbf{r}, \mathbf{c}) = -v(c)h(\mathbf{r}, \mathbf{c}) + \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\mathbf{r}, \mathbf{c}') F(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) dc'_x dc'_y dc'_z. \quad (3.3)$$

Aqui $F(\mathbf{c}' : \mathbf{c})$ é o núcleo de espalhamento que define cada modelo e que pretende-se, neste capítulo, explicitar para o modelo S, seguindo procedimento análogo ao da Seção 2.4.

Considerando aqui o parâmetro β , que assume o valor $\beta = 1$ para descrever o modelo S e $\beta = 0$, para descrever o modelo BGK, considera-se as componentes

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

$$f_1(c', c) = (8/3)c'c\pi^{1/2} [1 + (2/15)\beta(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)], \quad (3.5)$$

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

e escreve-se então o núcleo de espalhamento requerido na Eq. (3.3)

$$F(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = 1 + 2(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}) + (2/3)(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2) + \beta M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}), \quad (3.7)$$

onde

$$M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = (4/15)(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2). \quad (3.8)$$

Agora usando-se as Eqs. (3.5) nas Eqs. (2.32)–(2.34), determina-se que $v(c) = 1$ é a frequência de colisão para ambos modelos. Em adição, usa-se as Eqs. (3.5) nas Eqs. (2.23), (2.26), (2.51) e encontra-se as funções de Chapman-Enskog apropriadas para cada modelo.

Assim para o modelo BGK, obtém-se

$$b(c) = 1 \quad (3.9)$$

e

$$a(c) = (c^2 - 5/2). \quad (3.10)$$

Para o modelo S, obtém-se

$$b(c) = 1 \quad (3.11)$$

e

$$a(c) = (3/2)(c^2 - 5/2). \quad (3.12)$$

Como consequência, a partir da Eq. (2.27), determina-se para o modelo BGK

$$\varepsilon_t = 1, \quad (3.13)$$

enquanto que, para o modelo S, obtém-se

$$\varepsilon_t = 3/2. \quad (3.14)$$

E, a partir da Eq. (2.22), se obtém para ambos modelos

$$\varepsilon_p = 1. \quad (3.15)$$

A partir das expressões para ε_t e ε_p , Eqs. (3.13)-(3.15), pode-se avaliar o número de Prandtl utilizando-se a definição (2.91). Nota-se que, enquanto o modelo BGK produz para o número de Prandtl o valor $Pr = 1$, o modelo S fornece o valor correto $Pr = 2/3$, o que é considerado na literatura a vantagem do modelo S em relação ao modelo BGK [33], apesar de ambos estarem relacionados a frequência de colisão constante.

Tendo definido o núcleo de espalhamento relevante para o modelo S, considera-se a descrição do fluxo de um gás rarefeito em um canal plano definido por $x \in [-a, a]$ e reescreve-se a equação (3.2) como

$$c_x \frac{\partial}{\partial x} h(x, \mathbf{c}) = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} L\{h\}(x, \mathbf{c}) + S(\mathbf{c}) \quad (3.16)$$

onde

$$L\{h\}(x, \mathbf{c}) = -h(x, \mathbf{c}) + \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(x, \mathbf{c}') K(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) dc'_x dc'_y dc'_z \quad (3.17)$$

e $F(\mathbf{c}' : \mathbf{c})$ é definido pela Eq. (3.7) com $\beta = 1$.

Para os problemas definidos num meio semi-infinito, resolve-se o problema definido pela Eq. (3.16) considerando $x > 0$.

Introduzindo a variável adimensional $\tau = x/l$, segue-se Siewert [37] e escolhe-se trabalhar com o livre caminho médio em termos da viscosidade, considerando a partir da Eq. (3.15), $\varepsilon = \varepsilon_p = 1$ e reescreve-se a Eq. (3.16) na forma

$$c_\tau \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) + h(\tau, \mathbf{c}) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') K(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) dc'_x dc'_y dc'_z + S(\mathbf{c}). \quad (3.18)$$

Para descrever o processo de interação entre o gás e a parede, utiliza-se o modelo difuso-especular, que considera que uma fração de partículas se reflete difusivamente, enquanto a fração restante é refletida especularmente. Assim, segue-se Williams [55] e escreve-se as condições de contorno, para problemas de fluxo entre duas placas paralelas localizadas em $\tau = -a$ e $\tau = a$

$$h(-a, c_x, c_y, c_z) = \alpha[2c_y u_w + \delta(c^2 - 2)] + (1 - \alpha)h(-a, -c_x, c_y, c_z) + \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty e^{-c'^2} h(-a, c'_x, c'_y, c'_z) c'_x dc'_x dc'_y dc'_z \quad (3.19)$$

e

$$h(a, -c_x, c_y, c_z) = \alpha[2c_y u_w + \delta(c^2 - 2)] + (1 - \alpha)h(a, c_x, c_y, c_z) + \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty e^{-c'^2} h(a, -c'_x, c'_y, c'_z) c'_x dc'_x dc'_y dc'_z \quad (3.20)$$

onde α é o coeficiente de acomodação, que representa a fração de moléculas incidentes que são difusivamente refletidas, u_w é a velocidade da placa, $\delta = (T_w - T_0)/T_0$ e T_w é a temperatura da parede.

Para os problemas em meio semi-infinito, além de uma condição de contorno, como em (3.19), considera-se também uma condição associada ao comportamento da solução no infinito.

Neste trabalho deseja-se calcular quantidades físicas relacionadas a velocidade das partículas e fluxo de calor como, por exemplo, o perfil de velocidade

$$u(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty e^{-c^2} h(\tau, c_x, c_y, c_z) c_y dc_x dc_y dc_z \quad (3.21)$$

e o perfil de fluxo de calor

$$q(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty e^{-c^2} h(\tau, c_x, c_y, c_z) (c^2 - 5/2) c_y dc_x dc_y dc_z. \quad (3.22)$$

3.2 Formulação vetorial do modelo

Devido a $u(\tau)$ e $q(\tau)$ serem as quantidades básicas de interesse e estarem definidas em termos de momentos da função h , não se tem calculado completamente $h(\tau, \mathbf{c})$, pois pode-se obter os resultados de interesse a partir de várias integrais da função distribuição. Assim multiplicando a Eq. (3.18) por

$$\phi_1(c_y, c_z) = (c_y/\pi)e^{-(c_y^2+c_z^2)}, \quad (3.23)$$

integrando-se sobre todo c_y, c_z e considerando $\xi = c_x$, obtém-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_1(\tau, \xi) + h_1(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [f_{11}(\xi', \xi) h_1(\tau, \xi') + f_{12}(\xi) h_2(\tau, \xi')] d\xi' + a_1(\xi), \quad (3.24)$$

onde usa-se as seguintes definições

$$h_1(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z, \quad (3.25)$$

$$h_2(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z, \quad (3.26)$$

$$\phi_2(c_y, c_z) = (2^{-1/2}/\pi) c_y (c_y^2 + c_z^2 - 2) e^{-(c_y^2+c_z^2)}, \quad (3.27)$$

$$a_1(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) S(\mathbf{c}) dc_y dc_z, \quad (3.28)$$

$$f_{11}(\xi', \xi) = 1 + (2/15)(\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2) \quad (3.29)$$

e

$$f_{12}(\xi) = (2/15)2^{1/2}(\xi^2 - 1/2). \quad (3.30)$$

Agora multiplica-se a Eq. (3.16) por $\phi_2(c_y, c_z)$ e, como no procedimento anterior, integra-se para obter

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_2(\tau, \xi) + h_2(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [f_{12}(\xi') h_1(\tau, \xi') + f_{22}(\xi) h_2(\tau, \xi')] d\xi' + a_2(\xi), \quad (3.31)$$

onde

$$f_{22} = 4/15 \quad (3.32)$$

e

$$a_2(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) S(\mathbf{c}) dc_y dc_z. \quad (3.33)$$

Seguindo-se a proposta de Siewert [37], adota-se uma notação vetorial, tomando $\mathbf{H}(\tau, \xi)$, com componentes $h_1(\tau, \xi)$ e $h_2(\tau, \xi)$ e reescrevendo então as Eqs. (3.24) e (3.31) na forma

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \mathbf{H}(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \mathbf{Q}(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi') \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{A}(\xi), \quad (3.34)$$

onde T denota o operador transposto, \mathbf{Q} é a matriz

$$\mathbf{Q}(\xi) = \begin{bmatrix} (2/15)^{1/2}(\xi^2 - 1/2) & 1 \\ 2(15^{-1/2}) & 0 \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

e os dois elementos de $\mathbf{A}(\xi)$ vem das expressões de $a_1(\xi)$ e $a_2(\xi)$ como definidos pelas Eqs. (3.28) e (3.33).

Realizando as mesmas operações nas condições de contorno definidas nas Eqs. (3.19) e (3.20), obtém-se

$$\mathbf{H}(a, -\xi) = (1 - \alpha)\mathbf{H}(a, \xi) - \alpha u_w \Phi_1 \quad \xi \in (0, \infty), \quad (3.36)$$

onde Φ_1 é o vetor

$$\Phi_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.37)$$

As quantidades de interesse podem ser reformuladas de acordo com a forma vetorial do problema que está se propondo. Observando a Eq. (3.25), o perfil de velocidade na Eq. (3.21) pode ser calculado por

$$u(\tau) = [1 \quad 0] \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \mathbf{H}(\tau, \xi) d\xi. \quad (3.38)$$

E finalmente, observando-se a forma da Eq. (3.26), a Eq. (3.22) também pode ser reescrita

$$q(\tau) = [0 \quad 1] \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \mathbf{H}(\tau, \xi) d\xi. \quad (3.39)$$

Aqui apresentou-se para a LBE, bem como para as condições de contorno e algumas quantidades de interesse, uma formulação geral dessas equações segundo o modelo S, onde uma notação vetorial também foi incluída.

No próximo capítulo, apresentam-se os problemas na dinâmica de gases rarefeitos que pretende-se resolver aplicando-se o Modelo S e o método ADO: fluxo de Poiseuille, “Creep” Térmico, fluxo de Couette, todos em canal plano. Em meio semi-infinito, aborda-se o problema de Kramers e de Deslizamento Térmico.

4 PROBLEMAS NA DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS

No capítulo anterior, obteve-se uma formulação geral, a partir da LBE, segundo o modelo S. Pretende-se agora especificar-se essa formulação para cada problema de interesse.

Nesse sentido, apresenta-se inicialmente, neste capítulo, a distribuição Maxwelliana, que utiliza-se para linearizar a equação de Boltzmann e descrever as características de cada problema, deixando-se completamente definida a Eq. (3.16) e, conseqüentemente, após os procedimentos descritos no capítulo anterior, também a Eq. (3.34). Apresenta-se ainda as condições de contorno e as quantidades de interesse, agora específicas a cada problema.

Inicialmente descreve-se os problemas de fluxo de Couette, fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico, definidos em um canal plano. Após, trata-se dos problemas de Kramers e de Deslizamento Térmico, que estão definidos em um meio semi-infinito.

4.1 Problemas num canal plano

4.1.1 Fluxo de Couette

O problema chamado fluxo de Couette se caracteriza pela existência de um escoamento de gás rarefeito entre duas placas paralelas infinitas, separadas por uma distância $2a$, que se movimentam em direções opostas. A placa superior, localizada em $x = a$, move-se na direção y positiva com velocidade $+u_w$, enquanto a placa inferior, localizada em $x = -a$, move-se na direção y negativa com velocidade $-u_w$. O gás é mantido a temperatura e pressão constantes.

Assim, pode-se linearizar a equação de Boltzmann em torno da distribuição Maxwelliana absoluta [55]

$$f_0(\mathbf{c}) = n_0 \left[\frac{m}{2\pi k T_0} \right]^{3/2} e^{-c^2} \quad (4.1)$$

e expressar-se a função distribuição por

$$f(x, \mathbf{c}) = f_0(\mathbf{c})[1 + h(x, \mathbf{c})], \quad (4.2)$$

obtendo-se na Eq. (3.16), $S(\mathbf{c}) = 0$. Assim a Eq. (3.34), para o fluxo de Couette, torna-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \mathbf{H}(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \mathbf{Q}(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi') \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi', \quad (4.3)$$

com $\tau \in (-a, a)$, $\xi \in (-\infty, \infty)$, onde $\mathbf{H}(\tau, \xi)$ tem componentes h_1 e h_2 definidas, respectivamente, em (3.25) e (3.26) e \mathbf{Q} é dado na Eq. (3.35).

Deseja-se resolver o problema relacionado as condições de contorno, expressas pela Eq. (3.36)

$$\mathbf{H}(a, -\xi) = (1 - \alpha)\mathbf{H}(a, \xi) - \alpha u_w \boldsymbol{\Phi}_1, \quad \xi \in (0, \infty) \quad (4.4)$$

onde

$$\boldsymbol{\Phi}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.5)$$

Na determinação da solução, devido a velocidade das placas, deve-se considerar ainda a condição de anti-simetria [43]

$$\mathbf{H}(\tau, \xi) = -\mathbf{H}(-\tau, -\xi). \quad (4.6)$$

Para finalizar esta seção nota-se que além do perfil de velocidade e de fluxo de calor definidos pelas Eqs. (3.38) e (3.39), deseja-se avaliar ainda, para o fluxo de Couette, outras três quantidades:

- a taxa de fluxo de partículas

$$U_c = \frac{1}{2a^2} \int_0^a u(\tau) d\tau, \quad (4.7)$$

- a taxa de fluxo de calor

$$Q_c = \frac{1}{2a^2} \int_0^a q(\tau) d\tau \quad (4.8)$$

- e a componente do tensor de pressão

$$P_{xy} = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} h(x, c_x, c_y, c_z) c_y dc_x dc_y dc_z, \quad (4.9)$$

que, considerando-se a forma da Eq. (3.25), pode ser reescrita na forma

$$P_{xy} = [1 \quad 0] \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \mathbf{H}(\tau, \xi) \xi d\xi. \quad (4.10)$$

A seguir, apresenta-se a formulação matemática dos demais problemas que se pretende resolver.

4.1.2 Fluxo de Poiseuille

O gás rarefeito, neste caso, está fluindo na direção y entre duas placas paralelas, localizadas em $x = -a$ e $x = a$, devido a um gradiente constante de pressão. Assim é conveniente linearizar-se a BE em torno de uma distribuição Maxwelliana local [55]

$$f_0(x, \mathbf{c}) = n(x) \left[\frac{m}{2\pi kT_0} \right]^{3/2} e^{-c^2} \quad (4.11)$$

onde a variação da densidade é expressa por

$$n(x) = n_0(1 + R_x x) \quad (4.12)$$

e R_x representa o gradiente de densidade constante na direção x .

A partir dessa linearização e considerando-se a normalização $R_x = 1$, obtém-se o termo de fonte $S(\mathbf{c})$ da Eq. (3.16)

$$S(\mathbf{c}) = -c_y \quad (4.13)$$

e, conseqüentemente, o problema fica descrito pela Eq. (3.34)

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \mathbf{H}(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \mathbf{Q}(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi') \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{A}(\xi) \quad (4.14)$$

sendo $\tau \in (-a, a)$, $\xi \in (-\infty, \infty)$ e o termo de fonte fica definido por

$$\mathbf{A}(\xi) = \begin{bmatrix} -1/2 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.15)$$

Considerando-se que no fluxo de Poiseuille a velocidade das placas é nula, pretende-se resolver o problema (4.14) associado as condições de contorno, expressas pela Eq. (3.36) com $u_w = 0$, obtendo-se assim

$$\mathbf{H}(a, -\xi) = (1 - \alpha) \mathbf{H}(a, \xi), \quad \xi \in (0, \infty) \quad (4.16)$$

e associado a condição de simetria [43]

$$\mathbf{H}(\tau, \xi) = \mathbf{H}(-\tau, -\xi). \quad (4.17)$$

Para o fluxo de Poiseuille, além de resultados para os perfis de velocidade e fluxo de calor, definidos pelas Eqs. (3.38) e (3.39), busca-se também avaliar a taxa de fluxo de partículas

$$U_p = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a u(\tau) d\tau \quad (4.18)$$

e taxa de fluxo de calor

$$Q_p = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a q(\tau) d\tau. \quad (4.19)$$

4.1.3 “Creep” Térmico

A formulação do problema de “Creep” Térmico é muito semelhante ao do fluxo de Poiseuille; a diferença se deve ao fato de que aqui, o gás se movimenta devido a um gradiente constante de temperatura. Neste caso, lineariza-se a BE em torno da distribuição Maxwelliana [55]

$$f_0(x, \mathbf{c}) = n(x) \left[\frac{m}{2\pi kT(x)} \right]^{3/2} e^{-c^2} \quad (4.20)$$

onde a variação da densidade é expressa por

$$n(x) = n_0(1 + R_x x) \quad (4.21)$$

e a variação da temperatura, por

$$T(x) = T_0(1 - R_x x). \quad (4.22)$$

Obtém-se assim, considerando $R_x = 1$, a expressão para o termo $S(\mathbf{c})$ da Eq. (3.16)

$$S(\mathbf{c}) = -c_y(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 - 5/2) \quad (4.23)$$

e a equação que descreve o problema, fica então definida pela Eq. (3.34)

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \mathbf{H}(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \mathbf{Q}(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi') \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{A}(\xi) \quad (4.24)$$

sendo $\tau \in (-a, a)$, $\xi \in (-\infty, \infty)$ e onde o termo de fonte, na Eq. (4.24), fica definido por

$$\mathbf{A}(\xi) = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ \sqrt{2} \end{bmatrix}. \quad (4.25)$$

Considerando-se que a velocidade das placas no problema de “Creep” Térmico é nula, usa-se $u_w = 0$ na Eq. (3.36) para obter-se as condições de contorno associadas ao problema

$$\mathbf{H}(a, -\xi) = (1 - \alpha) \mathbf{H}(a, \xi), \quad \xi \in (0, \infty). \quad (4.26)$$

Para o problema de “Creep” Térmico deseja-se obter uma solução que também satisfaça a condição de simetria (4.17) e avaliar o perfil de velocidade, definido pela Eq. (3.38), o perfil de fluxo de calor, definido pela Eq. (3.39), a taxa de fluxo de partículas, definida pela mesma expressão da Eq. (4.18) e a taxa de fluxo de calor, definida pela Eq. (4.19).

Nas próximas seções, apresenta-se as formulações matemáticas dos problemas definidos num meio semi-infinito.

4.2 Problemas em meio semi-infinito

4.2.1 Deslizamento Térmico

Esse problema descreve a expansão de um gás em um domínio semi-infinito, devido a um gradiente constante de temperatura e limitado por uma placa plana localizada em $x = 0$. A equação que descreve o problema é obtida linearizando-se a BE em torno de uma distribuição Maxwelliana local [55]

$$f_0(x, \mathbf{c}) = n(x) \left[\frac{m}{2\pi kT(x)} \right]^{3/2} e^{-c^2} \quad (4.27)$$

onde a variação da densidade e da temperatura foram definidas, respectivamente, nas Eqs. (4.21) e (4.22). Assim, o termo de fonte na Eq. (3.16) fica definido por

$$S(\mathbf{c}) = -c_y(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 - 5/2). \quad (4.28)$$

Definida a equação (3.16), obtém-se então a equação que descreve o problema de Deslizamento Térmico, na forma da Eq. (3.34)

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \mathbf{H}(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \mathbf{Q}(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi') \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{A}(\xi) \quad (4.29)$$

sendo $\tau \in (0, \infty)$, $\xi \in (-\infty, \infty)$ e onde

$$\mathbf{A}(\xi) = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ \sqrt{2} \end{bmatrix}. \quad (4.30)$$

Busca-se soluções que satisfaçam a condição de contorno expressa pela Eq. (3.36) com $a = 0$ e $u_w = 0$

$$\mathbf{H}(0, -\xi) = (1 - \alpha) \mathbf{H}(0, \xi), \quad \xi \in (0, \infty). \quad (4.31)$$

Para o problema de Deslizamento Térmico, deseja-se determinar o perfil de velocidade, definido na Eq. (3.38) e o coeficiente de deslizamento térmico A_t definido por

$$\lim_{y \rightarrow \infty} u(y) = A_t \quad (4.32)$$

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

4.2.2 Problema de Kramers

Considera-se problema de Kramers o fluxo de um gás rarefeito em expansão que preenche o semi-espaço $x > 0$ limitado por uma placa localizada em $x = 0$, com um gradiente de velocidade ao longo do eixo x . Segundo Williams [55], lineariza-se a BE utilizando-se uma distribuição Maxwelliana da forma

$$f_0(x, \mathbf{c}) = n_0 \left[\frac{m}{2\pi k T_0} \right]^{3/2} \exp\left\{ -\frac{m(c_x^2 + c_y^2 - [c_z^2 - \bar{u}(y)]^2)}{2kT_0} \right\} \quad (4.33)$$

onde

$$\bar{u}(y) = Ky, \quad (4.34)$$

sendo K um gradiente na direção y . Assim, tomando-se $K = 1$, obtém-se para $S(\mathbf{c})$, na Eq. (3.16)

$$S(\mathbf{c}) = -2c_x c_y. \quad (4.35)$$

Para o problema de Kramers, avaliaremos o perfil de velocidade [55]

$$u_k(x) = x + \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} h(x, c_x, c_y, c_z) c_x \, dc_x \, dc_y \, dc_z. \quad (4.36)$$

Tem-se então definida a equação que descreve o problema pela Eq. (3.34) na forma

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \mathbf{H}(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \mathbf{Q}(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi') \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{A}(\xi), \quad (4.37)$$

sendo $\tau \in (0, \infty)$, $\xi \in (-\infty, \infty)$ e o termo $\mathbf{A}(\xi)$ definido por

$$\mathbf{A}(\xi) = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -\xi \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.38)$$

Deseja-se resolver o problema (4.37) associado a condição de contorno

$$\mathbf{H}(0, -\xi) = (1 - \alpha) \mathbf{H}(0, \xi), \quad \xi \in (0, \infty), \quad (4.39)$$

e a uma condição de comportamento da solução no infinito a ser definida posteriormente.

O perfil de velocidade, descrito na Eq. (4.36), é reescrito então na forma

$$u_k(\tau) = \tau + [1 \quad 0] \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \mathbf{H}(\tau, \xi) d\xi. \quad (4.40)$$

Apresentada a formulação matemática de problemas clássicos na dinâmica de gases rarefeitos, pode-se agora buscar soluções para os problemas aqui definidos e também resultados para as quantidades de interesse desejadas.

Neste caso, faz-se necessário primeiro a utilização de um método de solução da LBE. Assim no próximo capítulo apresenta-se a descrição geral do método analítico de ordenadas discretas (ADO), cuja aplicação nos problemas propostos será apresentada no capítulo 6.

5 SOLUÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS

O método de ordenadas discretas, proposto por Wick e Chandrasekhar no início da década de 40 [21], para resolver problemas em teoria de transporte, consiste basicamente na aproximação do termo integral da equação de transporte por uma fórmula de quadratura. No entanto, o método como proposto por Chandrasekhar [17] apresenta uma dificuldade computacional que consiste no cálculo das constantes de separação como raízes de um polinômio. Numa versão recente do método, Barichello e Siewert [5, 6] apresentam uma formulação que segue a linha mestra do método original, como proposto por Wick e Chandrasekhar, porém com algumas melhorias que a tornam bastante atrativa do ponto de vista computacional [21].

Apresenta-se então aqui a versão analítica do método de ordenadas discretas [6], para solução de problemas na dinâmica de gases rarefeitos, onde agora o esquema de quadratura pode ser arbitrário. Ressalta-se ainda, dentre as características do método, a utilização de esquemas de quadratura do tipo “*half-range*” [7] (onde a integral é avaliada somente na metade do seu domínio) e ainda a obtenção das constantes de separação a partir de um problema de autovalores.

Antes de se iniciar o trabalho com o método analítico de ordenadas discretas, propõem-se uma reformulação dos problemas, a fim de escrevê-los numa notação mais simplificada e que representa a equação clássica na qual o método vem sendo aplicado.

5.1 Uma reformulação dos problemas

Seguindo-se [37] considera-se a equação

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \mathbf{H}(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \mathbf{Q}(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi') \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{A}(\xi) \quad (5.1)$$

e propõem-se escrever

$$\mathbf{H}(\tau, \xi) = \mathbf{Q}(\xi)\mathbf{G}(\tau, \xi) \quad (5.2)$$

e

$$\mathbf{A}(\xi) = \mathbf{Q}(\xi)\mathbf{\Gamma}. \quad (5.3)$$

Então usando-se as Eqs. (5.2), (5.3) na Eq. (5.1) e aplicando \mathbf{Q}^{-1} em ambos os lados da equação resultante, obtém-se uma formulação clássica para o problema em termos de $\mathbf{G}(\tau, \xi)$

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathbf{G}(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Psi}(\xi') \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{\Gamma}(\xi), \quad (5.4)$$

onde considera-se

$$\mathbf{\Psi}(\xi') = \pi^{-1/2} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi) \mathbf{Q}(\xi) \quad (5.5)$$

e o termo $\mathbf{\Gamma}(\xi)$, definido por

$$\mathbf{\Gamma}(\xi) = \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{A}(\xi), \quad (5.6)$$

deve ser específico a cada problema. Assim obtém-se, para o fluxo de Poiseuille

$$\mathbf{\Gamma} = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (5.7)$$

Para o fluxo de “Creep” Térmico e Deslizamento Térmico, obtém-se

$$\mathbf{\Gamma} = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} (15/2)^{1/2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

e para o problema de Kramers

$$\mathbf{\Gamma}(\xi) = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ -\xi \end{bmatrix}. \quad (5.9)$$

As condições de contorno para o problema (5.4), são obtidas substituindo-se a Eq. (5.2) na Eq. (3.36)

$$\mathbf{G}(a, -\xi) = (1 - \alpha)\mathbf{G}(a, \xi) - \alpha u_w \mathbf{\Phi}_1^*, \quad (5.10)$$

onde

$$\mathbf{\Phi}_1^* = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (5.11)$$

Formulado o problema que pretende-se resolver em termos de $\mathbf{G}(\tau, \xi)$, pode-se reescrever a Eq. (3.38), que determina o perfil de velocidade, na forma

$$u(\tau) = [0 \quad 1]\mathbf{G}(\tau) \quad (5.12)$$

e o perfil de fluxo de calor expresso na Eq. (3.39) por

$$q(\tau) = (15/2)^{1/2}[1 \quad 0]\mathbf{G}(\tau), \quad (5.13)$$

onde considera-se

$$\mathbf{G}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Psi}(\xi)\mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi. \quad (5.14)$$

A componente do tensor de pressão, definido pela Eq. (4.10) também pode ser reescrito na forma

$$P_{xy} = [0 \quad 1]\pi^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi) \mathbf{G}(\tau, \xi) \xi \, d\xi. \quad (5.15)$$

5.2 Soluções particulares

Para expressar a solução em ordenadas discretas, primeiramente precisa-se determinar uma solução particular da equação não homogênea (5.4) para cada problema.

Assim para os problemas de fluxo de Poiseuille, de “Creep” Térmico, de Kramers e de Deslizamento Térmico, segue-se [37] e propõem-se uma solução na forma

$$\mathbf{G}^p(y, \xi) = \mathbf{B}y^2 + \mathbf{C}y\xi + \mathbf{D}\xi^2 + \mathbf{E}\xi + \mathbf{F} \quad (5.16)$$

onde os coeficientes são vetores com componentes constantes.

Substituindo-se então a Eq. (5.16) na Eq. (5.4) e usando a Eq. (5.7), obtém-se para o fluxo de Poiseuille a solução particular

$$\mathbf{G}^p(\tau, \xi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1/10)30^{1/2} \\ \tau^2 - 2\tau\xi + 2\xi^2 \end{bmatrix}. \quad (5.17)$$

Para os problemas de “Creep” Térmico e Deslizamento Viscoso, substitui-se Eq. (5.16) na Eq. (5.4), usando a Eq.(5.8) para obter-se

$$\mathbf{G}^p(\tau, \xi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -(3/4)30^{1/2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.18)$$

e, de forma análoga, usando as Eqs. (5.16) e (5.9) na Eq. (5.4), para o problema de Kramers encontra-se a solução

$$\mathbf{G}^p(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} 0 \\ -\xi \end{bmatrix}. \quad (5.19)$$

Tendo encontrado as soluções particulares, pode-se considerar

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{G}^h(\tau, \xi) + \mathbf{G}^p(\tau, \xi) \quad (5.20)$$

e então buscar soluções para a equação homogênea

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}^h(\tau, \xi) + \mathbf{G}^h(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi') \mathbf{G}^h(\tau, \xi') d\xi', \quad (5.21)$$

associada as condições de contorno

$$\mathbf{G}^h(a, -\xi) - (1 - \alpha) \mathbf{G}^h(a, \xi) = \mathbf{R}(\xi), \quad \xi \in (0, \infty), \quad (5.22)$$

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

$$\mathbf{R}(\xi) = (1 - \alpha) \mathbf{G}^p(a, \xi) - \mathbf{G}^p(a, -\xi). \quad (5.23)$$

Para completar a solução, desenvolve-se na próxima seção a solução em ordenadas discretas para o problema definido na Eq. (5.21).

5.3 Solução em ordenadas discretas

A formulação das soluções em ordenadas discretas segue, inicialmente, o desenvolvimento de Siewert e Valougeorgis [45] e assim os procedimentos são apresentados aqui de uma forma mais resumida.

Primeiramente, notando que

$$\Psi(\xi) = \Psi(-\xi) \quad (5.24)$$

e seguindo Barichello e Siewert [6], reescreve-se a integral da Eq. (5.21) somente para metade do domínio

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}^h(\tau, \xi) + \mathbf{G}^h(\tau, \xi) = \int_0^\infty \Psi(\xi') [\mathbf{G}^h(\tau, \xi') + \mathbf{G}^h(\tau, -\xi')] d\xi'. \quad (5.25)$$

É usual, ao se trabalhar com problemas da forma apresentada na Eq. (5.25), antecipar que as soluções são do tipo exponenciais e, portanto, busca-se soluções na forma

$$\mathbf{G}^h(\tau, \xi) = \Phi(\nu, \xi) e^{-\tau/\nu}. \quad (5.26)$$

Assim substituindo-se a Eq. (5.26) na Eq. (5.25), obtém-se

$$(\nu - \xi) \Phi(\nu, \xi) = \nu \int_0^\infty \Psi(\xi') [\Phi(\nu, \xi') + \Phi(\nu, -\xi')] d\xi'. \quad (5.27)$$

Introduzindo um esquema de quadratura para avaliar a integral, reescreve-se a Eq. (5.27) na forma

$$(\nu - \xi)\Phi(\nu, \xi) = \nu \sum_{k=1}^N w_k \Psi(\xi_k) [\Phi(\nu, \xi_k) + \Phi(\nu, -\xi_k)], \quad (5.28)$$

onde os N pontos e pesos da quadratura $\{\xi_k, w_k\}$ são definidos para avaliar a integral sobre um intervalo $[0, \infty)$, ν é a constante de separação e as funções Φ são chamadas de componentes independentes da parte espacial.

Avaliando agora a Eq. (5.28) nos pontos da quadratura, escreve-se a equação resultante na forma

$$\frac{1}{\xi_i} \left[\Phi(\nu, \xi_i) - \sum_{k=1}^N w_k \Psi(\xi_k) [\Phi(\nu, \xi_k) + \Phi(\nu, -\xi_k)] \right] = \frac{1}{\nu} [\Phi(\nu, \xi_i) + \Phi(\nu, -\xi_i)]. \quad (5.29)$$

Tomando-se agora $\Phi_+(\nu)$ e $\Phi_-(\nu)$ como vetores de dimensão $2N \times 1$, cujas componentes, cada uma de dimensão 2×1 são, respectivamente, $\Phi(\nu, \xi_k)$ e $\Phi(\nu, -\xi_k)$, pode-se então considerar

$$\mathbf{U} = \Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu) \quad (5.30)$$

e obter-se partir do uso da Eq. (5.29), o problema de autovalor

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{W})\mathbf{U} = \lambda\mathbf{U}, \quad (5.31)$$

considerando-se aqui

$$\lambda = 1/\nu^2 \quad (5.32)$$

e

$$\mathbf{D} = \text{diag}\{(1/\xi_1)^2\mathbf{I}, (1/\xi_2)^2\mathbf{I}, \dots, (1/\xi_N)^2\mathbf{I}\}, \quad (5.33)$$

com \mathbf{I} denotando a matriz identidade 2×2 e \mathbf{W} a matriz de dimensão $2N \times 2N$, com cada $2 \times 2N$ linhas definidas por

$$\mathbf{R}_i = (1/\xi_i)^2 [w_1 \Psi(\xi_1) \quad w_2 \Psi(\xi_2) \quad \dots \quad w_N \Psi(\xi_N)], \quad (5.34)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$.

Assumindo que o problema de autovalores (5.31) esteja resolvido, obtém-se então os autovalores e autovetores $\{\lambda_j, \mathbf{U}_j\}$, para $j = 1, 2, \dots, 2N$ e encontra-se

$$\Phi_+(\nu_j) = \frac{1}{2\nu_j} \text{diag}\{(\nu_j + \xi_1)\mathbf{I}, (\nu_j + \xi_2)\mathbf{I}, \dots, (\nu_j + \xi_N)\mathbf{I}\} \mathbf{U}_j \quad (5.35)$$

e

$$\Phi_-(\nu_j) = \frac{1}{2\nu_j} \text{diag}\{(\nu_j - \xi_1)\mathbf{I}, (\nu_j - \xi_2)\mathbf{I}, \dots, (\nu_j - \xi_N)\mathbf{I}\} \mathbf{U}_j, \quad (5.36)$$

onde ν_j é a raiz quadrada positiva de $1/\lambda_j$.

Tendo encontrado estas expressões para $\Phi_+(\nu_j)$ e $\Phi_-(\nu_j)$, onde os vetores \mathbf{U}_j são avaliados numericamente, pode-se escrever então a solução em ordenadas discretas, considerando-se $\mathbf{G}_\pm^h(y)$ o vetor com as componentes $\mathbf{G}_\pm^h(y, \pm\xi_k)$, na forma

$$\mathbf{G}_\pm^h(\tau) = \sum_{j=1}^{2N} A_j \Phi_\pm(\nu_j) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi_\mp(\nu_j) e^{-(a-\tau)/\nu_j}, \quad (5.37)$$

onde as constantes $\{A_j, B_j\}$ serão determinadas a partir das condições de simetria e das condições de contorno, específicas para cada problema.

Como discutido na Ref. [45], uma das constantes de separação, digamos ν_1 , torna-se ilimitada quando N tende ao infinito, devido ao fato do problema em questão ser conservativo. Levando em conta este fato, negligencia-se a maior dessas constantes e reescreve-se a Eq. (5.37) na forma

$$\mathbf{G}_{\pm}^h(\tau) = A_1 \mathbf{\Phi}_1 + B_1 \mathbf{\Phi}_2 + \sum_{j=2}^{2N} A_j \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-\tau)\nu_j}, \quad (5.38)$$

onde foram introduzidas as soluções exatas $\mathbf{\Phi}_1$, de dimensão $2N \times 1$, que tem N componentes definidas por

$$\mathbf{\Phi}_1^+ = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.39)$$

e $\mathbf{\Phi}_2$, de dimensão $2N \times 1$, que tem N componentes da forma

$$\mathbf{\Phi}_2^+ = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau - \xi_k \end{bmatrix}. \quad (5.40)$$

Ressalta-se que outra característica importante dessa versão (ADO) é a possibilidade de se trabalhar com soluções elementares numéricas, como se fez aqui, ou analíticas (as Eqs. (5.35) e (5.36) são obtidas com expressões explícitas em termos das variáveis (ν, ξ) [3, 29].

Na Ref. [49], o modelo S é usado para tratar os problemas de Poiseuille e “Creep” Térmico usando a versão analítica das Eqs. (5.35) e (5.36). Em geral, quando do uso de problemas vetoriais, a abordagem usada nesse trabalho é mais vantajosa pois trata de casos com autovalores repetidos e casos onde $\nu_k = \xi_k$.

Apresentou-se então aqui uma solução geral obtida pelo método analítico de ordenadas discretas. No próximo capítulo, aplica-se o método aqui descrito para resolver os problemas formulados matematicamente no capítulo anterior.

6 APLICAÇÕES

Neste capítulo, define-se soluções dos problemas clássicos na RGD, baseadas na solução geral (5.38) e aplica-se estas soluções para se avaliar as quantidades físicas de interesse.

6.1 Problemas num canal plano

6.1.1 Fluxo de Couette

Para o fluxo de Couette, busca-se soluções da Eq. (5.21) sujeita a condição de contorno dada pela Eq. (5.10)

$$\mathbf{G}(a, -\xi) = (1 - \alpha)\mathbf{G}(a, \xi) - \alpha u_w \Phi_1^*, \quad (6.1)$$

onde Φ_1^* é definido por

$$\Phi_1^* = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

e que satisfaça a condição de anti-simetria obtida a partir da Eq. (4.6)

$$\mathbf{G}(-\tau, -\xi) = -\mathbf{G}(\tau, \xi). \quad (6.3)$$

Como deseja-se que solução em ordenadas discretas da Eq. (5.21), apresentada na Eq. (5.38), na forma

$$\mathbf{G}_{\pm}^h(\tau) = A_1 \Phi_1 + B_1 \Phi_2 + \sum_{j=2}^{2N} A_j \Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+y\tau/\nu_j)} + B_j \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-\tau)\nu_j} \quad (6.4)$$

satisfaça a Eq. (6.3), toma-se $A_1 = 0$ e $B_j = -A_j$, $j = 2, 3, \dots, 2N$ na Eq. (6.4) e reescreve-se a solução em ordenadas discretas para o fluxo de Couette na forma

$$\mathbf{G}_{\pm}^h(\tau) = B_1 \Phi_2 + \sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+\tau)/\nu_j} - \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-\tau)\nu_j}]. \quad (6.5)$$

Para completar a solução (6.5) deve-se determinar as constantes B_1 e A_j . Assim substitui-se a Eq. (6.5) em uma versão em ordenadas discretas da Eq. (6.1), isto é, em

$$\mathbf{G}(a, -\xi_k) = (1 - \alpha)\mathbf{G}(a, \xi_k) - \alpha u_w \Phi_1^*, \quad (6.6)$$

para $k = 1, 2, \dots, N$ e resolve-se o sistema de equações algébricas lineares resultante

$$\sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_+(\nu_j)((\alpha - 1)e^{-2a/\nu_j} - 1) + \Phi_-(\nu_j)(1 - \alpha + e^{-2a/\nu_j})] + B_1 \Phi_* = -\alpha u_w \Phi_1^*, \quad (6.7)$$

onde Φ_* , de dimensão $2N \times 1$, tem N componentes da forma

$$\begin{bmatrix} 0 \\ a\alpha + \xi_k(2 - \alpha) \end{bmatrix}. \quad (6.8)$$

Tendo resolvido o sistema linear, a solução (6.5) fica completamente definida. Pode-se usar então a Eq. (6.5) na Eq. (5.14) obtendo-se

$$\mathbf{G}(\tau) = \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+\tau)/\nu_j} - e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{N}(\nu_j) \quad (6.9)$$

onde o vetor \mathbf{N} , de dimensão 2×1 fica determinado por

$$\mathbf{N}(\nu_j) = [w_1 \Psi(\xi_1) \quad w_2 \Psi(\xi_2) \quad \dots \quad w_N \Psi(\xi_N)] [\Phi_+(\nu_j) + \Phi_-(\nu_j)]. \quad (6.10)$$

Agora usando a Eq. (6.9) na Eq. (5.12), obtém-se para o perfil de velocidade

$$u_c(\tau) = B_1 \tau + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+\tau)/\nu_j} - e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{N}_2(\nu_j) \quad (6.11)$$

e, a partir da Eq. (5.13), obtém-se para o perfil de fluxo de calor

$$q_c(\tau) = (15/2)^{1/2} \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+\tau)/\nu_j} - e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{N}_1(\nu_j), \quad (6.12)$$

onde $N_1(\nu_j)$ e $N_2(\nu_j)$ são as componentes de $\mathbf{N}(\nu_j)$.

A taxa de fluxo de partículas

$$U_c = \frac{1}{2a^2} \int_0^a u_c(\tau) d\tau \quad (6.13)$$

e a taxa de fluxo de calor

$$Q_c = \frac{1}{2a^2} \int_0^a q_c(\tau) d\tau \quad (6.14)$$

são obtidas usando-se as expressões do perfil de velocidade, dado na Eq. (6.11) e do perfil de fluxo de calor, dado pela Eq. (6.12). Assim obtém-se, para a taxa de fluxo de partículas

$$U_c = \frac{1}{2a^2} \left[\frac{a^2 B_1}{2} - \sum_{j=2}^{2N} \nu_j A_j (e^{-a/\nu_j} - 1)^2 \mathbf{N}_2(\nu_j) \right] \quad (6.15)$$

e para a taxa de fluxo de calor

$$Q_c = -\frac{(15/2)^{1/2}}{2a^2} \sum_{j=2}^{2N} \nu_j A_j (e^{-a/\nu_j} - 1)^2 \mathbf{N}_1(\nu_j). \quad (6.16)$$

De forma similar, obtém-se para a componente do tensor de pressão, definida na Eq. (5.15)

$$P_{xy} = -\frac{\pi^{1/2} B_1}{2}. \quad (6.17)$$

No próximo capítulo apresenta-se os resultados numéricos obtidos para estas quantidades. Segue-se agora na determinação da solução dos demais problemas.

6.1.2 Fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico

Estes dois problemas tem muitas características em comum e assim, considera-se conveniente abordar junto suas soluções em ordenadas discretas. Para estes problemas, busca-se soluções da Eq. (5.21), sujeita as condições de contorno definidas pela Eq. (5.22) e a condição de simetria obtida da Eq. (4.17)

$$\mathbf{G}(-\tau, -\xi) = \mathbf{G}(\tau, \xi). \quad (6.18)$$

Para satisfazer esta condição de simetria, considera-se na Eq. (6.4) $B_1 = 0$ e $B_j = A_j$, $j = 2, 3, \dots, 2N$ e reescreve-se a solução na forma

$$\mathbf{G}_{\pm}^h(\tau) = A_1 \Phi_1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-(a-\tau)/\nu_j}]. \quad (6.19)$$

Para completar a solução do problema $\mathbf{G}^h(\tau, \pm\xi)$, substitui-se a Eq. (6.19) nas condições de contorno dadas pela Eq. (5.22) e resolve-se o seguinte

sistema de equações algébricas lineares para obtermos as constantes A_1 e A_j

$$\sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_+(\nu_j)((\alpha - 1)e^{-2a/\nu_j} + 1) + \Phi_-(\nu_j)(\alpha - 1 + e^{-2a/\nu_j})] + \alpha A_1 \Phi_1 = \mathbf{R}(\xi), \quad (6.20)$$

onde o termo $\mathbf{R}(\xi)$ foi definido pela Eq. (5.23). Para ser explícito, tem-se então

$$\mathbf{R}(\xi) = \begin{bmatrix} -\alpha\sqrt{30}/20 \\ a(\alpha - 2)\xi - \alpha(a^2/2 + \xi^2) \end{bmatrix} \quad (6.21)$$

para o fluxo de Poiseuille e

$$\mathbf{R}(\xi) = \begin{bmatrix} 3\alpha\sqrt{30}/8 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.22)$$

para o problema de “Creep” Térmico.

Tendo-se definido a solução em ordenadas discretas através da Eq. (6.19) para os problemas de fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico, pode-se usar na Eq. (5.20) a Eq. (6.19), juntamente com as soluções particulares de cada problema, definidas nas Eqs. (5.17) e (5.18), para determinar-se, a partir da Eq. (5.14)

$$\mathbf{G}(\tau) = \mathbf{G}_*(\tau) + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+\tau)/\nu_j} + e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{N}(\nu_j), \quad (6.23)$$

onde $\mathbf{N}(\nu_j)$ é definido pela Eq. (6.10) e

$$\mathbf{G}_*(\tau) = \begin{bmatrix} 30^{1/2}[(1/20)k_1 - (1/8)k_2] \\ (1/2)(\tau^2 + 1)k_1 + A_1 \end{bmatrix} \quad (6.24)$$

apresenta os termos obtidos usando-se a solução particular de cada problema. Assim para o fluxo de Poiseuille considera-se $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$ e para o Creep Térmico, $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$.

Tendo encontrado $\mathbf{G}(\tau)$, pode-se agora determinar as quantidades de interesse referentes a esses dois problemas. Considerando-se inicialmente o fluxo de Poiseuille, pode-se usar a Eq. (6.23) na Eq. (5.12) para obter-se o perfil de velocidade

$$u_p(\tau) = (1/2)(\tau^2 + 1) + A_1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+\tau)/\nu_j} + e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{N}_2(\nu_j). \quad (6.25)$$

De forma análoga, substituindo a Eq. (6.23) na Eq. (5.13), obtém-se o perfil de fluxo de calor

$$q_p(\tau) = (3/4) + (15/2)^{1/2} \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+\tau)/\nu_j} + e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{N}_1(\nu_j). \quad (6.26)$$

Avaliando-se ainda as outras duas quantidades de interesse, usa-se a Eqs. (6.25) na Eq. (4.18) para encontrar-se a taxa de fluxo de partículas

$$U_p = \frac{1}{2a^2} [a(a^2/3 + 1) + 2aA_1 + 2 \sum_{j=2}^{2N} \nu_j A_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) \mathbf{N}_2(\nu_j)] \quad (6.27)$$

e para encontrar-se a taxa de fluxo de calor, usa-se a Eq. (6.26) na Eq. (4.19), obtendo-se

$$Q_p = \frac{1}{2a^2} [(3a/2) + 2(15/2)^{1/2} \sum_{j=2}^{2N} \nu_j A_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) \mathbf{N}_1(\nu_j)]. \quad (6.28)$$

Neste ponto, completa-se esta seção apresentando-se as expressões para as quantidades de interesse relacionadas ao problema de “Creep” Térmico, obtidas a partir de um procedimento análogo ao realizado acima para o fluxo de Poiseuille.

Tem-se então, para o perfil de velocidade

$$u_t(\tau) = A_1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+\tau)/\nu_j} + e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{N}_2(\nu_j) \quad (6.29)$$

e para o perfil de fluxo de calor

$$q_t(\tau) = (3/4) + (15/2)^{1/2} \sum_{j=2}^{2N} A_j [e^{-(a+\tau)/\nu_j} + e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{N}_1(\nu_j). \quad (6.30)$$

Avaliando-se as Eqs. (4.18) e (4.19) para o problema de “Creep” Térmico, obtém-se, para a taxa de fluxo de partículas

$$U_t = \frac{1}{2a^2} [2aA_1 + 2 \sum_{j=2}^{2N} \nu_j A_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) \mathbf{N}_2(\nu_j)] \quad (6.31)$$

e para a taxa de fluxo de calor

$$Q_t = \frac{1}{2a^2} [-15a/4 + 2(15/2)^{1/2} \sum_{j=2}^{2N} \nu_j A_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) \mathbf{N}_1(\nu_j)]. \quad (6.32)$$

6.2 Problemas em meio semi-infinito

Para os problemas em meio semi-infinito, deseja-se que a solução homogênea seja limitada. Assim toma-se $B_j = 0, j = 1, \dots, 2N$ na Eq. (6.4) e escreve-se

a solução em ordenadas discretas na forma

$$\mathbf{G}_{\pm}^h(\tau) = A_1 \Phi_1 + \sum_{j=2}^{2N} A_j \Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-\tau/\nu_j}. \quad (6.33)$$

Pretende-se agora, aplicar esta solução para tratar especificamente de cada problema.

6.2.1 Deslizamento Térmico

Para que a solução apresentada na Eq. (6.33) fique completamente definida, deve-se determinar o valor dos coeficientes A_j . Para isso aplica-se essa solução na condição de contorno

$$\mathbf{G}^h(0, \xi) - (1 - \alpha)\mathbf{G}^h(0, -\xi) = \mathbf{R}, \quad \xi > 0, \quad (6.34)$$

onde especifica-se o termo \mathbf{R} por

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} (3\alpha/8)\sqrt{30} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (6.35)$$

e resolve-se o sistema de equações lineares

$$\sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_+(\nu_j) + (\alpha - 1)\Phi_-(\nu_j)] + \alpha A_1 \Phi_1 = \mathbf{R}. \quad (6.36)$$

Determinada a solução em ordenadas discretas para o problema de Deslizamento Térmico, busca-se então as expressões para o perfil de velocidade e o coeficiente de deslizamento térmico.

Assim, usando-se a Eq. (6.33) na expressão (5.14) determina-se, a partir da Eq. (3.38), o perfil de velocidade

$$u_d(\tau) = A_1 + \sum_{n=2}^{2N} A_n e^{-\tau/\nu_n} \mathbf{N}_2(\nu_n) \quad (6.37)$$

e usando a Eq. (6.37) na Eq. (4.32), obtém-se o coeficiente de deslizamento térmico A_t

$$A_t = 2A_1. \quad (6.38)$$

6.2.2 Problema de Kramers

Para o problema de Kramers, busca-se soluções que satisfaçam a condição de contorno

$$\mathbf{G}^h(0, \xi) - (1 - \alpha)\mathbf{G}^h(0, -\xi) = \mathbf{R}(\xi), \quad \xi > 0 \quad (6.39)$$

onde

$$\mathbf{R}(\xi) = \begin{bmatrix} 0 \\ \xi(2 - \alpha) \end{bmatrix}. \quad (6.40)$$

Assim, determina-se as constantes A_j substituindo-se a Eq. (6.33) na condição de contorno (6.39) e resolvendo-se o sistema linear de equações algébricas

$$\sum_{j=2}^{2N} A_j [\Phi_+(\nu_j) + (\alpha - 1)\Phi_-(\nu_j)] + \alpha A_1 \Phi_1 = \mathbf{R}(\xi). \quad (6.41)$$

Resolvido o sistema, tem-se determinadas as constantes $A_j, j = 1, \dots, 2N$ e a solução em ordenadas discretas (6.33) para o problema de Kramers fica completamente definida.

Pode-se agora utilizar a Eq. (6.33) para obter-se, a partir da Eq. (4.40), devidamente reformulada para o problema em \mathbf{G} , o perfil de velocidade

$$u_k(\tau) = A_1 + \tau + \sum_{n=2}^{2N} A_n e^{-\tau/\nu_n} \mathbf{N}_2(\nu_n). \quad (6.42)$$

O coeficiente de deslizamento viscoso [55], escrito na notação vetorial que se está utilizando, pode ser obtido a partir da expressão

$$\lim_{y \rightarrow \infty} [0 \quad 1] \mathbf{G}^h(\tau, \xi) = A_p. \quad (6.43)$$

Assim obtém-se

$$A_p = A_1. \quad (6.44)$$

Esses coeficientes de deslizamento térmico e viscoso são normalmente usados quando condições de escorregamento são associadas com soluções das equações de Navier-Stokes [33].

No próximo capítulo então, descreve-se os procedimentos realizados na implementação do método analítico de ordenadas discretas e apresenta-se os resultados numéricos obtidos para os problemas aqui apresentados.

7 RESULTADOS NUMÉRICOS

7.1 Descrição Geral

Para obter-se os resultados numéricos descritos no capítulo anterior, primeiramente deve-se definir o esquema de quadratura a ser usado na solução em ordenadas discretas. Desejando-se avaliar integrais no intervalo $[0, \infty)$, usa-se a transformação não-linear

$$u(\xi) = e^{-\xi} \tag{7.1}$$

para mapear o intervalo $[0, \infty)$ sob o intervalo $[0, 1]$ e então usa-se o esquema de Gauss-Legendre mapeado linearmente no intervalo $[0, 1]$.

Tendo definido o esquema de quadratura e desenvolvendo-se a implementação da solução em ordenadas discretas em FORTRAN, calcula-se os autovalores e autovetores usando-se a subrotina RG, do pacote matemático EISPACK [47], para resolver o problema de autovalor definido pela Eq. (5.31). A seguir, determina-se as constantes de separação ν_j pela Eq. (5.32) e os vetores elementares $\Phi_{\pm}(\nu_j)$ definidos nas Eqs. (5.35) e (5.36).

Para que a solução em ordenadas discretas, descrita pela Eq. (5.38), esteja completamente definida, resolve-se o sistema linear que define as constantes A_j , $j = 1, 2, \dots, 2N$ para cada problema, usando-se as subrotinas DGECO e DGESL do pacote matemático LINPACK [19]. Pode-se então avaliar as quantidades de interesse.

7.2 Resultados das soluções em ordenadas discretas

Devido a não existência de resultados exatos na literatura, ou provas teóricas de convergência para que se possa verificar a precisão dos resultados obtidos, busca-se então analisar alguns aspectos para dar suporte a confiabilidade dos resultados numéricos que se obtém.

Um desses aspectos se deve a convergência do método que estamos aplicando. Nota-se que, incrementando-se o número de pontos de quadratura usado, obtém-se convergência até o último dígito mostrado nos resultados. Neste trabalho, a partir de $N=30$ já se obtém precisão em todos os dígitos apresentados.

Procura-se também, para se ter confiabilidade nos resultados obtidos, compará-los com os já existentes na literatura. Como na literatura não são apresentados resultados numéricos, obtidos pela aplicação do modelo **S**, a todos os problemas e quantidades de interesse aqui descritos, utiliza-se de alguns resultados existentes obtidos pela aplicação do modelo BGK e modelo CES para realizar-se esta comparação.

Ressalta-se ainda, incrementando-se nossa análise dos resultados, que a relação de Onsager's [33]

$$Q_p = U_t \tag{7.2}$$

foi verificada neste trabalho, conforme pode-se observar na comparação da tabela 7.10 com a tabela 7.12, para diferentes valores do coeficiente de acomodação α . Uma derivação da relação de Onsager é apresentada no Anexo B desse trabalho.

Para completar este capítulo, apresenta-se nas tabelas 7.1–7.15 alguns resultados obtidos pela implementação em FORTRAN das soluções dos problemas de fluxo de Couette, fluxo de Poiseuille, “Creep” Térmico, Deslizamento Térmico e problema de Kramers.

7.2.1 Fluxo de Couette

Nas tabelas 7.1–7.6, referentes ao fluxo de Couette, considera-se a velocidade das placas $u_w = 1$ para gerar todos os resultados. Na tabela 7.1, o perfil de velocidade e de fluxo de calor foram gerados para o caso $2a = 1$ e coeficiente de acomodação $\alpha = 1.0$ a fim de compararmos com os da Ref. [11].

Nas tabelas 7.2 e 7.3, o perfil de velocidade e o perfil de fluxo de calor são comparados com resultados obtidos a partir do modelo CES [43] para o caso $2a = 1$ e diferentes valores do coeficiente de acomodação α . Utilizando-se ainda resultados apresentados na Ref. [43] para o modelo BGK, compara-se nas tabelas 7.4 e 7.5, respectivamente, a taxa de fluxo de partículas e a taxa de fluxo de calor para diferentes valores de α .

Como uma última quantidade de interesse avaliada para o fluxo de Couette, apresenta-se na tabela 7.6 resultados para a componente do tensor de pressão P_{xy} comparados com resultados apresentados na Ref. [3], obtidos utilizando-se $\alpha = 1.0$.

Tabela 7.1: *Fluxo de Couette com $u_w = 1$: perfil de velocidade u_c e de fluxo de calor q_c para o caso $2a = 1$ e $\alpha = 1.0$*

τ/a	u_c		q_c	
	BGK	S	BGK	S
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	-4.44498(-2)	-4.46405(-2)	5.27864(-3)	6.07574(-3)
0.2	-8.90639(-2)	-8.94424(-2)	1.06394(-2)	1.22242(-2)
0.3	-1.34020(-1)	-1.34580(-1)	1.61712(-2)	1.85236(-2)
0.4	-1.79526(-1)	-1.80258(-1)	2.19779(-2)	2.50653(-2)
0.5	-2.25845(-1)	-2.26734(-1)	2.81910(-2)	3.19638(-2)
0.6	-2.73338(-1)	-2.74364(-1)	3.49916(-2)	3.93759(-2)
0.7	-3.22559(-1)	-3.23689(-1)	4.26555(-2)	4.75392(-2)
0.8	-3.74467(-1)	-3.75655(-1)	5.16636(-2)	5.68672(-2)
0.9	-4.31190(-1)	-4.32349(-1)	6.30785(-2)	6.82756(-2)
1.0	-5.03723(-1)	-5.04599(-1)	8.23988(-2)	8.65722(-2)

Tabela 7.2: Fluxo de Couette com $u_w = 1$: perfil de velocidade $-u_c$ para o caso $2a = 1$

τ/a	$\alpha = 0.1$		$\alpha = 0.5$		$\alpha = 1.0$	
	CES	S	CES	S	CES	S
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	4.21138(-3)	4.39057(-3)	2.10475(-2)	2.19712(-2)	4.29400(-2)	4.46405(-2)
0.2	8.45518(-3)	8.80842(-3)	4.22286(-2)	4.40546(-2)	8.60736(-2)	8.94424(-2)
0.3	1.27668(-2)	1.32832(-2)	6.36889(-2)	6.63718(-2)	1.29611(-1)	1.34580(-1)
0.4	1.71885(-2)	1.78499(-2)	8.56013(-2)	8.90658(-2)	1.73802(-1)	1.80258(-1)
0.5	2.17748(-2)	2.25533(-2)	1.08189(-1)	1.12319(-1)	2.18965(-1)	2.26734(-1)
0.6	2.66031(-2)	2.74558(-2)	1.31765(-1)	1.36383(-1)	2.65547(-1)	2.74364(-1)
0.7	3.17943(-2)	3.26537(-2)	1.56821(-1)	1.61646(-1)	3.14241(-1)	3.23689(-1)
0.8	3.75661(-2)	3.83173(-2)	1.84230(-1)	1.88791(-1)	3.66275(-1)	3.75655(-1)
0.9	4.44157(-2)	4.48290(-2)	2.15983(-1)	2.19337(-1)	4.24420(-1)	4.32348(-1)
1.0	5.50626(-2)	5.42197(-2)	2.62841(-1)	2.61279(-1)	5.03454(-1)	5.04599(-1)

Tabela 7.3: Fluxo de Couette com $u_w = 1$: perfil de fluxo de calor q_c para o caso $2a = 1$

τ/a	$\alpha = 0.1$		$\alpha = 0.5$		$\alpha = 1.0$	
	CES	S	CES	S	CES	S
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	7.67912(-4)	8.86758(-4)	3.25143(-3)	3.86036(-3)	4.92200(-3)	6.07574(-3)
0.2	1.54464(-3)	1.78677(-3)	6.53651(-3)	7.77360(-3)	9.88757(-3)	1.22242(-2)
0.3	2.33962(-3)	2.71442(-3)	9.89106(-3)	1.17969(-2)	1.49428(-2)	1.85236(-2)
0.4	3.16366(-3)	3.68660(-3)	1.33558(-2)	1.59974(-2)	2.01395(-2)	2.50653(-2)
0.5	4.03012(-3)	4.72482(-3)	1.69806(-2)	2.04597(-2)	2.55397(-2)	3.19638(-2)
0.6	4.95687(-3)	5.85900(-3)	2.08311(-2)	2.53011(-2)	3.12236(-2)	3.93759(-2)
0.7	5.97051(-3)	7.13514(-3)	2.50037(-2)	3.07006(-2)	3.73061(-2)	4.75392(-2)
0.8	7.11669(-3)	8.63462(-3)	2.96616(-2)	3.69732(-2)	4.39767(-2)	5.68672(-2)
0.9	8.49586(-3)	1.05406(-2)	3.51587(-2)	4.48226(-2)	5.16363(-2)	6.82756(-2)
1.0	1.06484(-2)	1.38401(-2)	4.33653(-2)	5.80004(-2)	6.23423(-2)	8.65722(-2)

Tabela 7.4: Fluxo de Couette com $u_w = 1$: taxa de fluxo de partículas U_c

2a	$\alpha = 0.1$		$\alpha = 0.5$		$\alpha = 1.0$	
	BGK	S	BGK	S	BGK	S
0.01	-8.00320(-2)	-8.00534(-2)	-4.77540(-1)	-4.77616(-1)	-1.29070	-1.29080
0.10	-4.81420(-2)	-4.82051(-2)	-2.74926(-1)	-2.75239(-1)	-6.85780(-1)	-6.86397(-1)
1.00	-2.34756(-2)	-2.36446(-2)	-1.16120(-1)	-1.16739(-1)	-2.32188(-1)	-2.32965(-1)
10.0	-1.17090(-2)	-1.17390(-2)	-3.26636(-2)	-3.27074(-2)	-4.22811(-2)	-4.23132(-2)

Tabela 7.5: Fluxo de Couette com $u_w = 1$: taxa de fluxo de calor Q_c

2a	$\alpha = 0.1$		$\alpha = 0.5$		$\alpha = 1.0$	
	BGK	S	BGK	S	BGK	S
0.01	3.25959(-2)	3.26557(-2)	1.91891(-1)	1.92193(-1)	5.05517(-1)	5.06169
0.10	1.66805(-2)	1.69599(-2)	9.17172(-2)	9.31118(-2)	2.12309(-1)	2.15086(-1)
1.00	4.58954(-3)	5.24981(-3)	1.99715(-2)	2.25189(-2)	3.13629(-2)	3.47258(-2)
10.0	1.98991(-4)	2.91222(-4)	4.29861(-4)	6.09261(-4)	3.62529(-4)	4.95270(-4)

Tabela 7.6: Fluxo de Couette com $u_w = 1$: componente do tensor de pressão P_{xy} , para o caso $\alpha = 1.0$

2a	BGK	S
1.0(-2)	9.9139801(-1)	9.9139796(-1)
2.0(-1)	9.8317550(-1)	9.8117529(-1)
1.0(-1)	9.2579682(-1)	9.2578942(-1)
1.0	6.0072919(-1)	6.0054357(-1)
2.0	4.4364669(-1)	4.4341971(-1)
3.0	3.5353372(-1)	3.5333149(-1)
1.0(1)	1.4731246(-1)	1.4725985(-1)
2.0(1)	8.0447692(-2)	8.0431772(-2)
1.0(3)	1.7688589(-3)	1.7688511(-3)
1.0(7)	1.7724535(-7)	1.7724535(-7)

Nota-se que os resultados obtidos pela derivação do Modelo S apresentam maior diferença se comparados com os do Modelo CES (obtem-se no máximo um dígito de concordância) e aproximam-se dos obtidos pelo Modelo BGK, onde consegue-se de um a dois dígitos de concordância.

7.2.2 Fluxo de Poiseuille

Esta aproximação com resultados do Modelo BGK também se observa quando trabalha-se com o fluxo de Poiseuille. Nas tabelas 7.7 e 7.8, apresenta-se, respectivamente, resultados para o perfil de velocidade e taxa de fluxo de partículas comparados com resultados da Ref. [3]. Para diferentes valores do coeficiente de acomodação e considerando-se $2a = 2$, obteve-se dois dígitos de concordância entre os resultados dos dois modelos.

Tabela 7.7: Fluxo de Poiseuille : perfil de velocidade u_p para o caso $2a = 2$

τ/a	$\alpha = 0.5$		$\alpha = 0.8$		$\alpha = 1.0$	
	BGK	S	BGK	S	BGK	S
0.0	-3.652222	-3.676046	-2.319616	-2.341697	-1.874577	-1.895706
0.1	-3.644836	-3.668546	-2.312148	-2.334097	-1.867059	-1.888047
0.2	-3.622577	-3.645940	-2.289638	-2.311191	-1.844401	-1.864966
0.3	-3.585117	-3.607901	-2.251759	-2.272647	-1.806271	-1.826129
0.4	-3.531852	-3.553821	-2.197901	-2.217854	-1.752062	-1.770921
0.5	-3.461789	-3.482705	-2.127072	-2.145810	-1.680778	-1.698341
0.6	-3.373321	-3.392939	-2.037666	-2.054903	-1.590822	-1.606779
0.7	-3.263728	-3.281800	-1.926991	-1.942425	-1.479519	-1.493545
0.8	-3.127917	-3.144185	-1.790039	-1.803354	-1.341927	-1.353676
0.9	-2.954020	-2.968215	-1.615281	-1.626121	-1.166756	-1.175838
1.0	-2.676407	-2.688084	-1.340372	-1.348113	-8.939247(-1)	-8.996835(-1)

Tabela 7.8: *Fluxo de Poiseuille: taxa de fluxo de partículas U_p*

2a	$\alpha = 0.5$		$\alpha = 0.8$		$\alpha = 1.0$	
	BGK	S	BGK	S	BGK	S
0.05	-5.223296	-5.242765	-3.089711	-3.097846	-2.302256	-2.307195
0.10	-4.556406	-4.580089	-2.707741	-2.718471	-2.032714	-2.039548
0.30	-3.778472	-3.806140	-2.244771	-2.259815	-1.702474	-1.713106
0.50	-3.544371	-3.571767	-2.102266	-2.118965	-1.601874	-1.614453
0.70	-3.437669	-3.464010	-2.038767	-2.056251	-1.559186	-1.572999
0.90	-3.383887	-3.409028	-2.009241	-2.027095	-1.541800	-1.556450
1.00	-3.368218	-3.392768	-2.001867	-2.019813	-1.538678	-1.553646
2.00	-3.376574	-3.396464	-2.041385	-2.058900	-1.594857	-1.611101
5.00	-3.774402	-3.788425	-2.438234	-2.452641	-1.990767	-2.005429
7.00	-4.088108	-4.100498	-2.746112	-2.758929	-2.294932	-2.308077
9.00	-4.410190	-4.421533	-3.063464	-3.075045	-2.609254	-2.621081

7.2.3 “Creep” Térmico

Para o fluxo de “Creep” Térmico, apresenta-se na tabela 7.9 os resultados perfil de velocidade, para o caso $2a = 2$ e na tabela 7.10 a taxa de fluxo de partículas, ambas comparados com resultados da Ref. [3]. Nota-se que, nesse caso, os resultados não apresentam a mesma concordância que obteve-se com os problemas apresentados anteriormente. Resultados estão sendo avaliados, para posterior comparação com os aqui apresentados, considerando-se o livre caminho médio em termos da condutividade térmica, pois acredita-se que assim obtém-se mais dados para análise comparativa entre problemas de calor.

Tabela 7.9: “Creep” Térmico: perfil de velocidade u_t para o caso $2a = 2$

τ/a	$\alpha = 0.5$		$\alpha = 0.8$		$\alpha = 1.0$	
	BGK	S	BGK	S	BGK	S
0.0	2.439084(-1)	3.441850(-1)	2.420532(-1)	3.317194(-1)	2.412645(-1)	3.249354(-1)
0.1	2.434617(-1)	3.434690(-1)	2.413836(-1)	3.306812(-1)	2.404602(-1)	3.237130(-1)
0.2	2.421049(-1)	3.412986(-1)	2.393495(-1)	3.275341(-1)	2.380167(-1)	3.200075(-1)
0.3	2.397858(-1)	3.376035(-1)	2.358715(-1)	3.221757(-1)	2.338381(-1)	3.136982(-1)
0.4	2.364086(-1)	3.322554(-1)	2.308045(-1)	3.144197(-1)	2.277487(-1)	3.045653(-1)
0.5	2.318176(-1)	3.250471(-1)	2.239126(-1)	3.039653(-1)	2.194636(-1)	2.922552(-1)
0.6	2.257644(-1)	3.156501(-1)	2.148202(-1)	2.903375(-1)	2.085296(-1)	2.762100(-1)
0.7	2.178377(-1)	3.035240(-1)	2.029065(-1)	2.727580(-1)	1.941984(-1)	2.555182(-1)
0.8	2.072854(-1)	2.876877(-1)	1.870416(-1)	2.498222(-1)	1.751119(-1)	2.285414(-1)
0.9	1.924101(-1)	2.659330(-1)	1.646908(-1)	2.183977(-1)	1.482365(-1)	1.916496(-1)
1.0	1.643019(-1)	2.265443(-1)	1.227565(-1)	1.622027(-1)	9.806183(-2)	1.262406(-1)

Tabela 7.10: “Creep” Térmico: taxa de fluxo de partículas U_t

$2a$	$\alpha = 0.5$		$\alpha = 0.8$		$\alpha = 1.0$	
	BGK	S	BGK	S	BGK	S
0.05	1.653689	1.765080	1.080865	1.126604	8.452893(-1)	8.726031(-1)
0.10	1.266442	1.401214	8.659805(-1)	9.262419(-1)	6.949272(-1)	7.326778(-1)
0.30	7.580824(-1)	9.094469(-1)	5.712072(-1)	6.527348(-1)	4.841992(-1)	5.408308(-1)
0.50	5.705723(-1)	7.155058(-1)	4.551664(-1)	5.423717(-1)	3.984993(-1)	4.629360(-1)
0.70	4.649666(-1)	6.004731(-1)	3.864581(-1)	4.747735(-1)	3.463781(-1)	4.146525(-1)
0.90	3.953837(-1)	5.216112(-1)	3.392428(-1)	4.267657(-1)	3.097001(-1)	3.798075(-1)
1.00	3.685435(-1)	4.904286(-1)	3.205049(-1)	4.072612(-1)	2.948999(-1)	3.654556(-1)
2.00	2.245046(-1)	3.143404(-1)	2.129203(-1)	2.884905(-1)	2.062429(-1)	2.740809(-1)
5.00	1.075322(-1)	1.578737(-1)	1.116570(-1)	1.617243(-1)	1.142597(-1)	1.639865(-1)
7.00	8.036291(-2)	1.193804(-1)	8.533480(-2)	1.256771(-1)	8.850228(-2)	1.295007(-1)
9.00	6.421908(-2)	9.606501(-2)	6.907720(-2)	1.027228(-1)	7.218664(-2)	1.068076(-1)

Na tabela 7.11 apresenta-se resultados para o perfil de fluxo de calor para ambos problemas, Poiseuille e “Creep” Térmico, baseados no modelo S. Comparações não foram realizadas com outros modelos pois não se tinha disponível, nas referências com que se trabalhou, estas quantidades avaliadas para estes valores calculados. Pelo mesmo motivo, mostra-se juntamente na tabela 7.12 os resultados obtidos para a taxa de fluxo de calor de ambos problemas.

Tabela 7.11: *Fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico: perfil de fluxo de calor q_p e q_t para o caso $2a = 2$*

τ/a	$\alpha = 0.5$		$\alpha = 0.8$		$\alpha = 1.0$	
	q_p	$-q_t$	q_p	$-q_t$	q_p	$-q_t$
0.0	3.819458(-1)	1.560345	3.593151(-1)	1.418244	3.466887(-1)	1.336589
0.1	3.803740(-1)	1.558495	3.576529(-1)	1.415475	3.449750(-1)	1.333266
0.2	3.756033(-1)	1.552869	3.526092(-1)	1.407006	3.397760(-1)	1.323163
0.3	3.674606(-1)	1.543234	3.440059(-1)	1.392634	3.309108(-1)	1.305850
0.4	3.556282(-1)	1.529164	3.315164(-1)	1.371561	3.180487(-1)	1.280545
0.5	3.395882(-1)	1.509968	3.146111(-1)	1.342788	3.006544(-1)	1.245980
0.6	3.185106(-1)	1.484546	2.924450(-1)	1.304653	2.778771(-1)	1.200143
0.7	2.910084(-1)	1.451090	2.636174(-1)	1.254417	2.483129(-1)	1.139727
0.8	2.545136(-1)	1.406330	2.255600(-1)	1.187140	2.094052(-1)	1.058769
0.9	2.030982(-1)	1.343005	1.724266(-1)	1.091888	1.553891(-1)	9.440976(-1)
1.0	1.038975(-1)	1.224549	7.269124(-2)	9.140633(-1)	5.576944(-2)	7.303207(-1)

Tabela 7.12: Fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico: taxa de fluxo de calor Q_p e Q_t

$2a$	$\alpha = 0.5$		$\alpha = 0.8$		$\alpha = 1.0$	
	Q_p	$-Q_t$	Q_p	$-Q_t$	Q_p	$-Q_t$
0.05	1.765080	10.100611	1.126604	6.338332	8.726031(-1)	4.831144
0.10	1.401214	7.976847	9.262419(-1)	5.207173	7.326778(-1)	4.05460
0.30	9.094469(-1)	4.983364	6.527348(-1)	3.549437	5.408308(-1)	2.895432
0.50	7.155058(-1)	3.798980	5.423717(-1)	2.850572	4.629360(-1)	2.391702
0.70	6.004731(-1)	3.108894	4.747735(-1)	2.421921	4.146525(-1)	2.074602
0.90	5.216112(-1)	2.644884	4.267657(-1)	2.120914	3.798075(-1)	1.846710
1.00	4.904286(-1)	2.463996	4.072612(-1)	2.000095	3.654556(-1)	1.753750
2.00	3.143404(-1)	1.478801	2.884905(-1)	1.295901	2.740809(-1)	1.189527
5.00	1.578737(-1)	6.789398(-1)	1.617243(-1)	6.406427	1.639865(-1)	6.166694(-1)
7.00	1.193804(-1)	4.990292(-1)	1.256771(-1)	4.789028(-1)	1.295007(-1)	4.661777(-1)
9.00	9.606501(-2)	3.943911(-1)	1.027228(-1)	3.820983(-1)	1.068076(-1)	3.742993(-1)

7.2.4 Deslizamento Térmico e Problema de Kramers

Na tabela 7.13, tem-se os resultados para o perfil de velocidade para o problema de Deslizamento Térmico, avaliados para diferentes valores de α . Para o problema de Kramers, estes resultados são apresentados na tabela 7.15. Nota-se que, os resultados para o problema de Kramers ao serem comparados com os resultados do modelo BGK [3], apresentam concordância de 2 a 3 dígitos. Esta concordância também mantém-se quando avalia-se o coeficiente de deslizamento viscoso, conforme pode ser observado na tabela 7.14. Na mesma tabela encontra-se os resultados obtidos para o coeficiente de deslizamento térmico, com uma diferença novamente significativa, conforme comentou-se ao abordar o problema de “Creep” Térmico.

Ressalta-se que na tabela 7.13 apresenta-se o perfil de velocidade avaliado por $2u_d$ para comparação com a Ref. [3].

Tabela 7.13: *Deslizamento Térmico: perfil de velocidade u_d*

τ	$\alpha = 0.6$		$\alpha = 0.8$		$\alpha = 1.0$	
	BGK	S	BGK	S	BGK	S
0.0	3.225358(-1)	4.538591(-1)	2.692240(-1)	3.711238(-1)	2.185558(-1)	2.952344(-1)
0.2	4.304719(-1)	6.104791(-1)	4.086951(-1)	5.691342(-1)	3.875591(-1)	5.300430(-1)
0.4	4.816888(-1)	6.906419(-1)	4.756064(-1)	6.720966(-1)	4.695371(-1)	6.541118(-1)
0.6	5.164243(-1)	7.474742(-1)	5.211386(-1)	7.454564(-1)	5.255086(-1)	7.429497(-1)
0.8	5.420738(-1)	7.908598(-1)	5.548278(-1)	8.016237(-1)	5.670040(-1)	8.111668(-1)
1.0	5.618698(-1)	8.252436(-1)	5.808647(-1)	8.462270(-1)	5.991177(-1)	8.654474(-1)
1.4	5.902961(-1)	8.761244(-1)	6.183047(-1)	9.123643(-1)	6.453593(-1)	9.460954(-1)
1.8	6.094128(-1)	9.114521(-1)	6.435172(-1)	9.583741(-1)	6.765404(-1)	1.002307
2.0	6.166854(-1)	9.251517(-1)	6.531161(-1)	9.762356(-1)	6.884206(-1)	1.024153
2.5	6.303740(-1)	9.513650(-1)	6.711948(-1)	1.010443	7.108100(-1)	1.066028
3.0	6.396728(-1)	9.695207(-1)	6.834851(-1)	1.034161	7.260418(-1)	1.095092
5.0	6.565604(-1)	1.003343	7.058284(-1)	1.078411	7.537610(-1)	1.149395
7.0	6.615180(-1)	1.013522	7.123957(-1)	1.091750	7.619180(-1)	1.165793
10.0	6.635590(-1)	1.017747	7.151015(-1)	1.097294	7.652814(-1)	1.172616
15.0	6.641805(-1)	1.018906	7.158449(-1)	1.098816	7.662061(-1)	1.174491
20.0	6.641805(-1)	1.019031	7.159260(-1)	1.098980	7.663071(-1)	1.174694

Tabela 7.14: *Coefficientes de deslizamento térmico A_t e de deslizamento viscoso A_p*

α	A_t -BGK	A_t -S	A_p -BGK	A_p -S
0.01	5.028545(-1)	7.548846(-1)	1.766386(2)	1.766495(2)
0.10	5.283566(-1)	7.981907(-1)	1.710313(1)	1.711289(1)
0.20	5.563021(-1)	8.449652(-1)	8.224902	8.233445
0.30	5.838476(-1)	8.903832(-1)	5.255112	5.262546
0.40	6.110039(-1)	9.345014(-1)	3.762619	3.769046
0.50	6.377813(-1)	9.773733(-1)	2.861190	2.866704
0.60	6.641898(-1)	1.019050	2.255410	2.260010
0.70	6.902391(-1)	1.059578	1.818667	1.822617
0.80	7.159384(-1)	1.099005	1.487654	1.490942
0.90	7.412966(-1)	1.137374	1.227198	1.229898
1.00	7.663225(-1)	1.174724	1.016191	1.018372

Tabela 7.15: *Problema de Kramers: perfil de velocidade u_k*

τ	$\alpha = 0.6$		$\alpha = 0.8$		$\alpha = 1.0$	
	BGK	S	BGK	S	BGK	S
0.0	1.805584	1.799554	1.109556	1.105374	7.071068(-1)	7.043622(-1)
0.2	2.182908	2.175729	1.457664	1.451978	1.027415	1.023037
0.4	2.453793	2.447136	1.717270	1.711784	1.276161	1.271763
0.6	2.698309	2.692475	1.954782	1.949830	1.506903	1.502820
0.8	2.929448	2.924506	2.181057	2.176739	1.728463	1.724809
1.0	3.152488	3.148423	2.400515	2.396848	1.944445	1.941256
1.4	3.584033	3.581564	2.827181	2.824734	2.366367	2.364080
1.8	4.004171	4.003044	3.244222	3.242822	2.780389	2.778897
2.0	4.211588	4.211038	3.450500	3.449557	2.985559	2.984416
2.5	4.725143	4.725800	3.961982	3.961999	3.495016	3.494617
3.0	5.234016	5.235599	4.469502	4.470262	4.001214	4.001393
5.0	7.249226	7.252795	6.482403	6.484772	6.011854	6.013302
7.0	9.253350	9.257619	8.485905	8.488845	8.014746	8.016648
10.0	1.225495(1)	1.225953(1)	1.148726(1)	1.149046(1)	1.101587(1)	1.101798(1)
15.0	1.225495(1)	1.726004(1)	1.648761(1)	1.649089(1)	1.601616(1)	1.601833(1)
20.0	2.225540(1)	2.226009(1)	2.148765(1)	2.149093(1)	2.101619(1)	2.101837(1)

Para concluir este capítulo, salienta-se que, usando $N = 50$ para gerar os resultados mostrados nas tabelas 7.1–7.14, o tempo computacional de execução da implementação em FORTRAN da solução em ordenadas discretas, para cada valor do coeficiente de acomodação α , não leva mais do que três segundos em um AuthenticAMD 56MB, demonstrando a eficiência do método ADO.

8 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Observa-se ao final deste trabalho que o uso de equações modelo tem se mostrado uma boa alternativa na abordagem de problemas da dinâmica de gases rarefeitos. Em particular, o uso de núcleos sintéticos torna o trabalho computacional simples, fácil de ser implementado e produz resultados com satisfatória precisão (obtem-se de 1 a 2 dígitos de concordância com modelos de frequência variável). Assim, aplicando-se o Modelo S na formulação dos problemas de fluxo de Couette, Poiseuille, Creep Térmico, Deslizamento Térmico e de Kramers, estas características foram confirmadas.

Confirma-se também, através dos resultados apresentados, as observações feitas por Sharipov [33]: os resultados aqui obtidos, segundo o “Modelo S”, para problemas isotérmicos aproximam-se dos resultados fornecidos na literatura utilizando o modelo BGK, que são satisfatoriamente bem avaliados por este modelo [33]. Assim, encontra-se maior diferença entre os resultados fornecidos pelos dois modelos quando se abordam problemas não-isotérmicos. Para tanto, busca-se ainda, generalizar este trabalho, considerando na Eq. (3.2), o parâmetro

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

e avaliar os problemas aqui apresentados usando então o livre caminho médio l baseado na condutividade térmica. Acredita-se que tal procedimento deve contribuir na análise comparativa dos problemas de calor, para os quais resultados mais diferenciados foram encontrados pelo modelo S e BGK.

Considera-se então que o objetivo desse trabalho foi atingido, pois obteve-se de maneira unificada soluções para os problemas que se desejava e conseguiu-se gerar resultados com excelente convergência, através da aplicação do método analítico de ordenadas discretas. Dessa forma, contribuiu-se então, com uma derivação de problemas que não se encontra na literatura, através da solução de problemas segundo o Modelo S, com condições de contorno difuso-especular e com uma abordagem numérica para as soluções, gerando resultados novos que servirão de comparação entre outros modelos e métodos computacionais.

ANEXO A SOLUÇÃO GERAL DA EQUAÇÃO LINEARIZADA DE BOLTZMANN NO ESTADO ESTACIONÁRIO

Na teoria cinética de gases, os fenômenos são descritos matematicamente pela equação de Boltzmann, ou sua forma linearizada.

Um estudo detalhado sobre a derivação e propriedades da BE, bem como da LBE, para gases rarefeitos encontra-se, por exemplo, nos livros de Williams [54] e Cercignani [14, 16].

Sendo a LBE básica no estudo de fenômenos em teoria cinética de gases e observando-se que as equações modelos apresentadas por Barichello e Siewert [9], foram baseadas nas soluções exatas, dessa equação, apresenta-se aqui, seguindo Cercignani [15], alguns aspectos sobre a existência e estrutura da solução geral da LBE, em estado estacionário.

A.1 Definição do problema

Neste estudo, busca-se soluções da equação linearizada de Boltzmann, unidimensional e no estado estacionário [15]

$$c_x \frac{\partial}{\partial x} h = Lh, \quad (\text{A.1})$$

onde $h = h(x, c_x, c_y, c_z) = h(x, \mathbf{c})$ representa uma perturbação causada a distribuição de equilíbrio, x é a variável espacial, \mathbf{c} o vetor velocidade das partículas e L é o operador de colisão linearizado em relação a distribuição Maxwelliana absoluta f_0 .

Seguindo Cercignani [15], busca-se soluções da equação (A.1) na forma

$$h(x, \mathbf{c}) = e^{\lambda x} g(\mathbf{c}). \quad (\text{A.2})$$

Assim, substituindo-se (A.2) na Eq. (A.1), encontra-se que $g(\mathbf{c})$ satisfaz

$$Lg = \lambda c_x g. \quad (\text{A.3})$$

Neste ponto, se tem duas questões básicas a serem estudadas. Uma das questões é determinar se as soluções da Eq. (A.3) são suficientes para construir a solução geral da Eq. (A.1); a outra, consiste em estudar o conjunto dos autovalores λ para os quais a Eq. (A.3) tem solução. Neste capítulo, apresenta-se um estudo para a primeira questão. A segunda é abordada com detalhes por Cercignani [16].

A.2 Redução a um problema de autovalores

O problema descrito pela Eq. (A.3), como apontado por Cercignani [15], é difícil porque há uma interação entre L e o operador multiplicativo c_x . Além disso, a existência de invariantes por colisão (funções ψ_α , tais que $L\psi_\alpha = 0$), impede L de ser um operador estritamente negativo. Sendo assim, decompõem-se o espaço de Hilbert \mathcal{H} , de funções de \mathbf{c} que são de quadrado integrável em relação ao peso f_0 , em dois subespaços ortogonais: \mathcal{H}^+ , contendo todas as funções pares de c_x e \mathcal{H}^- , contendo as funções ímpares. Qualquer função g pode então ser escrita como

$$g = g^+ + g^-, \quad (\text{A.4})$$

onde

$$g^+ = \frac{1}{2}(g + P_1 g), \quad (\text{A.5})$$

$$g^- = \frac{1}{2}(g - P_1 g) \quad (\text{A.6})$$

e P_1 é o operador que reflete c_x

$$P_1 g(c_x, c_y, c_z) = g(-c_x, c_y, c_z). \quad (\text{A.7})$$

Considerando que L é invariante em relação a qualquer reflexão na velocidade, contanto que a distribuição Maxwelliana f_0 não tenha componentes ao longo do eixo x para a velocidade, ou seja

$$P_1 L g = L P_1 g, \quad (\text{A.8})$$

obtém-se

$$P_1(c_x g) = -c_x P_1 g. \quad (\text{A.9})$$

Aplicando o operador $\frac{1}{2}(I \pm P_1)$, onde I denota a identidade, em ambos os lados da equação (A.3), obtém-se o sistema equivalente

$$L g^+ = \lambda c_x g^-, \quad (\text{A.10})$$

$$L g^- = \lambda c_x g^+, \quad (\text{A.11})$$

onde as equações (A.9) e (A.8) foram usadas e $g^+ \in \mathcal{H}^+$, $g^- \in \mathcal{H}^-$.

Nas equações (A.10) e (A.11), L denota a restrição apropriada de L a \mathcal{H}^+ e \mathcal{H}^- respectivamente. Agora, quatro dos invariantes de colisão $(\psi_0, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$ estão em \mathcal{H}^+ e somente um (ψ_1) está em \mathcal{H}^- . Também, qualquer solução do sistema das equações (A.10) e (A.11) para $\lambda = 0$ é tal que g^- é ortogonal a $\psi_1 = c_x$, pois aplicando o produto escalar (\cdot, \cdot) em \mathcal{H} de ambos os lados da equação (A.10) com $\psi_0 = 1$ obtém-se

$$\lambda(c_x, g^-) = 0. \quad (\text{A.12})$$

Toma-se vantagem deste fato para substituir a equação (A.11) por

$$-Ng^- = \lambda c_x g^+ \quad (\text{A.13})$$

onde

$$Ng^- = -Lg^-, \quad \text{se } (c_x, g^-) = 0, \quad (\text{A.14})$$

ou

$$Nc_x = k_* c_x, \quad (\text{A.15})$$

sendo k_* qualquer constante positiva a ser fixada. O sistema das equações (A.10) e (A.13) é essencialmente equivalente ao sistema das equações (A.10) e (A.11), pois $-N$ difere de L em um subespaço unidimensional R que é ortogonal a g^- , devido a equação (A.12), a menos que $\lambda = 0$; portanto perde-se somente uma solução $g^- = c_x$ correspondente a $\lambda = 0$, que pode ser adicionada depois, se necessário.

Assim \mathcal{H}^- é dividido em $\mathcal{H}_1^- \oplus R$, onde \mathcal{H}_1^- é ortogonal a c_x e a todo invariante por colisão.

Além disso N tem uma inversa única N^{-1} em \mathcal{H}_1^- (N^{-1} é limitada dependendo de condições do potencial de interação). Isto implica que N tem também uma inversa em $\mathcal{H}^- = \mathcal{H}_1^- \oplus R$ dada por

$$N^{-1}g^- = -L^{-1}g^- \quad \text{se } (c_x, g^-) = 0, \quad (\text{A.16})$$

ou

$$N^{-1}c_x = c_x/k. \quad (\text{A.17})$$

Assim partindo da Eq. (A.13) encontra-se

$$g^- = -\lambda N^{-1}(c_x g^+), \quad (\text{A.18})$$

que substituída na Eq. (A.10) resulta em

$$Lg^+ = -\lambda^2(c_x N^{-1} c_x)g^+, \quad (g^+ \in \mathcal{H}^+). \quad (\text{A.19})$$

Esta é uma equação para g^+ ; uma vez conhecida g^+ , determina-se g^- pela Eq. (A.18).

Como referido por Cercignani [15], pode parecer que o problema ficou desnecessariamente mais complicado, pois substitui-se a Eq. (A.3), que contém o operador L e o operador multiplicativo c_x , pela Eq. (A.19), que contém L e o operador $c_x N^{-1} c_x$; o último é mais complicado do que um operador multiplicativo e não é avaliado em uma forma explícita. A vantagem que se tem é, portanto, a seguinte: o operador $c_x N^{-1} c_x$ atuando em funções de \mathcal{H}^+ é positivo definido. Isto é facilmente verificado pois N^{-1} é positivo definido, de acordo com a equação (A.17) (L^{-1} é negativo definido em qualquer subespaço ortogonal aos invariantes por colisão e $k > 0$); como consequência

$$(g^+, c_x N^{-1} c_x g^+) = (c_x g^+, N^{-1}(c_x g^+)) > 0. \quad (\text{A.20})$$

Assim existe um operador autoadjunto C [18] tal que

$$c_x N^{-1} c_x = C^2. \quad (\text{A.21})$$

O operador C terá uma inversa única C^{-1} , pois $c_x N^{-1} c_x$ é positivo definido.

Usando a Eq. (A.21), reescreve-se a Eq. (A.19) na forma

$$Lg^+ = -\lambda^2 C^2 g^+ \quad (\text{A.22})$$

ou

$$M\varphi = -\lambda^2\varphi, \quad (\text{A.23})$$

onde considera-se

$$\varphi = Cg^+ \quad (\text{A.24})$$

e

$$M = C^{-1}LC^{-1} \quad (\text{A.25})$$

Além disso, nota-se que

$$\begin{aligned} (\varphi, M\psi) &= -(\varphi, C^{-1}LC^{-1}\psi) = -(C^{-1}\varphi, LC^{-1}\psi) = \\ &= -(LC^{-1}\varphi, C^{-1}\psi) = -(C^{-1}LC^{-1}\varphi, \psi) = (M\varphi, \psi). \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Logo M é um operador autoadjunto e também não-negativo, pois

$$(\varphi, M\varphi) = -(\varphi, C^{-1}LC^{-1}\varphi) = -([C^{-1}\varphi], L[C^{-1}\varphi]) \geq 0, \quad (\text{A.27})$$

sendo que se tem a igualdade se e somente se $C^{-1}\varphi$ é um invariante por colisão. Assim, a equação (A.23) admitirá um conjunto de autofunções φ_λ com $\lambda^2 > 0$ ou $\lambda^2 = 0$; as últimas são quatro autofunções dadas por $\varphi_\lambda = C\psi_\alpha$ ($\alpha = 0, 2, 3, 4$), enquanto as outras, genericamente falando, correspondem a um espectro parcialmente discreto e parcialmente contínuo [15]. O conjunto das φ_α , de acordo com [22], é completo para as funções de \mathcal{H}_1^+ , isto é, para qualquer $\varphi \in \mathcal{H}_1^+$ pode-se escrever

$$\varphi(\mathbf{c}) = \sum_{\alpha=0, \alpha \neq 1}^4 A_\alpha \varphi_\alpha + \int_{\lambda_0}^{\lambda_\infty} \varphi_\lambda(\mathbf{c}) A_\lambda^+ d\lambda, \quad (\text{A.28})$$

onde $0 < \lambda_0 < \infty$; $0 < \lambda_\infty < \infty$ e A_α são constantes arbitrárias. A_λ^+ é uma função arbitrária de λ e a integral pode ser substituída por uma soma sobre um conjunto discreto.

A equação (A.28) implica que qualquer função h^+ tal que $Ch^+ \in \mathcal{H}_1^+$,
ou

$$|(h^+, c_x N^{-1} c_x h^+)| < \infty, \quad (\text{A.29})$$

pode ser expandida como

$$h^+ = \sum_{\alpha=0, \alpha \neq 1}^4 A_\alpha \psi_\alpha + \int_{\lambda_0}^{\lambda_\infty} g_\lambda^+(\mathbf{c}) A_\lambda^+ d\lambda, \quad (\text{A.30})$$

onde

$$g_\lambda^+ = C^{-1} \varphi_\lambda. \quad (\text{A.31})$$

Aqui há uma extensão do significado de C^{-1} sobre \mathcal{H}_1^+ quando φ_λ^+ pertence ao espectro contínuo; isto pode ser feito interpretando a Eq. (A.31) no sentido de funções generalizadas (esta interpretação é necessária também para as Eqs. (A.28) e (A.30)).

Nota-se que, dada a função h^+ , os coeficientes A_α , A_λ^+ , nas Eqs. (A.28) e (A.30), são determinados pelas relações de ortogonalidade que seguem da Eq. (A.23)

$$(\varphi_\lambda, \varphi_{\lambda'}) = 0 \quad \text{se} \quad \lambda \neq \lambda', \quad (\text{A.32})$$

ou

$$(g_\lambda, c_x N^{-1} [c_x g_{\lambda'}]) = 0 \quad \text{se} \quad \lambda \neq \lambda'. \quad (\text{A.33})$$

Assim os coeficientes A_α na Eq. (A.30) são

$$A_\alpha = (c_x N^{-1}[c_x \psi_\alpha], h) / (c_x N^{-1}[c_x \psi_\alpha], \psi_\alpha) \quad (\alpha = 0, 2, 3, 4), \quad (\text{A.34})$$

devido a λ_α denotar não os quatro invariantes por colisão elementares, mas suas combinações lineares que satisfazem

$$(c_x N^{-1}[c_x \psi_\alpha], \psi_\beta) = 0, \quad (\alpha \neq \beta). \quad (\text{A.35})$$

Em particular, a Eq. (A.34) estabelece que

$$A_0 = (c_x^2, h) / (c_x^2, 1)$$

$$A_\alpha = (c_x L^{-1}[c_x \psi_\alpha], h) / (c_x L^{-1}[c_x \psi_\alpha], \psi_\alpha); \quad (\alpha = 2, 3, 4). \quad (\text{A.37})$$

Tendo calculado g_λ^+ , determina-se a partir da Eq. (A.18) as autosoluções g_λ^- da Eq. (A.3); para ser preciso, cada $g_\lambda^+(\lambda \neq 0)$ produz duas g_λ^- diferentes (opostas uma da outra), pois pode-se tomar para λ na equação (A.13), as raízes quadradas de λ^2 . Agora, da Eq. (A.30) concluí-se que qualquer h^- que pode ser escrito na forma

$$h^- = N^{-1} c_x h^+, \quad (c_x h^+ = N h^-), \quad (\text{A.38})$$

com h^+ satisfazendo a equação (A.31), terá uma expansão da seguinte forma

$$h^- = \sum_{\alpha=0, \alpha \neq 1}^4 A_\alpha N^{-1}(c_x \psi_\alpha) + \int_{\lambda_0}^{\lambda_\infty} N^{-1}[c_x g^+(\mathbf{c})] A_\lambda^+ d\lambda, \quad (\text{A.39})$$

ou, usando as Eqs. (A.17) e (A.18), pode-se reescrever

$$h^- = A_1 \psi_1 + \sum_{\alpha=2}^4 B_\alpha L^{-1}(c_x \psi_\alpha) + \int_{\lambda_0}^{\lambda_\infty} g_\lambda^- A_\lambda^- d\lambda, \quad (\text{A.40})$$

onde considera-se

$$A_1 = A_0/k,$$

$$B_\alpha = A_\alpha, \quad (\alpha = 2, 3, 4), \quad (\text{A.42})$$

$$A_\lambda^+ = -A_\lambda^-/\lambda.$$

A Eq. (A.40) é válida desde que

$$|(Nh^-, h^-)| < \infty, \quad (\text{A.44})$$

como segue das Eqs. (A.29) e (A.38).

A.3 Resultados Básicos

Pode-se agora provar os seguintes resultados:

A.3.1 Teorema 1

Qualquer função $h = h(\mathbf{c})$, cuja parte par, h^+ , e parte ímpar, h^- , satisfazem as equações (A.29) e (A.44), respectivamente, podem ser expandidas

na forma

$$h = \sum_{\alpha=0}^4 A_{\alpha} \psi_{\alpha} + \sum_{\alpha=2}^4 B_{\alpha} L^{-1}(c_x \psi_{\alpha}) + \left[\int_{-\lambda_{\infty}}^{-\lambda_0} + \int_{\lambda_0}^{\lambda_{\infty}} \right] g_{\lambda}(\mathbf{c}) A_{\lambda} d\lambda, \quad (\text{A.45})$$

onde

$$g_{\lambda} = g_{\lambda}^{+} + g_{\lambda}^{-}$$

são as autosoluções da Eq. (A.3) correspondentes a $\lambda \neq 0$; os coeficientes são dados pelas Eqs. (A.37) e

$$A_{\lambda} = (h, c_x g_{\lambda})$$

$$A_1 = (h, c_x) / (c_x, c_x) \quad (\text{A.47})$$

$$B_{\alpha} = (h, c_x \psi_{\alpha}) / (c_x \psi_{\alpha}, L^{-1}[c_x \psi_{\alpha}]),$$

desde que ψ_{α} satisfaça a Eq. (A.35) e g_{λ} seja adequadamente normalizada (aqui procede-se como se $g_{\lambda} \neq g_{\lambda'}$, para $\lambda \neq \lambda'$ o que não é verdadeiro; o caso de autovalores degenerados, segundo Cercignani [15], é facilmente mostrado, mas não será mencionado na prova).

Para provar o teorema, é suficiente decompor h como $h^{+} + h^{-}$ e aplicar as Eqs. (A.30) e (A.37) que resulta na Eq. (A.45) com

$$A_{\lambda} = \frac{A_{\lambda}^{+} + A_{\lambda}^{-}}{2}, \quad (\text{A.49})$$

$$A_{-\lambda} = \frac{A_{\lambda}^{+} - A_{-\lambda}^{-}}{2}, \quad (\text{A.50})$$

considerando $\lambda > 0$ e lembrando que

$$g_\lambda^+ = g_{-\lambda}^+ \quad g_\lambda^- = -g_{-\lambda}^- . \quad (\text{A.51})$$

Para se calcular os coeficientes, observa-se que

$$(g_\lambda, c_x g_{\lambda'}) = 0 \quad (\lambda \neq \lambda') . \quad (\text{A.52})$$

Em particular, se $\lambda' = 0$ se obtém

$$(g_\lambda, c_x \psi_\alpha) = 0 \quad (\alpha = 0, 1, 2, 3, 4; \lambda \neq 0) \quad (\text{A.53})$$

e como uma consequência

$$\begin{aligned} (c_x L^{-1}[c_x \psi_\alpha], g_\lambda) &= (L^{-1}[c_x \psi_\alpha], c_x g_\lambda) = \\ &= \frac{1}{\lambda} (c_x \psi_\alpha, g_\lambda) = 0 \quad (\alpha = 2, 3, 4; \lambda \neq 0) . \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

Devido a normalização de g_λ , se obtém coeficientes A_1, A_λ e B_α , fazendo o produto escalar da Eq. (A.45) com $c_x g_\lambda, c_x \psi_\alpha, c_x L^{-1}(c_x \psi_\alpha)$.

Nota-se que as considerações em h são desnecessariamente fortes. De fato, é suficiente que os produtos escalares aparecendo nas Eqs. (A.37) e (A.47) existam (no sentido da teoria de funções generalizadas, se necessário) para que a Eq. (A.45) seja válida (no sentido de funções generalizadas).

O resultado que foi provado é similar ao teorema da completeza para as autosoluções da Eq. (A.3). De fato, na Eq. (A.45) encontra-se todas autosoluções correspondentes a $\lambda \neq 0, g_\lambda$, e para $\lambda = 0, \psi_\alpha$. O teorema mostra, no entanto, que estas autosoluções não são suficientes para representar uma função arbitrária h : deve-se adicionar três funções $L^{-1}(c_x \psi_\alpha)$, ($\alpha = 2, 3, 4$), que não são autosoluções. De fato, esperava-se ser capaz de encontrar a solução h da Eq. (A.1)

como uma superposição de soluções de variáveis separáveis, tendo a forma mostrada na Eq. (A.2).

O teorema também mostra que é suficiente encontrar três soluções particulares, h_α ($\alpha = 2, 3, 4$), da Eq. (A.1) que tome em uma dada posição x , exatamente os valores $L^{-1}(c_x \psi_\alpha)$ e adicionar estas ao conjunto de soluções, que têm a forma mostrada na Eq. (A.2), para se obter a solução geral da Eq. (A.1) como uma superposição linear das soluções do conjunto resultante.

Três dessas soluções h_α são

$$h_\alpha = x\psi_\alpha + L^{-1}(c_x)\psi_\alpha, \quad \alpha = 2, 3, 4 \quad (\text{A.55})$$

como pode ser facilmente verificado, substituindo a Eq. (A.55) na Eq. (A.1).

A partir daqui pretende-se mostrar então, através do próximo teorema, como pode-se escrever as soluções da Eq. (A.1).

A.3.2 Teorema 2

Qualquer solução h da Eq. (A.1) tal que os produtos escalares nas Eqs. (A.37) e (A.47) existam (no sentido de funções generalizadas, se necessário), pode ser escrita como

$$h = \sum_{\alpha=0}^4 A_\alpha \psi_\alpha + \sum_{\alpha=2}^4 B_\alpha [x\psi_\alpha + L^{-1}(c_x \psi_\alpha)] + \left[\int_{-\lambda_\infty}^{-\lambda_0} + \int_{\lambda_0}^{\lambda_\infty} \right] g_\lambda(\mathbf{c}) e^{\lambda x} A_\lambda d\lambda \quad (\text{A.56})$$

com $0 < \lambda_0 < \lambda_\infty < \infty$, onde ψ_α ($\alpha = 0, 1, 2, 3, 4$) são os cinco invariantes por colisão, $g_\lambda(\mathbf{c})$ são as autosoluções da Eq. (A.3) correspondente a $\lambda \neq 0$ e A_α , B_α , A_λ são coeficientes arbitrários (como sempre, uma soma pode substituir a integral se os valores de λ formam um conjunto discreto).

Para provar o teorema, toma-se uma solução h da Eq. (A.1) e mostra-se que os produtos escalares que aparecem nas Eqs. (A.37) e (A.47) existem.

De fato, seja h uma solução da Eq. (A.1). Multiplicando escalarmente ambos os lados da Eq. (A.1) por $g_\lambda(\mathbf{c})$, conclui-se que

$$\frac{d}{dx}(c_x g_\lambda, h) = (g_\lambda, Lh) = (Lg_\lambda, h) = \lambda(c_x g_\lambda, h), \quad (\text{A.57})$$

ou

$$(c_x g_\lambda, h) = A_\lambda e^{\lambda x}, \quad (\text{A.58})$$

onde A_λ é uma constante. Analogamente:

$$\frac{d}{dx}(c_x \psi_\alpha, h) = (\psi_\alpha, Lh) = 0, \quad (\text{A.59})$$

ou

$$(c_x \psi_\alpha, h) = \bar{A}_\alpha, \quad (\text{A.60})$$

onde \bar{A}_α é uma constante. Finalmente,

$$\frac{d}{dx}(c_x L^{-1}[c_x \psi_\alpha], h) = (L^{-1}[c_x \psi_\alpha], Lh) = \quad (\text{A.61})$$

$$= (c_x \psi_\alpha, h) = \bar{A}_\alpha, \quad (\alpha = 2, 3, 4); \quad (\text{A.62})$$

ou

$$(c_x L^{-1}[c_x \psi_\alpha], h) = \bar{A}_\alpha x + \bar{B}_\alpha, \quad (\text{A.63})$$

onde \bar{B}_α é uma constante.

Agora h pode ser expandido, para qualquer x fixado, de acordo com a Eq. (A.39), com coeficientes $A_\alpha(x)$, $B_\alpha(x)$, $A_\lambda(x)$ que podem ser calculados usando

as Eqs. (A.37) e (A.44). Por meio das Eqs. (A.58), (A.60) e (A.63), encontra-se que

$$A_\lambda(x) = A_\lambda e^{\lambda x}; \quad A_\alpha(x) = A_\alpha \quad (\alpha = 0, 1), \quad (\text{A.64})$$

$$A_\alpha(x) = A_\alpha + B_\alpha x \quad (\alpha = 2, 3, 4); \quad (\text{A.65})$$

$$B_\alpha(x) = B_\alpha; \quad (\text{A.66})$$

onde A_λ é a constante aparecendo na Eq. (A.58), A_α e B_α constantes que simplesmente estão relacionadas a $\bar{A}_\alpha; \bar{B}_\alpha$. Assim, o teorema fica demonstrado.

Como considerações finais deste capítulo, nota-se que a solução geral dada pela Eq. (A.56) é feita em duas partes, h_A e h_B , dadas por

$$h_A = \sum_{\alpha=0}^4 A_\alpha \psi_\alpha + \sum_{\alpha=2}^4 B_\alpha [x \psi_\alpha + L^{-1}(c_x \psi_\alpha)], \quad (\text{A.67})$$

e

$$h_B = \left[\int_{-\lambda_\infty}^{-\lambda_0} + \int_{\lambda_0}^{\lambda_\infty} \right] g_\lambda(\mathbf{c}) e^{\lambda x} A_\lambda d\lambda, \quad (\text{A.68})$$

onde os autovalores λ são da ordem inversa do livre caminho médio l ; de fato se \bar{c} é a velocidade média, temos que

$$c_x \simeq \bar{c} \quad (\text{A.69})$$

e

$$Lh/h \simeq \bar{c}/l. \quad (\text{A.70})$$

Assim, obtém-se a partir da equação (A.3) que

$$\lambda \simeq l^{-1}.$$

Nota-se ainda que h_B descreve o espaço transiente, que será importante próximo a fronteira e se torna negligenciável distante dela de alguns poucos livres caminhos médios (A.68).

Observa-se, então, que o principal resultado aqui apresentado encontra-se na Eq. (A.56), que mostra a estrutura da solução geral da equação linearizada de Boltzmann para problemas unidimensionais e estacionários, e que serve de referência no estudo da modelagem da LBE, conforme apresentado no capítulo 2, onde partindo dessas soluções encontradas para a LBE, em especial as correspondentes a $\lambda = 0$, que são as invariantes por colisão e a forma das soluções particulares, mostradas na Eq. (A.55), determina-se condições que permitem formular dois núcleos sintéticos.

ANEXO B RELAÇÃO DE ONSAGER

Neste anexo, seguindo Siewert [38], propõe-se uma derivação da chamada relação de Onsager

$$Q_p = U_t, \quad (\text{B.1})$$

apresentada na seção 7.2. Para tanto, define-se a taxa de fluxo de calor para o problema de Poiseuille por

$$Q_p = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a q_p(\tau) d\tau \quad (\text{B.2})$$

e a taxa de fluxo de partículas para o problema de “Creep” Térmico

$$U_t = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a u_t(\tau) d\tau, \quad (\text{B.3})$$

onde $q_p(\tau)$ é o perfil de fluxo de calor definido para o problema de Poiseuille e $u_t(\tau)$ representa o perfil de velocidade do problema de “Creep” Térmico.

Segundo Sharipov [33], a relação de Onsager é válida para qualquer gás rarefeito e qualquer lei de interação entre gás-superfície.

Seguindo-se Siewert [40], para descrever o problema de fluxo de Poiseuille, considera-se a equação linearizada de Boltzmann escrita em termos de $h(\tau, \mathbf{c})$, na forma

$$c + c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi_p(\tau, c, \mu) = \varepsilon L\{\Psi_p\}(\tau, c, \mu) \quad (\text{B.4})$$

e para descrever o problema de “Creep” Térmico, considera-se

$$c(c^2 - 5/2) - c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi_t(\tau, c, -\mu) = \varepsilon L\{\Psi_t\}(\tau, c, \mu), \quad (\text{B.5})$$

onde

$$L\{\Psi\}(\tau, c, \mu) = -v(c)\Psi(\tau, c, \mu) + \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-c'^2} \Psi(\tau, c', \mu') K(c', \mu' : c, \mu) c'^2 d\mu' dc', \quad (\text{B.6})$$

$$K(c', \mu' : c, \mu) = (1 - \mu'^2) \sum_{n=1}^{\infty} \Pi_n(\mu') \Pi_n(\mu) k_n(c', c) \quad (\text{B.7})$$

e

$$\Pi_n(\mu) = \left[\frac{2n+1}{2n(n+1)} \right]^{1/2} \frac{d}{d\mu} P_n(\mu), \quad n \geq 1. \quad (\text{B.8})$$

Considerando as definições dos perfis de fluxo de calor e de partículas, definidos respectivamente por

$$q_p(\tau) = \frac{1}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-c'^2} \Psi_p(\tau, c, \mu) (c^2 - 5/2) c^3 (1 - \mu^2) d\mu dc, \quad (\text{B.9})$$

$$u_t(\tau) = \frac{1}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-c'^2} \Psi_t(\tau, c, \mu) c^3 (1 - \mu^2) d\mu dc \quad (\text{B.10})$$

e tomando

$$\begin{aligned} R_1(\tau) &= \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-c'^2} (c^2 - 5/2) c^3 (1 - \mu^2) \Psi_p(\tau, c, \mu) d\mu dc \\ &\quad - \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-c'^2} (c\mu) c^2 (1 - \mu^2) \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \Psi_t(\tau, c, -\mu) \right] \Psi_p(\tau, c, \mu) d\mu dc, \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

$$\begin{aligned}
R_2(\tau) &= \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-c'^2} c^3 (1 - \mu^2) \Psi_t(\tau, c, -\mu) d\mu dc \\
&+ \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-c'^2} (c\mu) c^2 (1 - \mu^2) \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \Psi_p(\tau, c, \mu) \right] \Psi_t(\tau, c, -\mu) d\mu dc,
\end{aligned} \tag{B.12}$$

multiplica-se a Eq. (B.4) por

$$\Psi_p(\tau, c, \mu) (1 - \mu^2) c^2 e^{-c'^2} + \int_0^\infty \int_{-1}^1 (1 - \mu^2) c^2 e^{-c'^2} \Psi_p(\tau, c, \mu) d\mu dc \tag{B.13}$$

e a Eq. (B.5) por

$$\Psi_t(\tau, c, -\mu) (1 - \mu^2) c^2 e^{-c'^2} + \int_0^\infty \int_{-1}^1 (1 - \mu^2) c^2 e^{-c'^2} \Psi_t(\tau, c, -\mu) d\mu dc \tag{B.14}$$

para obter-se, após subtrair os resultados obtidos das multiplicações anteriores

$$\begin{aligned}
\pi^{1/2} q_p(\tau) - \pi^{1/2} u_t(\tau) - \int_0^\infty \int_{-1}^1 (1 - \mu^2) c^3 e^{-c'^2} \mu \left[\Psi_p(\tau, c, \mu) \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi_t(\tau, c, -\mu) \right. \\
\left. + \Psi_t(\tau, c, -\mu) \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi_p(\tau, c, \mu) \right] d\mu dc = R_1 - R_2.
\end{aligned} \tag{B.15}$$

Agora integrando a Eq. (B.15) no intervalo $(-a, a)$, obtém-se

$$2a^2 \pi^{1/2} [Q_p - U_t] = \int_0^\infty \int_{-1}^1 (1 - \mu^2) c^3 e^{-c'^2} \mu F(\mu) d\mu dc + \int_{-a}^a [R_1 - R_2] d\tau, \tag{B.16}$$

onde

$$F(\mu) = \Psi_p(a, c, \mu) \Psi_t(a, c, -\mu) - \Psi_p(-a, c, \mu) \Psi_t(-a, c, \mu). \tag{B.17}$$

Usando o fato de que

$$\Psi(-x, c, -\mu) = \Psi(x, c, \mu) \quad (\text{B.18})$$

mostra-se que $F(\mu) = 0$.

Por outro lado, utilizando-se as Eqs. (B.4) e (B.5) mostra-se que $R_1 = R_2$ e conseqüentemente

$$\int_{-a}^a [R_1 - R_2] d\tau = 0. \quad (\text{B.19})$$

Portanto, a partir da Eq. (B.16), temos que

$$Q_p = U_t.$$

ANEXO C CARACTERIZAÇÃO DO NÚMERO DE KNUDSEN

O número de Knudsen, apresentado no capítulo 1, também pode ser relacionado com os números de Reynolds e Mach conforme mostra a figura C.1 [23].

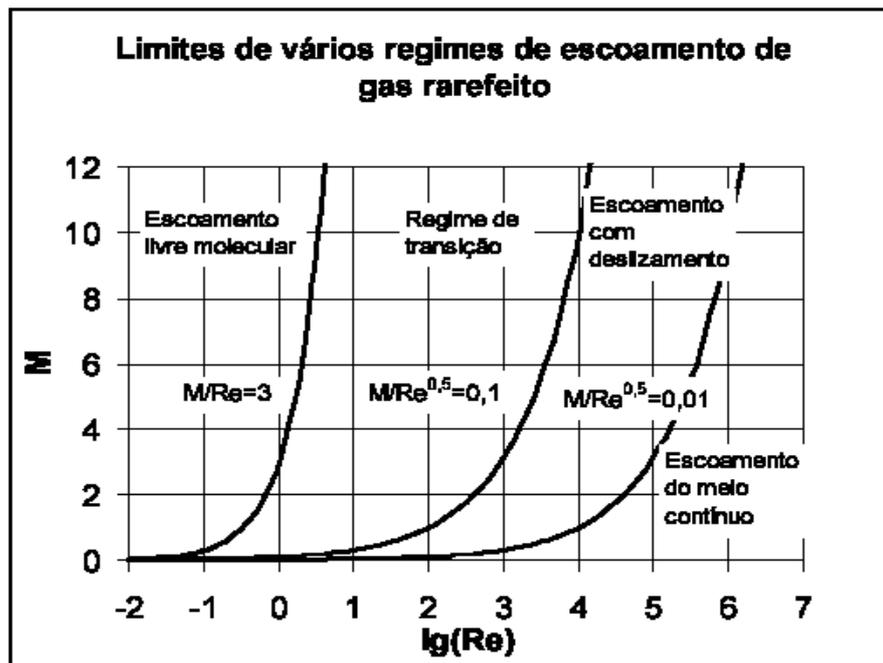


Figura C.1: Caracterização dos regimes de escoamento de um gás.

Assim, se o número de Reynolds for muito pequeno ($Re \ll 1$) o número de Knudsen é aproximadamente dado por M/Re e se $Re \gg 1$, então o número de Knudsen é dado por M/\sqrt{Re} .

BIBLIOGRAFIA

- [1] ARKILIC, E. B., BREUER, K. S., AND SCHIMIDT, M. A. Mass flow and tangential momentum accomodation in silicon micromachined channels. *Journal of Fluid Mechanics* 437 (2001), 29–43.
- [2] BARICHELLO, L. B., BARTZ, A. C. R., CAMARGO, M., AND SIEWERT, C. E. The temperature-jump problem for a variable collision frequency model. *Physics of Fluids* 14 (2002), 383–391.
- [3] BARICHELLO, L. B., CAMARGO, M., RODRIGUES, P., AND SIEWERT, C. E. Unified solutions to classical flow problems based on the BGK model. *Z. Angew. Math. Phys.* 52 (2001), 517–534.
- [4] BARICHELLO, L. B., GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. Particular solutions for the discrete-ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 64 (2000), 219.
- [5] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. On the equivalence between the discrete-ordinates and the spherical-harmonics methods in radiative transfer. *Nuclear Science and Engineering* 130 (1998), 79.
- [6] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 62 (1999), 645–675.
- [7] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for Poiseuille flow in a plane channel. *Z. Angew. Math. Phys.* 50 (1999), 972.
- [8] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. The temperature-jump problem in rarefied-gas dynamics. *European Journal of Applied Mathematics* 11 (2000), 353–364.

- [9] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. Somme comments on modeling the linearized Boltzmann equation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 77 (2003), 43–59.
- [10] BHATNAGAR, P. L., GROSS, E. P., AND KROOK, M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.* 94 (1954), 511–525.
- [11] CAMARGO, M. *Soluções Unificadas para Modelos com Freqüência de Colisão Variável da Dinâmica de Gases Rarefeitos*. Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2003.
- [12] CASE, K. M., AND ZWEIFEL, P. F. *Linear Transport Theory*. Addison Wesley, Reading MA, 1967.
- [13] CERCIGNANI, C. The method of elementary solutions for kinetic models with velocity-dependent collision frequency. *Ann. Phys.(NY)* 40 (1966), 469–481.
- [14] CERCIGNANI, C. *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. Plenum Press, New York, 1969.
- [15] CERCIGNANI, C. On the general solution of the steady linearized Boltzmann equation. *in Rarefied Gas. M. Becker and M. Fiebig eds., Vol.I* (1974), A.9.1–A.9.11, DFLVR Press, Porz–Wahn.
- [16] CERCIGNANI, C. *The Boltzmann Equation and its Applications*. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [17] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, London, 1950.
- [18] COTLAR, C. R. *An introduction to functional analysis*. North-Holland Publishing Company, London, 1974.

- [19] DONGARRA, J. J., BUNCH, J. R., MOLER, C. B., AND STEWART, G. W. *LINPACK, User's Guide*. Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM, Philadelphia, 1979.
- [20] FAN, J., BOYD, I. D., CAI, C. P., HENNIGHAUSEN, K., AND CANDLER, G. V. Computation of rarefied gas flows around a NACA 0012 airfoil. *AIAA Journal* 39 (2001), 618–625.
- [21] GARCIA, R. D. M. *Métodos para Solução da Equação de Transporte de Partículas Integro-Diferencial*. Em: Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras, PUC - Porto Alegre - RS, 2002.
- [22] GEL'FAND, I. M., AND SHILOV, G. E. *Generalized Functions - Vol 3*. Academic Press, New York, 1964.
- [23] KHATCHATOURIAN, O. *comunicação privada* (2003).
- [24] LOYALKA, S. K., AND FERZIGER, J. H. Model dependence of the slip coefficient. *Physics of Fluids* 10 (1967), 1833–1839.
- [25] LOYALKA, S. K., AND FERZIGER, J. H. Model dependence of the temperature slip coefficient. *Physics of Fluids* 11 (1968), 1668–1671.
- [26] LOYALKA, S. K., AND HICKEY, K. A. Plane Poiseuille flow: near continuum results for a rigid sphere gas. *Physica A* 160 (1989), 395–408.
- [27] OHWADA, T., AND SONE, Y. Analysis of thermal stress slip flow and negative thermophoresis using the Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *European Journal of Mechanics B/Fluids* 11 (1992), 389–414.
- [28] PEKERIS, C. L., AND ALTERMAN, Z. Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation II. The coefficients of viscosity and heat conduction. *Proc. Natl. Acad. Science* 43 (1957), 998–1007.
- [29] RODRIGUES, P. *Aspectos Analíticos e Computacionais do Método de Ordenadas Discretas para o Modelo BGK Linearizado*. Dissertação de Mestrado

- do Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 1998.
- [30] RODRIGUES, P. *Dinâmica de Gases Rarefeitos e Transferência Radiativa: Aplicações em Geometria Cilíndrica*. Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2003.
- [31] SHAKHOV, E. M. *Method of investigation of rarefied gas flows*. Nauka, Moscow, 1974.
- [32] SHARIPOV, F. Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels. *Journal Micromechanics Microengineering* 9 (1999), 394–401.
- [33] SHARIPOV, F., AND SELEZNEV, V. Data on internal rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data* 27 (1998), 657–706.
- [34] SIEWERT, C. E. Viscous-slip, thermal-slip and temperature-jump coefficients as defined by the linearized Boltzmann equation and the Cercignani-Lampis boundary condition. *Physics of Fluids- em impressão*.
- [35] SIEWERT, C. E. Couette flow for a binary gas mixture. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 70 (2001), 321–332.
- [36] SIEWERT, C. E. Kramers problem for a variable collision frequency model. *European Journal of Applied Mathematics* 12 (2001), 179–191.
- [37] SIEWERT, C. E. Generalized boundary conditions for the S-model kinetic equations basic to flow in a plane channel. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 72 (2002), 75–88.
- [38] SIEWERT, C. E. *comunicação privada* (2003).
- [39] SIEWERT, C. E. The linearized Boltzmann equation: a concise and accurate solution of the temperature-jump problem. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 77 (2003), 417–432.

- [40] SIEWERT, C. E. The linearized Boltzmann equation: a concise and accurate solutions to basic flow problems. *Z. Angew. Math. Phys.* 54 (2003), 273–303.
- [41] SIEWERT, C. E. On computing the Chapman-Enskog functions for viscosity and heat conduction and the Burnett functions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 78 (2007), 789–796.
- [42] SIEWERT, C. E. Poiseuille and Thermal Creep flow in a cylindrical tube. *Journal Computational Physics* 160 (2007), 470.
- [43] SIEWERT, C. E. Poiseuille, Thermal Creep and Couette flow: results based on the CES model of the linearized Boltzmann equation. *European Journal of Mechanics B/Fluids* 23 (7002), 579–597.
- [44] SIEWERT, C. E., AND SHARIPOV, F. Model equations in rarefied gas dynamics: viscous-slip and thermal-slip coefficients. *Physics of Fluids* 14 (2002), 4123–4129.
- [45] SIEWERT, C. E., AND VALOUGEORGIS, D. An analytical discrete-ordinates solution of the S-model kinetic equations for flow in a cylindrical tube. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 72 (2002), 531–550.
- [46] SIMONS, S. Poiseuille gas flow in the transition regime I. Formulation of the general theory. *Proc. Roy. Soc. A.* 301 (1967), 387–400.
- [47] SMITH, B. T., BOYLE, J. M., DONGARRA, J. J., GARBOW, B. S., IKEBE, Y., KLEMA, V. C., AND MOLER, C. B. *Matrix Eigensystem Routines EISPACK Guide*. Springer-Verlag, Berlin, 1976.
- [48] TRICOMI, F. G. *Integral Equations*. Interscience, New York, 1957.
- [49] VALOUGEORGIS, D. An analytical solution of the S-model kinetic equations. *Z. Angew. Math. Phys.* 54 (2003), 112–124.

- [50] VASUDEVAIAH, M., AND BALAMURUGAN, K. Heat transfer of rarefied gases in a corrugated microchannel. *International Journal of Thermal Sciences* 40 (2001), 454–468.
- [51] WAKABAYASHI, M., OHWADA, T., AND GOLSE, F. Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over the plane wall of a Maxwell-type boundary on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *European Journal Mechanics B/Fluids* 15 (1996), 175–201.
- [52] WELANDER, P. On the Temperature Jump in a rarefied gas. *Ark. Fys.* 7 (1954), 507.
- [53] WILLET, L., HASHIMI, S., TOMPSON, R. V., AND LOYALKA, S. K. Effect of surface heterogeneities on condensation on an aerosol particle. *Journal of Aerosol Sciences* 30 (1999), 669–675.
- [54] WILLIAMS, M. M. R. *Mathematical Methods in Particle Transport Theory*. Butterworth, London, 1971.
- [55] WILLIAMS, M. M. R. A review of the rarefied gas dynamics theory associated with some classical problems in flow and heat transfer. *Z. Angew. Math. Phys.* 52 (2001), 500–516.
- [56] WILLIAMS, M. M. R., AND LOYALKA, S. K. *Aerosol Science: Theory and Practice, With Special Applications to the Nuclear Industry*. Pergamon Press, Oxford, 1992.