

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

Um Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos com Frequência de Colisão Variável

por

Anne Cristine Rutsatz Bartz

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, dezembro de 2000.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Bartz, Anne Cristine Rutsatz

Um Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos com Freqüência de Colisão Variável / Anne Cristine Rutsatz Bartz.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2000.

69 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2000.

Orientadora: Barichello, Liliâne Basso

Dissertação: Matemática Aplicada

Método de Ordenadas Discretas, Gases Rarefeitos, Modelo BGK, Freqüência de Colisão Variável

Um Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos com Frequência de Colisão Variável

por

Anne Cristine Rutsatz Bartz

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. Renato Machado Cotta, Phd.
COPPE-DEM/UFRJ

Prof. Júlio Cesar Ruiz Claeysen, Phd.
PPGMap/IM/UFRGS

Prof. Vilmar Trevisan, Phd.
PPGMAp/IM/UFRGS

Dissertação aprovada em
12 de dezembro de 2000.

Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha
Coordenador

*Dedico esta dissertação especialmente:
Ao meu marido, Carlos Edmundo, fiel companheiro e
razão da minha vida, que sempre soube estender a mão
em momentos difíceis e sobretudo, soube ser paciente e carinhoso.
Ao meus pais, Darci e Iris,
os grandes responsáveis pelo que sou e à quem devo tudo que tenho hoje.
Aos meus irmãos Marcus e Anne Marie,
que sempre me incentivaram e encorajaram a seguir.
À Deus, pelo equilíbrio emocional.*

AGRADECIMENTO

Em particular agradeço:

- à Profa. Dra. Liliane Basso Barichello, pela excelente orientação, pelas preciosas contribuições neste trabalho, especialmente pelo seu carinho, atenção, paciência e incentivo durante esta caminhada;

- ao Prof. Dr. Charles E. Siewert, que com seus desafios, enriqueceu este trabalho;

- aos amigos Dulcenéia, Hélia e Carlos, companheiros de estudo. Dulcenéia, a quem devo muito do pouco que sei sobre informática, por suas dicas importantíssimas em FORTRAN e LATEX; as palavras são poucas para expressar a minha gratidão: muito obrigada. Hélia, pelas palavras de atenção, carinho, amizade, a quem admiro pela persistência e otimismo. Carlos, por suas piadas na hora do almoço e discussões preciosas sobre as disciplinas que fizemos juntos;

- ao coordenador do curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha, sempre disposto a esclarecer dúvidas sobre FORTRAN e LATEX;

- às colegas Mariza e Patrícia, que muito me ajudaram no final desta caminhada;

- ao Colégio Mauá de Santa Cruz do Sul, onde tudo começou e que sempre disponibilizou-me tempo para o mestrado e incentivo para continuar esta caminhada;

- ao Departamento de Matemática da Universidade de Santa Cruz do Sul, em especial ao Prof. Dr. Manuel Malasquez, pela sua ajuda e grande incentivo durante o decorrer deste curso;

- aos professores do Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, que de alguma forma participaram e colaboraram nesta conquista;

- aos colegas da Pós-Graduação, pela caminhada juntos;

- às secretárias Patrícia e Suzana, pela atenção;

- à todos que de alguma forma colaboraram na elaboração deste trabalho, o meu muito obrigada.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	9
LISTA DE TABELAS	10
LISTA DE SÍMBOLOS	11
RESUMO	12
ABSTRACT	13
1 INTRODUÇÃO	14
2 DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS COM FREQUÊNCIA DE COLISÃO VARIÁVEL	17
2.1 O problema do salto de temperatura	20
3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	23
4 UM TRATAMENTO ESCALAR	26
4.1 O método de ordenadas discretas: soluções elementares analíticas	29
4.2 O problema H	33

4.3	O problema G_1 .	35
4.4	O problema G_2 .	36
5	UM TRATAMENTO VETORIAL	42
5.1	O caso especial: $\eta(c) = c$	45
5.2	O método de ordenadas discretas: soluções elementares numéricas	47
6	ASPECTOS COMPUTACIONAIS E RESULTADOS NUMÉRI- COS	53
7	CONCLUSÕES	61
	BIBLIOGRAFIA	63
8	ANEXO	68
8.1	Um estudo dos autovalores de $D + \alpha vv^T$	68

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Coeficiente de salto de temperatura	21
Figura 6.1	Coeficiente de acomodação \times Coeficiente de salto de temperatura	56
Figura 6.2	Desvio de Temperatura, para $\alpha = 0.2$	58

LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1	Coeficientes de salto de temperatura ζ para diferentes α	55
Tabela 6.2	Perturbação de Temperatura e Densidade para $\alpha = 0.2$	57
Tabela 6.3	Perturbação de Temperatura e Densidade para $\alpha = 0.5$	59
Tabela 6.4	Perturbação de Temperatura e Densidade para $\alpha = 1.0$	60

LISTA DE SÍMBOLOS

c	Velocidade molecular
$f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$	Função de distribuição
$h(\mathbf{r}, \mathbf{v})$	Perturbação
$J(f, f')$	Operador de colisão
$K(c : c')$	Núcleo de espalhamento
N	Ordem da quadratura de Gauss
$N(x)$	Perturbação da densidade
$T(x)$	Perturbação da temperatura
$V(c)$	Frequência de colisão das partículas
α	Coefficiente de acomodação
μ	Pontos de quadratura em $(0, 1]$ no tratamento escalar
ξ	Pontos de quadratura em $(0, 1]$ no tratamento vetorial
τ	Variável espacial adimensional
$\Psi(\mu)$	Função característica
ω_i	Pesos da quadratura em $[0, 1]$
ν_j	Autovalores dos problemas H e G_2
η_j	Autovalores do problema G_1
ζ	Coefficiente de salto de temperatura

RESUMO

Neste trabalho, uma versão recente do método de ordenadas discretas é usada na solução do chamado problema de salto de temperatura da dinâmica de gases rarefeitos, descrito por um modelo linearizado, com frequência de colisão variável, da equação de Boltzmann. Duas abordagens de tratamento do problema são apresentadas, ditas escalar e vetorial, para o caso onde a frequência de colisão é proporcional à magnitude do vetor velocidade. Resultados numéricos de excelente precisão são obtidos, para perturbação de temperatura, densidade e coeficiente de salto, com avaliação analítica e numérica da componente independente da variável espacial das soluções elementares, pela implementação de um algoritmo em linguagem FORTRAN da solução em ordenadas discretas.

ABSTRACT

In this work, a recent version of the discrete-ordinates method is used in the field of rarefied-gas dynamics, to solve a version of the temperature-jump problem that is based on a linearized, variable collision frequency model of the Boltzmann equation. Two different approaches are used, the so-called scalar and vector solutions, for the case where the collision frequency is proportional to the magnitude of the velocity. Accurate numerical results are obtained from the FORTRAN implementation of the developed solution, by using analytical and numerical spatial-independent components of the elementary solutions, for the temperature and density perturbations and the temperature-jump coefficient.

1 INTRODUÇÃO

O estudo da dinâmica dos gases, especialmente no que diz respeito as equações utilizadas na modelagem e descrição dos fenômenos, está associado à caracterização da rarefação desse gás. Parâmetros como o chamado número de Knudsen [26] ou a definição de livre caminho médio das moléculas, distinguem diferentes regimes no estudo do fluxo de um gás, que pode ser considerado como um meio contínuo, chamado regime hidrodinâmico, ou mesmo estar no chamado regime molecular livre. A caracterização do modelo, em geral, é mais difícil para valores intermediários desses parâmetros, no dito regime de transição, exigindo análise mais criteriosa normalmente associada ao comportamento assintótico das soluções [10].

Os fenômenos que envolvem a dinâmica dos gases rarefeitos tem como ponto de partida a equação de Boltzmann e aparecem associados à diferentes aplicações, como estudos aerodinâmicos [1], sistemas microeletromecânicos [2, 25], equipamentos de vácuo [25]. No tratamento de modelos lineares associados à equação de Boltzmann, no contexto de métodos determinísticos, o chamado método de ordenadas discretas introduzido, segundo Chalhoub e Garcia [18], por Wick e Chandrasekhar na década de quarenta, tem sido amplamente utilizado. O método foi estudado por Chandrasekhar [19] principalmente em problemas de transferência radiativa e se baseia na aproximação da integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma quadratura numérica e posterior solução do con-

junto de equações diferenciais ordinárias resultantes, para a função de distribuição de partículas, nos pontos de quadratura.

Recentemente Barichello e Siewert [5] propuseram uma nova versão para o método de ordenadas discretas, analítica em termos da variável espacial, que difere basicamente da proposta anterior [19] no uso de um esquema de quadratura mais arbitrário, e determinação das constantes de separação, a partir de problemas de autovalores. Em aplicações associadas à dinâmica de gases rarefeitos, essa nova versão do método de ordenadas discretas foi inicialmente usada no tratamento dos problemas clássicos em canais planos [4, 6, 8, 9], geometria cilíndrica [27], mistura de gases [28] e recentemente modelos com frequência de colisão variável começam a ser investigados [3]. Lembrando que o modelo original que descreve a distribuição de partículas de gás é não linear e que várias simplificações são feitas para obtenção das chamadas “equações modelo”, das quais se procura extrair resultados numéricos, o tratamento da frequência de colisão variável busca a obtenção de modelos que representem de forma mais adequada as propriedades e comportamento físico dos sistemas representados.

Neste trabalho, propomos então, a solução de um problema conhecido como problema de “salto de temperatura”, baseado em um modelo da dinâmica de gases que apresenta a frequência de colisão variável, dito modelo CLF [3], derivado do modelo BGK [32]. Para a descrição da frequência de colisão aqui usada, dois tratamentos são possíveis: um dito escalar e outro vetorial.

Assim, no capítulo 2 fazemos uma breve colocação e descrição física do problema e apresentamos no capítulo 3 a formulação matemática a ser utilizada. Nos capítulos 4 e 5 descrevemos, respectivamente, as duas abordagens usadas, o tratamento escalar e o tratamento vetorial, para o cálculo da perturbação de densidade e temperatura, e também para o coeficiente de salto de temperatura. Discutimos ainda no capítulo 6, alguns aspectos computacionais e apresentamos resultados numéricos obtidos para diferentes valores do coeficiente de acomodação. No capítulo 7 fazemos algumas considerações finais sobre o trabalho.

2 DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS COM FREQUÊNCIA DE COLISÃO VARIÁVEL

O estado de um gás monoatômico é descrito por uma função distribuição de partículas $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, onde \mathbf{r} é um vetor de coordenadas espaciais e \mathbf{v} é a velocidade das partículas. A função distribuição é definida tal que a quantidade $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ é o número de partículas no espaço de fase $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ perto do ponto (\mathbf{r}, \mathbf{v}) . Quantidades de interesse, relativamente ao fluxo desse gás, podem ser calculadas via essa função distribuição, como por exemplo, a densidade de partículas

$$n(\mathbf{r}) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v})d\mathbf{v}, \quad (2.1)$$

a pressão, temperatura, fluxo de calor [26]. Ainda, a função distribuição de partículas $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ satisfaz a equação íntegro-diferencial não linear de Boltzmann

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = J(f', f), \quad (2.2)$$

onde J é o operador de colisão como descrito por Williams [33], e para a qual são consideradas condições de contorno apropriadas que descrevem a interação das partículas com as paredes, por exemplo, de um canal.

Uma descrição detalhada da derivação e propriedades da equação de Boltzmann para gases rarefeitos encontramos, por exemplo, nos livros de Williams [32] e Cercignani [16] e no trabalho de Sharipov e Seleznev [26]. Cercignani [16] apresenta também resultados quanto à existência, unicidade e convergência de soluções, basicamente associadas aos problemas clássicos. É importante, contudo, salien-

tar aqui alguns aspectos básicos para desenvolvimento da solução proposta neste trabalho. Devido à complexidade do modelo, para tratamento de gases de rarefação arbitrária, foram desenvolvidas abordagens, ditas equações de modelo, que se baseiam fundamentalmente na simplificação e linearização do termo integral da eq.(2.1). Um dos modelos mais conhecidos (BGK) foi introduzido por Bhatnagar, Gross e Krook [11].

De forma geral, para situações fracamente fora do equilíbrio, a função de distribuição é escrita na forma

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

onde h representa uma (pequena) perturbação causada à distribuição Maxwelliana local $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ pela presença da parede. De forma particular, podemos considerar

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_0 = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT_0}} \quad (2.4)$$

onde, segundo [26], m é a massa molecular, v é a magnitude do vetor velocidade, k é a constante de Boltzmann, n_0 e T_0 são, respectivamente, densidade e temperatura de referência e finalmente, em termos adimensionais, fazemos

$$c = v \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2}, \quad (2.5)$$

resultando em uma equação para h , relativamente a qual passam a ser calculadas as quantidades de interesse.

Neste tabalho consideramos a equação de balanço resultante, na forma

$$c\mu \frac{\partial}{\partial x} h(x, c, \mu, \chi) + V(c)h(x, c, \mu, \chi) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} c'^2 e^{-c'^2} K(c : c') h(x, c', \mu', \chi') d\chi' d\mu' dc' \quad (2.6)$$

assumindo que o gás ocupa o semi-espço $x > 0$ (x adimensional), $\mu \in [-1, 1]$, $c \in [0, \infty)$, $\chi \in [0, 2\pi]$ e

$$K(\mathbf{c} : \mathbf{c}') = \frac{1}{4\pi} V(c)V(c')[\gamma_0 + \gamma_1 \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}' + \gamma_2(c^2 - \omega)(c'^2 - \omega)]. \quad (2.7)$$

Ainda, $V(c)$ é a frequência de colisão,

$$\gamma_0 = \frac{1}{V_0}, \quad \gamma_1 = \frac{3}{V_2}, \quad \gamma_2 = \frac{V_0}{V_0 V_4 - V_2^2} e \quad \omega = \frac{V_2}{V_0}, \quad (2.8)$$

com

$$V_n = \int_0^\infty V(c) c^{n+2} e^{-c^2} dc. \quad (2.9)$$

Para especificarmos a forma como as partículas interagem com a parede, consideramos que uma fração de partículas $(1 - \alpha)$ é refletida specularmente e a fração restante α é refletida difusa. Como não existe perda ou geração de partículas devido à presença da parede, essa condição de contorno é dita conservativa, e escrita na forma

$$h(0, c, \mu, \chi) - (1 - \alpha)h(0, c, -\mu, \chi + \pi) - \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty \int_0^1 \int_0^{2\pi} c'^3 e^{-c'^2} h(0, c', -\mu', \chi') \mu' d\chi' d\mu' dc' = 0, \quad (2.10)$$

para $\mu \in (0, 1]$, $c \in [0, \infty)$ e $\chi \in [0, \pi]$ e

$$h(0, c, \mu, \chi) - (1 - \alpha)h(0, c, -\mu, \chi - \pi) - \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty \int_0^1 \int_0^{2\pi} c'^3 e^{-c'^2} h(0, c', -\mu', \chi') \mu' d\chi' d\mu' dc' = 0, \quad (2.11)$$

para $\mu \in (0, 1]$, $c \in [0, \infty)$ e $\chi \in [\pi, 2\pi]$, sendo $\alpha \in (0, 1]$ chamado o coeficiente de acomodação. Posteriormente, uma condição é imposta para o comportamento no infinito, de tal forma que o problema fique completamente definido.

Neste trabalho, em particular, estamos interessados em avaliar a perturbação de temperatura e densidade de um gás, conforme descrevemos na seção a seguir, dados em termos de h , pelas equações

$$n(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} c^2 e^{-c^2} h(x, c, \mu, \chi) d\chi d\mu dc \quad (2.12)$$

e

$$t(x) = \frac{2}{3\pi^{3/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} c^2 e^{-c^2} (c^2 - 3/2) h(x, c, \mu, \chi) d\chi d\mu dc. \quad (2.13)$$

2.1 O problema do salto de temperatura

No processo de troca de calor entre um gás altamente rarefeito e uma parede adjacente, de acordo com Welander [31], uma diferença é observada entre a temperatura T_0 do gás bem próximo à parede e a temperatura T_w da parede. Além disso, a temperatura não varia linearmente perto da parede, mas se desvia de uma distribuição linear do modo indicado na figura 2.1. O desvio é mais notado sobre a região que se estende a uma distância pequena l da parede, e que pode ser chamada de Região de Transição. Dessa forma, o chamado “salto de temperatura” é definido usualmente como sendo a diferença entre a temperatura T'_0 , avaliada a partir de uma extrapolação linear da curva de temperatura após a região de transição, e a temperatura da parede (figura 2.1). Medidas do salto de temperatura são normalmente feitas, com a finalidade de, por comparação com valores teóricos obtidos, avaliar a troca de calor entre a parede e as moléculas de gás, usualmente caracterizada pelo coeficiente de acomodação.

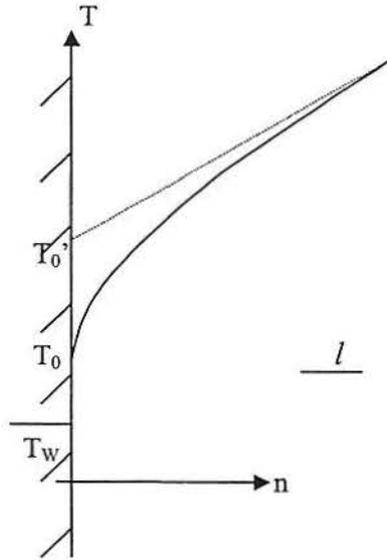


Figura 2.1: Coeficiente de salto de temperatura

No caso do problema de “salto de temperatura”, para efeitos de avaliação das perturbações de temperatura, densidade e do salto (“jump”), modificamos o problema básico definido pelas equações (2.6) a (2.11).

Começamos integrando as eqs.(2.6), (2.10) e (2.11) em relação a χ e introduzimos o termo azimutal

$$\phi(x, c, \mu) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} h(x, c, \mu, \chi) d\chi, \quad (2.14)$$

e reescrevemos então o problema na forma

$$c\mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, c, \mu) + V(c)\phi(x, c, \mu) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 c'^2 e^{-c'^2} K(c, \mu : c', \mu') \phi(x, c', \mu') d\mu' dc', \quad (2.15)$$

onde

$$K(c, \mu : c', \mu') = \frac{1}{2} V(c)V(c') [\gamma_0 + \gamma_1 c\mu c' \mu' + \gamma_2 (c^2 - \omega)(c'^2 - \omega)] \quad (2.16)$$

e

$$\phi(0, c, \mu) - (1 - \alpha)\phi(0, c, -\mu) - 4\alpha \int_0^\infty \int_0^1 c'^3 e^{-c'^2} \phi(0, c', -\mu') \mu' d\mu' dc' = 0, \quad (2.17)$$

para $\mu \in (0, 1]$ e $c \in [0, \infty)$. Temos agora, a perturbação de temperatura e densidade definidas por

$$n(x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 c^2 e^{-c^2} \phi(x, c, \mu) d\mu dc \quad (2.18)$$

e

$$t(x) = \frac{4}{3\pi^{1/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 c^2 e^{-c^2} (c^2 - 3/2) \phi(x, c, \mu) d\mu dc. \quad (2.19)$$

Como as equações (2.6), (2.10) e (2.11) são homogêneas, devemos especificar, como já dito anteriormente, o comportamento no infinito. Neste caso, impomos a condição de que a perturbação de temperatura satisfaz a condição, de acordo com Welander [31]

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{d}{dx} t(x) = K, \quad (2.20)$$

onde K é considerado conhecido, completando a definição do problema.

3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Neste capítulo apresentamos ainda algumas transformações convenientes usadas para solução do problema desejado, dado pelas equações (2.15) e (2.17), na busca da obtenção das perturbações de temperatura e densidade e do coeficiente de “jump”.

Começamos considerando que

$$V(c) = \sigma\eta(c), \quad (3.1)$$

onde σ é um fator escalar a ser definido posteriormente e onde $\eta(c)$ é um fator associado a uma “forma”, que descreve a frequência de colisão. Introduzimos ainda

$$\tau = \sigma x \text{ e } Y(\tau, c, \mu) = \phi(\tau/\sigma, c, \mu) \quad (3.2)$$

e reescrevemos novamente nosso problema como

$$c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} Y(\tau, c, \mu) + \eta(c)Y(\tau, c, \mu) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 c'^2 e^{-c'^2} F(c, \mu : c', \mu') Y(\tau, c', \mu') d\mu' dc', \quad (3.3)$$

considerando no contorno

$$Y(0, c, \mu) - (1 - \alpha)Y(0, c, -\mu) - 4\alpha \int_0^\infty \int_0^1 c'^3 e^{-c'^2} Y(0, c', -\mu') \mu' d\mu' dc' = 0, \quad (3.4)$$

para $\mu \in (0, 1]$ e $c \in [0, \infty)$. Aqui

$$F(c, \mu : c', \mu') = \frac{1}{2}\eta(c)\eta(c')[\beta_0 + \beta_1 c\mu c' \mu' + \beta_2 (c^2 - \omega)(c'^2 - \omega)], \quad (3.5)$$

onde

$$\beta_0 = \frac{1}{\eta_2}, \quad \beta_1 = \frac{3}{\eta_4}, \quad \beta_2 = \frac{\eta_2}{\eta_2\eta_6 - \eta_4^2} \text{ e } \omega = \frac{\eta_4}{\eta_2} \quad (3.6)$$

com

$$\eta_n = \int_0^\infty \eta(c) c^n e^{-c^2} dc. \quad (3.7)$$

De acordo com a transformação (3.2) temos

$$T(\tau) = t(\tau/\sigma) \quad , \quad N(\tau) = n(\tau/\sigma) \quad (3.8)$$

e assim reescrevemos também as eqs.(2.18) e (2.19) como

$$N(\tau) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 c^2 e^{-c^2} Y(\tau, c, \mu) d\mu dc \quad (3.9)$$

e

$$T(\tau) = \frac{4}{3\pi^{1/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 c^2 e^{-c^2} (c^2 - 3/2) Y(\tau, c, \mu) d\mu dc. \quad (3.10)$$

Finalmente, completando a definição do nosso problema, reescrevemos a eq.(2.20) como

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} T(\tau) = \frac{K}{\sigma}. \quad (3.11)$$

Neste ponto, verificamos que

$$Z_a(\tau, c, \mu) = (c^2 - 5/2)[\tau - c\mu/\eta(c)] \quad (3.12)$$

é uma solução da eq.(3.3), que é linear para τ , escrevemos

$$Y(\tau, c, \mu) = \frac{K}{\sigma} [Z(\tau, c, \mu) + Z_a(\tau, c, \mu)] \quad (3.13)$$

e buscamos uma solução $Z(\tau, c, \mu)$ limitada quando τ tender ao infinito satisfazendo

$$c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} Z(\tau, c, \mu) + \eta(c)Z(\tau, c, \mu) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 c'^2 e^{-c'^2} F(c, \mu : c', \mu') Z(\tau, c', \mu') d\mu' dc' \quad (3.14)$$

e

$$Z(0, c, \mu) - (1 - \alpha)Z(0, c, -\mu) - 4\alpha \int_0^\infty \int_0^1 c'^3 e^{-c'^2} Z(0, c', -\mu') \mu' d\mu' dc' = R(c, \mu), \quad (3.15)$$

para $\mu \in (0, 1]$ e $c \in [0, \infty)$. Aqui $F(c, \mu : c', \mu')$ é dada pela equação (3.5),

$$R(c, \mu) = (2 - \alpha)(c^2 - 5/2) \frac{c\mu}{\eta(c)} + \frac{4\alpha}{3} \Gamma, \quad (3.16)$$

onde

$$\Gamma = \int_0^\infty \frac{c^4}{\eta(c)} e^{-c^2} (c^2 - 5/2) dc. \quad (3.17)$$

Agora, em termos da função $Z(\tau, c, \mu)$, encontramos das equações (3.9)

e (3.10) que

$$N(\tau) = \frac{K}{\sigma} \left[-\tau + \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 c^2 e^{-c^2} Z(\tau, c, \mu) d\mu dc \right] \quad (3.18)$$

e

$$T(\tau) = \frac{K}{\sigma} \left[\tau + \frac{4}{3\pi^{1/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 c^2 e^{-c^2} (c^2 - 3/2) Z(\tau, c, \mu) d\mu dc \right]. \quad (3.19)$$

Para determinação da solução $Z(\tau, c, \mu)$, necessária para avaliação da perturbação de densidade e temperatura do gás, dadas pelas eqs.(3.18) e (3.19), propomos uma abordagem em ordenadas discretas em duas formas, que chamamos “escalar” e “vetorial” e que são apresentadas nos capítulos a seguir.

4 UM TRATAMENTO ESCALAR

Nossa proposta inicial para determinação de uma solução limitada para o “problema Z”, descrito pelas eqs.(3.14) e (3.15), considerando $\eta(c) = c$, se baseia em uma decomposição proposta por Williams e Cassel [15], para o caso $\alpha = 1$, que determina a solução do problema original em termos de um conjunto de problemas que devem ser resolvidos sucessivamente (tratamento escalar). Diferentemente de Williams e Cassel [15], que usaram a técnica de Wiener-Hopf, usamos aqui o método de ordenadas discretas na solução dos problemas escalares envolvidos.

Assim, inicialmente escrevemos, fazendo uma pequena variação à proposta da ref. [15],

$$Z(\tau, c, \mu) = G_0(\tau, \mu) + c\mu G_1(\tau, \mu) + (c^2 - 2)G_2(\tau, \mu) \quad (4.1)$$

e substituímos a eq.(4.1) nas eqs.(3.14) e (3.15) resultando que as funções G_0 , G_1 e G_2 devem satisfazer, respectivamente, as equações

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} G_0(\tau, \mu) + G_0(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 [G_0(\tau, \mu') + \frac{3\pi^{1/2}}{4} \mu' G_1(\tau, \mu')] d\mu', \quad (4.2)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} G_1(\tau, \mu) + G_1(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 [\frac{9\pi^{1/2}}{8} G_0(\tau, \mu') + 3\mu' G_1(\tau, \mu') + \frac{9\pi^{1/2}}{16} G_2(\tau, \mu')] \mu' d\mu' \quad (4.3)$$

e

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} G_2(\tau, \mu) + G_2(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 [\frac{3\pi^{1/2}}{16} \mu' G_1(\tau, \mu') + G_2(\tau, \mu')] d\mu', \quad (4.4)$$

com condições de contorno

$$G_0(0, \mu) - (1 - \alpha)G_0(0, -\mu) - 2\alpha \int_{-1}^1 G_0(0, -\mu') d\mu' + 2 \int_{-1}^1 G_0(0, -\mu') \mu' d\mu = \frac{\alpha - 2}{2}(\mu - 2/3), \quad (4.5)$$

$$G_1(0, \mu) + (1 - \alpha)G_1(0, -\mu) = 0 \quad (4.6)$$

e

$$G_2(0, \mu) - (1 - \alpha)G_2(0, -\mu) = (2 - \alpha)\mu, \quad (4.7)$$

para $\mu \in (0, 1]$, que representam um problema acoplado. No entanto, se definimos

$$H(\tau, \mu) = G_0(\tau, \mu) - 4G_2(\tau, \mu) \quad (4.8)$$

podemos deduzir das eqs.(4.2) e (4.4) que

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} H(\tau, \mu) + H(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 H(\tau, \mu') d\mu', \quad (4.9)$$

e ainda, usando resultados clássicos para esse problema [14], temos que

$$\int_{-1}^1 H(\tau, \mu) \mu d\mu = H_1 = 0. \quad (4.10)$$

Esses resultados e o uso da condição de conservação de fluxo nos permitem deduzir

que

$$\int_{-1}^1 G_0(\tau, \mu) \mu d\mu - 4 \int_{-1}^1 G_2(\tau, \mu) \mu d\mu = H_1 \quad (4.11)$$

e

$$\int_{-1}^1 G_0(\tau, \mu) \mu d\mu + \frac{3\pi^{1/2}}{4} \int_{-1}^1 G_1(\tau, \mu) \mu^2 d\mu = -\frac{1}{3} \quad (4.12)$$

e conseqüentemente simplificar o problema para G_1 dado por eq.(4.3) resultando

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} G_1(\tau, \mu) + G_1(\tau, \mu) = \frac{\lambda}{2} \int_{-1}^1 G_1(\tau, \mu') \mu'^2 d\mu' - \frac{27\pi^{1/2}}{128}, \quad (4.13)$$

onde

$$\lambda = 3\left(1 - \frac{81}{256}\pi\right). \quad (4.14)$$

Olhando de volta para eqs.(3.18) e (3.19), escrevemos, em termos de G_0 , G_1 e G_2

$$N(\tau) = \frac{K}{\sigma} \left\{ -\tau + \int_{-1}^1 \left[\frac{1}{2} G_0(\tau, \mu) + \frac{1}{\pi^{1/2}} \mu G_1(\tau, \mu) - \frac{1}{4} G_2(\tau, \mu) \right] d\mu \right\} \quad (4.15)$$

e

$$T(\tau) = \frac{K}{\sigma} \left\{ \tau + \int_{-1}^1 \left[\frac{1}{3\pi^{1/2}} \mu G_1(\tau, \mu) + \frac{1}{2} G_2(\tau, \mu) \right] d\mu \right\}. \quad (4.16)$$

Neste ponto concluímos então que devemos resolver

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} G_1(\tau, \mu) + G_1(\tau, \mu) = \frac{\lambda}{2} \int_{-1}^1 G_1(\tau, \mu') \mu'^2 d\mu' - \frac{27\pi^{1/2}}{128} \quad (4.17)$$

e

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} G_k(\tau, \mu) + G_k(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 G_k(\tau, \mu') d\mu' + S_k(\tau), \quad k = 0 \text{ e } 2, \quad (4.18)$$

onde

$$S_0(\tau) = \frac{3\pi^{1/2}}{8} \int_{-1}^1 G_1(\tau, \mu) \mu d\mu \quad (4.19)$$

e

$$S_2(\tau) = \frac{3\pi^{1/2}}{32} \int_{-1}^1 G_1(\tau, \mu) \mu d\mu \quad (4.20)$$

sujeito as condições de contorno dadas pelas eqs.(4.5), (4.6) e (4.7), para $\mu \in (0, 1]$.

Agora, vamos olhar melhor para o problema “ H ”. Observamos que $H(\tau, \mu)$ satisfaz a eq.(4.9). Encontramos as condições de contorno usando eqs.(4.8), (4.5) e (4.7), ainda com a condição $H_1 = 0$, obtendo

$$H(0, \mu) - (1 - \alpha)H(0, -\mu) - 2\alpha \int_0^1 H(0, -\mu) \mu d\mu = \frac{9}{2}(\alpha - 2)(\mu - 2/3), \quad (4.21)$$

para $\mu \in (0, 1]$.

Como o problema “ H ” é homogêneo e não requer uma solução particular, podemos, de forma bem simplificada, resolver a eq.(4.9), sujeita a condição de contorno dada pela eq.(4.21). Tendo resolvido o problema H e G_1 , resolvemos então, o problema G_2 e usamos a relação entre G_0 e G_2 , dada pela eq.(4.8) para eliminar $G_0(\tau, \mu)$ das nossas considerações . Assim, podemos reescrever as eqs.(4.15) e (4.16) como

$$N(\tau) = \frac{K}{\sigma} \left\{ -\tau + \int_{-1}^1 \left[\frac{1}{2} H(\tau, \mu) + \frac{1}{\pi^{1/2}} \mu G_1(\tau, \mu) + \frac{7}{4} G_2(\tau, \mu) \right] d\mu \right\} \quad (4.22)$$

e

$$T(\tau) = \frac{K}{\sigma} \left\{ \tau + \int_{-1}^1 \left[\frac{1}{3\pi^{1/2}} \mu G_1(\tau, \mu) + \frac{1}{2} G_2(\tau, \mu) \right] d\mu \right\}. \quad (4.23)$$

Queremos ainda salientar que, para avaliar $F(c, \mu : c', \mu')$ usamos

$$\eta_2 = \frac{1}{2}, \quad \eta_4 = 1, \quad \eta_6 = 3 \text{ e } \Gamma = -\frac{1}{4} \quad (4.24)$$

e

$$\beta_0 = 2, \quad \beta_1 = 3, \quad \beta_2 = 1 \text{ e } \omega = 2, \quad (4.25)$$

uma vez que $\eta(c) = c$.

4.1 O método de ordenadas discretas: soluções elementares analíticas

Para encontrarmos os desejados valores para $N(\tau)$ e $T(\tau)$ definidos nas eqs.(4.22) e (4.23), devemos avaliar os três problemas separadamente, ou seja, saber

quem são H , G_1 e G_2 . Definidos nas equações (4.9), (4.17) e (4.18), para $k = 2$, quando em sua forma homogênea, podem ser escritos de maneira geral como

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} G(\tau, \mu) + G(\tau, \mu) = \int_{-1}^1 \Psi(\mu') G(\tau, \mu') d\mu'. \quad (4.26)$$

Para obtermos uma solução em ordenadas discretas desse problema, devemos primeiramente aproximar o termo integral por um esquema de quadratura. Portanto, seguindo Barichello e Siewert [5, 6] e usando o fato de que a função $\Psi(\mu)$ é par, reescrevemos o termo integral da eq.(4.26) no intervalo $[0, 1]$ e aproximamos por um esquema de quadratura de Gauss [12]

$$\mu_i \frac{\partial}{\partial \tau} G(\tau, \mu_i) + G(\tau, \mu_i) = \sum_{k=1}^N w_k \Psi(\mu_k) [G(\tau, \mu_k) + G(\tau, -\mu_k)] \quad (4.27)$$

e

$$-\mu_i \frac{\partial}{\partial \tau} G(\tau, -\mu_i) + G(\tau, -\mu_i) = \sum_{k=1}^N w_k \Psi(\mu_k) [G(\tau, \mu_k) + G(\tau, -\mu_k)] \quad (4.28)$$

com $i = 1, \dots, N$. Notamos que nas eqs.(4.27) e (4.28) estamos considerando N pontos de quadratura $\{\mu_k\}$ e N pesos $\{w_k\}$ definidos num intervalo $[0, 1]$.

Buscando uma solução do tipo exponencial para as eqs.(4.27) e (4.28), temos

$$G(\tau, \pm\mu_i) = \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu} \quad (4.29)$$

onde ν é a constante de separação e as funções ϕ denotam o que chamamos de componentes independentes da parte espacial das soluções. Neste capítulo essas funções são determinadas analiticamente.

Substituimos a solução sugerida nas eqs.(4.27) e (4.28) encontrando, na forma matricial,

$$\frac{1}{\nu}\mathbf{M}\Phi_+(\nu) = (\mathbf{I} - \mathbf{W})\Phi_+(\nu) - \mathbf{W}\Phi_-(\nu) \quad (4.30)$$

e

$$-\frac{1}{\nu}\mathbf{M}\Phi_-(\nu) = (\mathbf{I} - \mathbf{W})\Phi_-(\nu) - \mathbf{W}\Phi_+(\nu). \quad (4.31)$$

Aqui, \mathbf{I} é uma matriz identidade $N \times N$,

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_N\}, \quad (4.32)$$

$$\Phi_{\pm}(\nu) = [\phi(\nu, \pm\mu_1), \phi(\nu, \pm\mu_2), \dots, \phi(\nu, \pm\mu_N)]^T \quad (4.33)$$

e

$$\mathbf{W}_{i,j} = w_j \Psi(\mu_i), \quad (4.34)$$

onde w_j representam os pesos da quadratura. Somando e subtraindo as equações (4.30) e (4.31), encontramos

$$\frac{1}{\nu}\mathbf{M}\mathbf{V} = (\mathbf{I} - 2\mathbf{W})\mathbf{U} \quad (4.35)$$

e

$$\frac{1}{\nu}\mathbf{M}\mathbf{U} = \mathbf{V}, \quad (4.36)$$

onde

$$\mathbf{U} = \Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu) \quad (4.37)$$

e

$$\mathbf{V} = \Phi_+(\nu) - \Phi_-(\nu). \quad (4.38)$$

E assim, substituímos a eq.(4.36) na eq.(4.35), encontrando

$$\frac{1}{\nu^2}\mathbf{M}\mathbf{U} = (\mathbf{D} - 2\mathbf{M}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{M}^{-1})\mathbf{M}\mathbf{U}, \quad (4.39)$$

onde

$$\mathbf{D} = \text{diag}\{\mu_1^2, \mu_2^2, \dots, \mu_N^2\}. \quad (4.40)$$

Segundo [5] e [6], multiplicamos a eq.(4.39) pela matriz diagonal \mathbf{T} , cujos elementos da diagonal são dados por

$$T_i = [w_i\Psi(\mu_i)]^{1/2}. \quad (4.41)$$

Escolhendo os elementos da matriz \mathbf{T} desta forma, fazemos com que a parte $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{M}^{-1}$ da eq.(4.39) se torne simétrica e assim, reescrevemos nosso problema de autovalores na forma

$$\frac{1}{\nu^2}\mathbf{T}\mathbf{M}\mathbf{U} = (\mathbf{D} - 2\mathbf{M}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{W}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{M}^{-1})\mathbf{T}\mathbf{M}\mathbf{U} \quad (4.42)$$

ou

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{z}\mathbf{z}^T)\mathbf{X} = \lambda\mathbf{X}, \quad (4.43)$$

onde

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{M}\mathbf{U} \quad (4.44)$$

e

$$\mathbf{z} = \left[\frac{\sqrt{w_1\Psi(\mu_1)}}{\mu_1}, \frac{\sqrt{w_2\Psi(\mu_2)}}{\mu_2}, \dots, \frac{\sqrt{w_N\Psi(\mu_N)}}{\mu_N} \right]^T. \quad (4.45)$$

Note que $\lambda = 1/\nu^2$ e ainda, o problema de autovalores definido na eq.(4.43) é de uma forma especial que encontramos, por exemplo, no método “divide and conquer” [21] para determinação de autovalores de matrizes tridiagonais. Algumas propriedades

importantes referentes à esse problema são apresentados no anexo1. Notamos ainda que devemos excluir do nosso esquema de quadratura o ponto zero.

Considerando que encontramos os referidos autovalores da eq.(4.43) e impondo a condição de normalização

$$\sum_{k=1}^N w_k \Psi(\mu_k) [\phi(\nu, \mu_k) + \phi(\nu, -\mu_k)] = 1, \quad (4.46)$$

escrevemos nossa solução em ordenadas discretas como

$$G(\tau, \pm\mu_i) = \sum_{j=1}^N [A_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu_j} + B_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{\tau/\nu_j}], \quad (4.47)$$

onde definimos, para os casos onde os pontos de quadratura são diferentes das constantes de separação,

$$\phi(\nu, \pm\mu_i) = \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \mu_i}. \quad (4.48)$$

As constantes arbitrárias $\{A_j\}$ e $\{B_j\}$ são determinadas da avaliação das condições de contorno nos pontos de quadratura e as constantes $\{\nu_j\}$ são o recíproco das raízes quadradas positivas dos autovalores definidos pela eq.(4.43). Desta forma, definimos completamente nossa solução em ordenadas discretas.

4.2 O problema H .

Para resolvermos o problema H , definimos a função característica $\Psi(\mu) = \frac{1}{2}$ e seguimos os passos do método de ordenadas discretas anteriormente exposto. Impomos ainda a condição de normalização

$$\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N w_k [\phi(\nu, \mu) + \phi(\nu, -\mu)] = 1 \quad (4.49)$$

e escrevemos a solução em ordenadas discretas como

$$H(\tau, \pm\mu_i) = \sum_{j=1}^N [E_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu_j} + F_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{+\tau/\nu_j}]. \quad (4.50)$$

Definimos

$$\phi(\nu, \pm\mu_i) = \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \mu_i} \quad (4.51)$$

e lembramos, neste ponto, que segundo [14], problemas baseados na equação (4.9) são conservativos, pois

$$\int_{-1}^1 \Psi(\mu) d\mu = 1. \quad (4.52)$$

Sendo assim, esperamos que um dos autovalores definidos na eq.(4.43) tenda a zero quando N tender ao infinito. Usando este fato, negligenciamos o maior valor dentre os $\{\nu_j\}$ computados e reescrevemos a equação (4.50) como

$$H(\tau, \pm\mu_i) = E + F(\tau \mp \mu_i) + \sum_{j=1}^{N-1} [E_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu_j} + F_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{+\tau/\nu_j}]. \quad (4.53)$$

Considerando que estamos num domínio semi-infinito, temos que as constantes F e $\{F_j\}$ são todas iguais a zero e escrevemos a solução como

$$H(\tau, \pm\mu_i) = E + \sum_{j=1}^{N-1} [E_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu_j}] \quad (4.54)$$

ou, de forma mais clara

$$H(\tau, \pm\mu_i) = E + \sum_{j=1}^{N-1} [E_j \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \mu_i} e^{-\tau/\nu_j}]. \quad (4.55)$$

Para definir as constantes E e $\{E_j\}$, substituímos a eq.(4.55) na condição de contorno, eq.(4.21), avaliada nos pontos de quadratura, encontrando assim, um sistema de equações algébricas lineares da forma

$$\sum_{j=1}^{N-1} E_j \left[\frac{(2-\alpha)\mu_i\nu_j + \alpha\nu_j^2}{\nu_j^2 - \mu_i^2} - 2\alpha\nu_j \sum_{k=1}^N w_k \frac{\mu_k}{\nu_j + \mu_k} \right] = \frac{9}{2}(\alpha-2)\left(\mu_i - \frac{2}{3}\right) \quad (4.56)$$

para $i = 1, \dots, N$. A resolução deste sistema faz com que o problema H fique completamente resolvido.

4.3 O problema G_1 .

Observando a formulação do problema G_1 dada pela eq.(4.17), percebemos que esta equação é não homogênea, pois possui termo de fonte. Para tornar a equação homogênea, propomos

$$G_1(\tau, \mu) = G_{1,h}(\tau, \mu) - \frac{2}{3\pi^{1/2}}, \quad (4.57)$$

encontrando então

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} G_{1,h}(\tau, \mu) + G_{1,h}(\tau, \mu) = \frac{\lambda}{2} \int_{-1}^1 G_{1,h}(\tau, \mu') \mu'^2 d\mu' \quad (4.58)$$

e

$$G_{1,h}(0, \mu) + (1 - \alpha)G_{1,h}(0, -\mu) = \frac{2(2 - \alpha)}{3\pi^{1/2}}. \quad (4.59)$$

Trabalhamos então com a versão homogênea da equação, dada pela eq.(4.58), com condição de contorno dada pela eq.(4.59). Para resolvermos o problema $G_{1,h}$, basta definirmos a função característica $\Psi(\mu) = \mu^2$ e seguir os mesmos passos do problema H . Impomos a condição de normalização

$$\sum_{k=1}^N w_k \mu_k^2 [\phi(\eta, \mu_k) + \phi(\eta, -\mu_k)] = 1 \quad (4.60)$$

e escrevemos nossa solução em ordenadas discretas como

$$G_{1,h}(\tau, \pm\mu_i) = \sum_{j=1}^N [C_j \phi(\eta, \pm\mu_i) e^{-\tau/\eta_j} + D_j \phi(\eta, \pm\mu_i) e^{\tau/\eta_j}]. \quad (4.61)$$

Definimos

$$\phi(\eta, \pm\mu_i) = \frac{\lambda}{2} \frac{\eta_j}{\eta_j \mp \mu_i} \quad (4.62)$$

e como estamos num domínio semi-infinito, temos que as constantes $\{D_j\}$ são todas iguais a zero e escrevemos a solução como

$$G_{1,h}(\tau, \pm\mu_i) = \sum_{j=1}^N [C_j \phi(\eta, \pm\mu_i) e^{-\tau/\eta_j}] \quad (4.63)$$

ou, de forma mais clara

$$G_{1,h}(\tau, \pm\mu_i) = \sum_{j=1}^N [C_j \frac{\lambda}{2} \frac{\eta_j}{\eta_j \mp \mu_i} e^{-\tau/\eta_j}], \quad (4.64)$$

com $i = 1, \dots, N$.

Para definirmos as constantes $\{C_j\}$, substituímos a eq.(4.64) na condição de contorno, eq.(4.59), avaliada nos pontos de quadratura $\{\mu_i\}$, encontrando assim, um sistema de equações algébricas lineares da forma

$$\sum_{j=1}^N C_j \frac{\lambda}{2} \frac{(2-\alpha)\eta_j^2 + \alpha\mu_i\eta_j}{\eta_j^2 - \mu_i^2} = 2 \frac{(2-\alpha)}{3\sqrt{\pi}} \quad (4.65)$$

para $i = 1, \dots, N$. A resolução deste sistema faz com que o problema G_1 fique completamente resolvido.

4.4 O problema G_2 .

Observando a formulação do problema G_2 dada pela eq.(4.18), com $k = 2$, percebemos que esta equação é não homogênea, pois possui termo de fonte, que neste caso é $S_2(\tau)$, definida conforme eq.(4.20). Notamos, após algumas

manipulações algébricas, que

$$S_2(\tau) = \frac{3\pi^{1/2}}{32} \int_{-1}^1 G_{1,h}(\tau, \mu) \mu d\mu. \quad (4.66)$$

Usamos nosso método de N-pontos de ordenadas discretas para resolver eq.(4.58) sujeito a eq.(4.59), e assim escrevemos

$$S_2(\tau) = \sum_{j=1}^N S_{2,j} e^{-\tau/\eta_j}, \quad (4.67)$$

onde $\{\eta_j\}$ são constantes de separação do problema G_1 e o $S_{2,j}$ é considerado conhecido uma vez que resolvemos o problema G_1 . Para convertermos eq.(4.18) para a forma homogênea, escrevemos

$$G_2(\tau, \mu) = G_{2,h}(\tau, \mu) + G_{2,p}(\tau, \mu), \quad (4.68)$$

onde $G_{2,p}(\tau, \mu)$ é a solução particular correspondente ao termo de fonte não homogêneo dado pela eq.(4.67). Assim, temos que resolver

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} G_{2,h}(\tau, \mu) + G_{2,h}(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 G_{2,h}(\tau, \mu') d\mu', \quad (4.69)$$

sujeito a

$$G_{2,h}(0, \mu) - (1 - \alpha)G_{2,h}(0, -\mu) = -G_{2,p}(0, \mu) + (1 - \alpha)G_{2,p}(0, -\mu) + (2 - \alpha)\mu \quad (4.70)$$

para $\mu \in (0, 1]$.

Uma vez conhecida uma solução particular correspondente ao termo de fonte dado pela eq.(4.67), determinamos $G_{2,h}$ cuja formulação, dada pela eq.(4.69), é idêntica a formulação do problema H , já anteriormente visto, possuindo a mesma função característica e a mesma condição de normalização. Escrevemos nossa solução

em ordenadas discretas para o problema $G_{2,h}$ da mesma forma que para o problema H , como

$$G_{2,h}(\tau, \pm\mu_i) = \sum_{j=1}^N [A_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu_j} + B_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{\tau/\nu_j}]. \quad (4.71)$$

Este problema, assim como o H também é conservativo e portanto escrevemos

$$G_{2,h}(\tau, \pm\mu_i) = A + \sum_{j=1}^{N-1} [A_j \phi(\nu, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu_j}] \quad (4.72)$$

ou, de forma mais clara

$$G_{2,h}(\tau, \pm\mu_i) = A + \sum_{j=1}^{N-1} [A_j \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \mu_i} e^{-\tau/\nu_j}], \quad (4.73)$$

com $i = 1, \dots, N$.

Para definir as constantes $\{A_j\}$, substituímos a eq.(4.73) na condição de contorno, eq.(4.70), avaliada nos pontos de quadratura $\{\mu_i\}$. Neste ponto, observamos que necessitamos conhecer a $G_{2,p}$ para definir por completo a condição de contorno. Consideramos então, a solução particular do problema escrita na forma

$$\pm\mu_i \frac{\partial}{\partial \tau} G_{2,p}(\tau, \pm\mu_i) + G_{2,p}(\tau, \pm\mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \omega_k [G_{2,p}(\tau, \mu_k) + G_{2,p}(\tau, -\mu_k)] + S_{2,j} e^{-\tau/\eta_j}, \quad (4.74)$$

onde $S_{2,j}$ vem do termo de fonte dado pela eq.(4.67).

Aqui, é importante salientar que, usando o método de ordenadas discretas no termo de fonte dado por eq.(4.66) encontramos

$$S_2(\tau) = \frac{3\sqrt{\pi}}{32} \sum_{j=1}^N C_j \sum_{k=1}^N \frac{\lambda \omega_k \mu_k^2 \eta_j}{\eta_j^2 - \mu_k^2} e^{-\tau/\eta_j}. \quad (4.75)$$

Lembramos que η_j e C_j são, respectivamente, os autovalores e coeficientes do problema G_1 . Assim sendo, observamos que, segundo as eqs.(4.75) e (4.67), podemos

definir $S_{2,j}$ como

$$S_{2,j} = \frac{3\sqrt{\pi}}{32} C_j \sum_{k=1}^N \frac{\lambda \omega_k \mu_k^2 \eta_j}{\eta_j^2 - \mu_k^2} \quad (4.76)$$

e usando a condição de normalização dada pela eq.(4.49), encontramos

$$S_{2,j} = \frac{3\sqrt{\pi}}{32} C_j \frac{1}{\eta_j}. \quad (4.77)$$

Propomos uma solução do tipo

$$G_{2,p}(\tau, \pm\mu_i) = F(\pm\mu_i) e^{-\tau/\eta_j} \quad (4.78)$$

e substituindo na eq.(4.74), encontramos

$$(\eta_j - \mu_i)F(\mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \omega_k \eta_j [F(\mu_i) + F(-\mu_i)] + S_{2,j} \quad (4.79)$$

e

$$(\eta_j + \mu_i)F(-\mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \omega_k \eta_j [F(\mu_i) + F(-\mu_i)] + S_{2,j}. \quad (4.80)$$

Somando e subtraindo as equações (4.79) e (4.80), encontramos

$$F(\pm\mu_i) = \frac{\eta_j}{\eta_j \mp \mu_i} \frac{S_{2,j}}{\Omega(\eta_j)}, \quad (4.81)$$

onde

$$\Omega(\eta_j) = 1 - \eta_j^2 \sum_{k=1}^N \frac{\omega_k}{\eta_j^2 - \mu_k^2}. \quad (4.82)$$

Portanto, seguindo as eqs.(4.78), (4.81) e (4.82) podemos escrever nossa solução particular do problema G_2 como

$$G_{2,p}(\tau, \pm\mu_i) = \frac{\eta_j}{\eta_j \mp \mu_i} \frac{S_{2,j}}{\Omega(\eta_j)} e^{-\tau/\eta_j}. \quad (4.83)$$

Assim sendo, encontramos as constantes A_j pois a condição de contorno dada pela eq.(4.70) está completamente definida. Substituindo as eqs.(4.73) e (4.83)

na eq.(4.70), encontramos um sistema de equações algébricas lineares da forma

$$\sum_{j=1}^{N-1} A_j \left[\frac{(2-\alpha)\nu_j\mu_i + \alpha\nu_j^2}{\nu_j^2 - \mu_i^2} + \alpha A \right] = (2-\alpha)\mu_i + \sum_{j=1}^N \frac{S_{2,j}}{\Omega(\eta_j)} \frac{(\alpha-2)\eta_j\mu_i - \alpha\eta_j^2}{\eta_j^2 - \mu_i^2} \quad (4.84)$$

para $i = 1, \dots, N$. A resolução deste sistema faz com que o problema G_2 fique completamente resolvido.

Notamos que a constante E do problema H não pode ser definida da eq.(4.56). Logo, impomos uma condição de normalização arbitrária na solução, que é

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} [N(\tau) + T(\tau)] = 0. \quad (4.85)$$

Considerando a eq.(4.85), concluímos que

$$E = -\frac{9}{2}A. \quad (4.86)$$

Lembramos que as quantidades de interesse, perturbação de densidade e temperatura, respectivamente, $N(x)$ e $T(x)$, definidas nas eqs.(4.22) e (4.23), são agora escritas em termos de x , como

$$N(x) = K \left\{ -x - A/\sigma + \frac{1}{\sigma} \left[\sum_{j=1}^{N-1} (E_j + \frac{7}{2}A_j) e^{-x\sigma/\nu_j} + \sum_{j=1}^N \left[\frac{C_j}{\sqrt{\pi}\eta_j} + \frac{7}{2} \frac{S_{2,j}}{\Omega(\eta_j)} \sum_{k=1}^N \frac{\omega_k \eta_j^2}{\eta_j^2 - \mu_k^2} \right] e^{-x\sigma/\eta_j} \right] \right\} \quad (4.87)$$

e

$$T(x) = K \left\{ x + A/\sigma + \frac{1}{\sigma} \left[\sum_{j=1}^{N-1} A_j e^{-\sigma/\nu_j} + \sum_{j=1}^N \left[\frac{C_j}{3\sqrt{\pi}\eta_j} + \frac{S_{2,j}}{\Omega(\eta_j)} \sum_{k=1}^N \frac{\omega_k \eta_j^2}{\eta_j^2 - \mu_k^2} \right] e^{-x\sigma/\eta_j} \right] \right\}. \quad (4.88)$$

É importante observar que encontramos esta formulação utilizando a integração analítica dos termos exatos da solução e além disso, as condições de normalização para simplificar as expressões.

Conforme [32], definimos

$$T_{asy}(x) = x + A/\sigma, \quad (4.89)$$

relativamente a qual o coeficiente de salto de temperatura ζ resulta

$$T_{asy}(0) = \zeta \frac{d}{dx} T_{asy}(x)|_{x=0} \quad (4.90)$$

e então temos claramente que

$$\zeta = A/\sigma. \quad (4.91)$$

A decomposição em termos dos problemas escalares G_0 , G_1 e G_2 usada nesse capítulo é possível apenas quando $\eta(c) = c$. Assim, no capítulo a seguir desenvolvemos uma abordagem mais geral, independente do tipo de $\eta(c)$. Para isso, usamos também uma abordagem numérica para determinação das funções $\phi(\nu, \mu)$.

5 UM TRATAMENTO VETORIAL

O tratamento apresentado no capítulo anterior para o problema de salto de temperatura, considerando um modelo com frequência de colisão variável, baseado na solução de problemas escalares sucessivos, é possível apenas quando admitimos que a frequência de colisão é proporcional à velocidade ($\eta(c) = c$). Neste capítulo introduzimos uma abordagem vetorial que possibilita o tratamento do referido problema de forma mais geral, uma vez que é válida também quando outras aproximações são usadas para descrever $\eta(c)$, conforme apresentado em [3], tais como o modelo BGK clássico e o modelo de esferas rígidas.

Dessa forma, voltamos à eq.(3.14), e introduzimos a mudança de variáveis, inicialmente proposta por Busbridge [13]

$$\xi = \frac{c\mu}{\eta(c)}, \quad (5.1)$$

$$\gamma = \sup\{c/\eta(c)\} \quad (5.2)$$

e propomos então a decomposição

$$Z[\tau, c, \xi\eta(c)/c] = G_0(\tau, \xi) + \xi\eta(c)G_1(\tau, \xi) + (c^2 - \omega)G_2(\tau, \xi). \quad (5.3)$$

Observamos que, a decomposição expressa em (5.3) pode ser vista como uma extensão de abordagens usadas anteriormente [5, 7], e resulta em uma importante redução do número de variáveis envolvidas nos problemas a serem resolvidos, como vemos a seguir, na derivação apresentada.

Encontramos, então, substituindo a eq.(5.3) na eq.(3.14), um conjunto de problemas, descritos de forma geral como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} G_i(\tau, \xi) + G_i(\tau, \xi) = \int_{-\gamma}^{\gamma} [\psi_{i,0}(\xi') G_0(\tau, \xi') + \psi_{i,1}(\xi') G_1(\tau, \xi') + \psi_{i,2}(\xi') G_2(\tau, \xi')] d\xi', \quad (5.4)$$

para $i = 0, 1, 2$. Aqui,

$$\psi_{0,0}(\xi) = \frac{\beta_0}{2} \int_{M_\xi} ce^{-c^2} \eta^2(c) dc, \quad (5.5)$$

$$\psi_{0,1}(\xi) = \frac{\beta_0 \xi}{2} \int_{M_\xi} ce^{-c^2} \eta^3(c) dc, \quad (5.6)$$

$$\psi_{0,2}(\xi) = \frac{\beta_0}{2} \int_{M_\xi} ce^{-c^2} \eta^2(c) (c^2 - \omega) dc, \quad (5.7)$$

$$\psi_{1,0}(\xi) = \frac{\beta_1 \xi}{2} \int_{M_\xi} ce^{-c^2} \eta^3(c) dc, \quad (5.8)$$

$$\psi_{1,1}(\xi) = \frac{\beta_1 \xi^2}{2} \int_{M_\xi} ce^{-c^2} \eta^4(c) dc, \quad (5.9)$$

$$\psi_{1,2}(\xi) = \frac{\beta_1 \xi}{2} \int_{M_\xi} ce^{-c^2} \eta^3(c) (c^2 - \omega) dc, \quad (5.10)$$

$$\psi_{2,0}(\xi) = \frac{\beta_2}{2} \int_{M_\xi} ce^{-c^2} \eta^2(c) (c^2 - \omega) dc, \quad (5.11)$$

$$\psi_{2,1}(\xi) = \frac{\beta_2 \xi}{2} \int_{M_\xi} ce^{-c^2} \eta^3(c) (c^2 - \omega) dc \quad (5.12)$$

e

$$\psi_{2,2}(\xi) = \frac{\beta_2}{2} \int_{M_\xi} ce^{-c^2} \eta^2(c) (c^2 - \omega)^2 dc, \quad (5.13)$$

onde

$$se \quad c \in M_\xi \Rightarrow \frac{\eta(c)|\xi|}{c} \leq 1. \quad (5.14)$$

Determinamos também as condições de contorno, substituindo a eq.(5.3) na eq.(3.15)

e temos

$$G_0(0, \xi) - (1 - \alpha)G_0(0, -\xi) - \Delta = \frac{4\alpha}{3} + (2 - \alpha)(\omega - 5/2)\xi, \quad (5.15)$$

$$G_1(0, \xi) + (1 - \alpha)G_1(0, -\xi) = 0 \quad (5.16)$$

e

$$G_2(0, \xi) - (1 - \alpha)G_2(0, -\xi) = (2 - \alpha)\xi \quad (5.17)$$

para $\xi \in (0, \gamma]$. Aqui, o termo de difusão Δ é definido como

$$\Delta = \frac{8\alpha}{\beta_0} \int_0^\gamma [\psi_{0,0}(\xi)G_0(0, -\xi) - \psi_{0,1}(\xi)G_1(0, -\xi) + \psi_{0,2}(\xi)G_2(0, -\xi)]\xi d\xi. \quad (5.18)$$

Introduzimos a notação vetorial

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} G_0(\tau, \xi) \\ G_1(\tau, \xi) \\ G_2(\tau, \xi) \end{bmatrix} \quad (5.19)$$

e reescrevemos o problema como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathbf{G}(\tau, \xi) = \int_{-\gamma}^\gamma \Psi(\xi') \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (5.20)$$

onde a matriz $\Psi(\xi)$ de ordem 3×3 tem componentes $\psi(\xi)$, como segue

$$\Psi(\xi) = \begin{bmatrix} \psi_{0,0}(\xi) & \psi_{0,1}(\xi) & \psi_{0,2}(\xi) \\ \psi_{1,0}(\xi) & \psi_{1,1}(\xi) & \psi_{1,2}(\xi) \\ \psi_{2,0}(\xi) & \psi_{2,1}(\xi) & \psi_{2,2}(\xi) \end{bmatrix}. \quad (5.21)$$

Para encontrarmos a condição de contorno na forma vetorial, reescrevemos as eqs.(5.15),

(5.16) e (5.17) como

$$\mathbf{G}(0, \xi) - (1 - \alpha)\mathbf{S}\mathbf{G}(0, \xi) - 2\alpha \int_0^\infty \mathbf{D}(\xi') \mathbf{G}(0, -\xi') \xi' d\xi' = \mathbf{R}(\xi), \quad (5.22)$$

para $\xi \in (0, \gamma]$. Aqui, \mathbf{S} é dado por

$$\mathbf{S} = \text{diag}\{1, -1, 1\}, \quad (5.23)$$

$$\mathbf{D}(\xi) = \frac{4}{\beta_0} \begin{bmatrix} \psi_{0,0}(\xi) & -\psi_{0,1}(\xi) & \psi_{0,2}(\xi) \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.24)$$

e

$$\mathbf{R}(\xi) = \begin{bmatrix} (2 - \alpha)(\omega - 5/2)\xi + (4/3)\alpha\Gamma \\ 0 \\ (2 - \alpha)\xi \end{bmatrix}. \quad (5.25)$$

Sendo assim, buscamos uma solução limitada quando τ tende ao infinito da eq.(5.20) que satisfaz a eq.(5.22).

Observamos que o valor escalar de σ tem um efeito muito grande em nossos resultados numéricos. Mesmo havendo algumas inconsistências na literatura, achamos apropriado usar o valor escolhido por Loyalka [23], definido como

$$\sigma = \frac{16}{15\pi^{1/2}} \int_0^\infty \eta^{-1}(c) c^4 e^{-c^2} (c^2 - 5/2)^2 dc. \quad (5.26)$$

5.1 O caso especial: $\eta(c) = c$

Nas expressões da seção anterior escolhemos, conforme o objetivo deste trabalho, ter

$$\eta(c) = c. \quad (5.27)$$

Escrevemos, como dito anteriormente, nosso problema na forma matricial

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} G_0(\tau, \xi) \\ G_1(\tau, \xi) \\ G_2(\tau, \xi) \end{bmatrix} \quad (5.28)$$

e resolvemos o “grupo de três” equações

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathbf{G}(\tau, \xi) = \int_{-1}^1 \Psi(\xi') \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (5.29)$$

onde

$$\Psi(\xi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & (3/4)\pi^{1/2}\xi & 0 \\ (9/8)\pi^{1/2}\xi & 3\xi^2 & (9/16)\pi^{1/2}\xi \\ 0 & (3/16)\pi^{1/2}\xi & 1 \end{bmatrix} \quad (5.30)$$

sujeito a condição de contorno

$$\mathbf{G}(0, \xi) - (1 - \alpha)\mathbf{S}\mathbf{G}(0, -\xi) - 2\alpha \int_0^1 \mathbf{D}(\xi') \mathbf{G}(0, -\xi') \xi' d\xi' = \mathbf{R}(\xi) \quad (5.31)$$

para $\xi \in (0, 1]$. Aqui definimos

$$\mathbf{S} = \text{diag}\{1, -1, 1\}, \quad (5.32)$$

$$\mathbf{D}(\xi) = \begin{bmatrix} 1 & -(3/4)\pi^{1/2}\xi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.33)$$

$$\mathbf{R}(\xi) = \begin{bmatrix} (1/2)(\alpha - 2)\xi - (1/3)\alpha \\ 0 \\ (2 - \alpha)\xi \end{bmatrix} \quad (5.34)$$

e foi usado

$$\gamma = 1, \quad \Gamma = -1/4, \quad \omega = 2, \quad \beta_0 = 2 \text{ e } \sigma = \frac{6}{5\pi^{1/2}}. \quad (5.35)$$

E assim obtemos uma solução para a eq.(5.29) satisfazendo a condição de contorno dada pela eq.(5.31).

5.2 O método de ordenadas discretas: soluções elementares numéricas

Assim como no método apresentado no capítulo 4, definimos nosso esquema de quadratura e a função característica, que aqui será descrita através de uma matriz. Notamos que a matriz característica $\Psi(\xi)$, definida pela eq.(5.30) é não simétrica. Portanto, $\Psi(\xi) \neq \Psi(-\xi)$, e assim escrevemos a versão para o problema em ordenadas discretas da eq.(5.29) como

$$\pm \xi_i \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) + \mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) = \sum_{k=1}^N w_k [\Psi(\xi_k) \mathbf{G}(\tau, \xi_k) + \Psi(-\xi_k) \mathbf{G}(\tau, -\xi_k)] \quad (5.36)$$

com $i = 1, 2, \dots, N$. Escrevendo as eqs.(5.36), nós notamos que estamos considerando N pontos de quadratura $\{\xi_k\}$ e N pesos $\{w_k\}$ definidos num intervalo $[0, 1]$.

Buscando soluções do tipo exponencial para as equações (5.36), definimos

$$\mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) = \Phi(\nu, \pm \xi_i) e^{-\tau/\nu}. \quad (5.37)$$

Substituindo eq.(5.37) na eq.(5.36) temos

$$(\nu \mp \xi_i) \Phi(\nu, \pm \xi_i) = \nu \sum_{k=1}^N \omega_k [\Psi(\xi_k) \Phi(\nu, \xi_k) + \Psi(-\xi_k) \Phi(\nu, -\xi_k)], \quad (5.38)$$

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

$$\Phi_+(\nu) = [\Phi^T(\nu, \xi_1) \quad \Phi^T(\nu, \xi_2) \quad \dots \quad \Phi^T(\nu, \xi_N)]^T, \quad (5.39)$$

$$\Phi_-(\nu) = [\Phi^T(\nu, -\xi_1) \quad \Phi^T(\nu, -\xi_2) \quad \dots \quad \Phi^T(\nu, -\xi_N)]^T \quad (5.40)$$

e

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\xi_1 \mathbf{I}, \xi_2 \mathbf{I}, \dots, \xi_N \mathbf{I}\}, \quad (5.41)$$

onde \mathbf{I} é matriz identidade de ordem 3. Complementando, definimos ainda que \mathbf{W}_+ e \mathbf{W}_- denotam matrizes de ordem $3N \times 3N$, onde cada $3 \times 3N$ linhas são definidas, respectivamente como

$$\mathbf{R}_+ = [\omega_1 \Psi(\xi_1) \quad \omega_2 \Psi(\xi_2) \quad \dots \quad \omega_N \Psi(\xi_N)] \quad (5.42)$$

e

$$\mathbf{R}_- = [\omega_1 \Psi(-\xi_1) \quad \omega_2 \Psi(-\xi_2) \quad \dots \quad \omega_N \Psi(-\xi_N)]. \quad (5.43)$$

Assim escrevemos a equação (5.38) como

$$\nu \Phi_+(\nu) - \mathbf{M} \Phi_+(\nu) = \nu [\mathbf{W}_+ \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}_- \Phi_-(\nu)] \quad (5.44)$$

e

$$\nu \Phi_-(\nu) + \mathbf{M} \Phi_-(\nu) = \nu [\mathbf{W}_+ \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}_- \Phi_-(\nu)]. \quad (5.45)$$

Neste ponto, achamos conveniente, após algumas observações, escrever

$$\mathbf{W}_- = \mathbf{D} \mathbf{W}_+ \mathbf{D}, \quad (5.46)$$

onde a matriz \mathbf{D} de ordem $3N \times 3N$ pode ser escrita como

$$\mathbf{D} = \text{diag}\{\mathbf{S}, \mathbf{S}, \dots, \mathbf{S}\}, \quad (5.47)$$

onde \mathbf{S} é dada pela eq.(5.32). Nós agora multiplicamos a equação (5.45) por \mathbf{D} e reescrevemos as eqs.(5.44) e (5.45) como

$$\nu \Phi_+(\nu) - \mathbf{M} \Phi_+(\nu) = \nu [\mathbf{W}_+ \Phi_+(\nu) + \mathbf{D} \mathbf{W}_+ \Phi_-(\nu)] \quad (5.48)$$

e

$$\nu \mathbf{D} \Phi_-(\nu) + \mathbf{M} \mathbf{D} \Phi_-(\nu) = \nu [\mathbf{D} \mathbf{W}_+ \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}_+ \mathbf{D} \Phi_-(\nu)]. \quad (5.49)$$

Definimos

$$\mathbf{U} = \Phi_+(\nu) + \mathbf{D}\Phi_-(\nu) \quad (5.50)$$

e

$$\mathbf{V} = \Phi_+(\nu) - \mathbf{D}\Phi_-(\nu) \quad (5.51)$$

e somamos as equações (5.48) e (5.49) obtendo

$$\nu[\mathbf{I} - (\mathbf{I} + \mathbf{D})\mathbf{W}_+] \mathbf{U} = \mathbf{M}\mathbf{V}, \quad (5.52)$$

onde, neste ponto, \mathbf{I} é uma matriz identidade $3N \times 3N$. Podemos ainda determinar a diferença entre as equações (5.48) e (5.49), encontrando

$$\nu[\mathbf{I} - (\mathbf{I} - \mathbf{D})\mathbf{W}_+] \mathbf{V} = \mathbf{M}\mathbf{U}. \quad (5.53)$$

Eliminando \mathbf{V} de nossas considerações, encontramos nosso problema de autovalores definido por

$$\mathbf{A}\mathbf{U} = \lambda\mathbf{U}, \quad (5.54)$$

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

$$\mathbf{A} = \mathbf{M}^{-1}[\mathbf{I} - (\mathbf{I} - \mathbf{D})\mathbf{W}_+]\mathbf{M}^{-1}[\mathbf{I} - (\mathbf{I} + \mathbf{D})\mathbf{W}_+]. \quad (5.55)$$

Sendo assim, determinamos nossos $3N$ autovalores ν e respectivos autovetores \mathbf{U} . Neste ponto podemos observar que encontramos dois autovalores que tendem ao infinito quando τ tender a zero. Introduzimos, então, três soluções linearmente independentes do problema definido pela eq.(5.29), que são

$$\mathbf{P}_1 = [1 \ 0 \ 0]^T, \quad (5.56)$$

$$\mathbf{P}_2 = [0 \ 0 \ 1]^T \quad (5.57)$$

e

$$\mathbf{P}_3 = [0 \ 1 \ 0]^T. \quad (5.58)$$

Temos então

$$\mathbf{G}_\pm(\tau) = [\mathbf{G}^T(\tau, \pm\xi_1) \ \mathbf{G}^T(\tau, \pm\xi_2) \ \dots \ \mathbf{G}^T(\tau, \pm\xi_N)]^T \quad (5.59)$$

e portanto nossa solução em ordenadas discretas pode ser escrita, após excluirmos todas as soluções que não são limitadas quando τ tende ao infinito, como

$$\mathbf{G}_\pm(\tau) = A_1\Phi_1 + A_2\Phi_2 + B\Phi_3 + \sum_{j=3}^{3N} A_j\Phi_\pm(\nu_j)e^{-\tau/\nu_j}, \quad (5.60)$$

onde B e A_j são constantes arbitrárias, para $j = 1, 2, \dots, 3N$. Além disto,

$$\Phi_j = [\mathbf{P}_j^T \ \mathbf{P}_j^T \ \dots \ \mathbf{P}_j^T]^T, \quad j = 1, 2, 3 \quad (5.61)$$

e Φ_\pm são avaliadas das equações (5.50), (5.51), (5.52) e (5.53). Encontramos então

$$\Phi_+(\nu_j) = \frac{1}{2}\{\mathbf{I} + \nu_j\mathbf{M}^{-1}[\mathbf{I} - (\mathbf{I} + \mathbf{D})\mathbf{W}_+]\}\mathbf{U}_j \quad (5.62)$$

e

$$\Phi_-(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{D}\{\mathbf{I} - \nu_j\mathbf{M}^{-1}[\mathbf{I} - (\mathbf{I} + \mathbf{D})\mathbf{W}_+]\}\mathbf{U}_j, \quad (5.63)$$

onde \mathbf{U}_j são os autovetores dos correspondentes autovalores ν_j , retirados da eq.(5.54).

Substituímos a eq.(5.60) na condição de contorno dada pela eq.(5.31) e

obtemos que

$$\mathbf{G}(0, \xi) - (1 - \alpha)\mathbf{R}_s\mathbf{G}(0, -\xi) - 2\alpha\mathbf{R}_d\mathbf{G}(0, -\xi) = \mathbf{R}. \quad (5.64)$$

Aqui é importante salientar que os termos associados às soluções exatas foram integrados de forma exata e para os demais usamos nosso esquema de quadratura

numérica. A matriz \mathbf{R}_s é definida como

$$\mathbf{R}_s = \text{diag}\{\mathbf{S}, \mathbf{S}, \dots, \mathbf{S}\}, \quad (5.65)$$

onde \mathbf{S} é dada pela eq.(5.32), a matriz \mathbf{R}_d é de ordem $3N \times 3N$ e cada $3 \times 3N$ linhas são definidas como

$$\mathbf{R}_q = [\omega_1 \xi_1 \mathbf{D}(\xi_1) \quad \omega_2 \xi_2 \mathbf{D}(\xi_2) \quad \dots \quad \omega_N \xi_N \mathbf{D}(\xi_N)], \quad (5.66)$$

onde $\mathbf{D}(\xi)$ é dado pela eq.(5.33). O lado direito da equação é dado por

$$\mathbf{R} = [\mathbf{R}^T(\xi_1) \quad \mathbf{R}^T(\xi_2) \quad \dots \quad \mathbf{R}^T(\xi_N)]^T, \quad (5.67)$$

com $\mathbf{R}(\xi)$ definido na eq.(5.34).

Finalmente, notamos que a constante A_1 não pode ser definida da equação (5.64). Logo, impomos uma condição de normalização arbitrária na solução, como já feito no capítulo 4, que é

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} [N(\tau) + T(\tau)] = 0. \quad (5.68)$$

Neste ponto, nós seguimos outros trabalhos, como [3] e [8] e concluimos, das eqs.(4.15), (4.16), (5.60) e (5.68) que

$$A_1 = -\frac{1}{2}A_2. \quad (5.69)$$

Observamos que essa condição não modificará, como veremos a seguir, o coeficiente de jump.

Considerando agora as quantidades que queremos avaliar, substituímos a eq.(5.60) nas eqs.(4.15) e (4.16), e usamos a eq.(5.69) para encontrar

$$N(\tau) = \frac{K}{\sigma} \left\{ -\tau - A_2 + \frac{1}{\pi^{1/2}} \sum_{j=3}^{3N} A_j [\mathbf{N}_+ \Phi_+(\nu_j) + \mathbf{N}_- \Phi_-(\nu_j)] e^{-\tau/\nu_j} \right\} \quad (5.70)$$

e

$$T(\tau) = \frac{K}{\sigma} \left\{ \tau + A_2 + \frac{2}{3\pi^{1/2}} \sum_{j=3}^{3N} A_j [\mathbf{T}_+ \Phi_+(\nu_j) + \mathbf{T}_- \Phi_-(\nu_j)] e^{-\tau/\nu_j} \right\}, \quad (5.71)$$

onde

$$\mathbf{N}_{\pm} = [\omega_1 \mathbf{N}(\pm\xi_1) \quad \omega_2 \mathbf{N}(\pm\xi_2) \quad \dots \quad \omega_N \mathbf{N}(\pm\xi_N)] \quad (5.72)$$

e

$$\mathbf{T}_{\pm} = [\omega_1 \mathbf{T}(\pm\xi_1) \quad \omega_2 \mathbf{T}(\pm\xi_2) \quad \dots \quad \omega_N \mathbf{T}(\pm\xi_N)], \quad (5.73)$$

com

$$\mathbf{N}(\xi) = [(1/2)\pi^{1/2} \quad \xi \quad -(1/4)\pi^{1/2}] \quad (5.74)$$

e

$$\mathbf{T}(\xi) = [0 \quad \xi/2 \quad (3/4)\pi^{1/2}]. \quad (5.75)$$

Observamos novamente que para obter as eqs.(5.70) e (5.71), integramos analiticamente os três primeiros termos da eq.(5.60), mas usamos nosso definido sistema de quadratura para integrar os demais termos. Colocando as eqs.(5.70) e (5.71) em termos de x , encontramos

$$\mathbf{N}(x) = -x - A_2/\sigma + \frac{1}{\sigma\pi^{1/2}} \sum_{j=3}^{3N} A_j [\mathbf{N}_+ \Phi_+(\nu_j) + \mathbf{N}_- \Phi_-(\nu_j)] e^{-\sigma x/\nu_j} \quad (5.76)$$

e

$$\mathbf{T}(x) = x + A_2/\sigma + \frac{2}{3\sigma\pi^{1/2}} \sum_{j=3}^{3N} A_j [\mathbf{T}_+ \Phi_+(\nu_j) + \mathbf{T}_- \Phi_-(\nu_j)] e^{-\sigma x/\nu_j} \quad (5.77)$$

onde impomos a condição de normalização $K = 1$.

Confome descrito no final da seção 4.4, podemos ainda determinar o coeficiente de salto de temperatura como

$$\zeta = A_2/\sigma. \quad (5.78)$$

6 ASPECTOS COMPUTACIONAIS E RESULTADOS NUMÉRICOS

Na busca dos resultados numéricos para os problemas dos capítulos 4 e 5, formulamos um programa em linguagem FORTRAN. Para isto, seguimos os passos básicos abaixo relacionados, que são comuns para os dois casos, ou seja, para o escalar e para o vetorial:

- inicialmente temos de definir o esquema de quadratura. Como já tem sido feito em outros trabalhos [3] - [9], o esquema escolhido foi o de Gauss-Legendre [12], usando um simples mapeamento do intervalo $[0, 1]$ em $[-1, 1]$.

- determinamos as constantes de separação $\{\nu_j\}$ pela resolução do problema de autovalores dado pela eq.(4.43), no caso escalar, e eq.(5.54), no caso vetorial. Aqui, é claro que, além da ordem dos sistemas serem diferentes, N no caso escalar e $3N$ no caso vetorial, para o tipo especial de problema de autovalores dado pela eq.(4.43) foi usada uma subrotina específica [29], chamada UPDATER. No outro caso, usamos a subrotina RG do pacote matemático EISPACK [30].

- resolvemos os sistemas lineares para determinação das constantes arbitrárias da solução. No caso escalar, estes sistemas estão definidos nas eqs.(4.56), (4.65) e (4.84). Usamos para isto as subrotinas DQRDC e DQRSL (mínimos quadrados) do pacote matemático LINPACK [20], no problema H e as subrotinas DGECO e DGESL (eliminação Gaussiana), deste mesmo pacote, nos problemas G_1 e G_2 . No caso vetorial, este sistema está definido na eq.(5.64). Usamos as subrotinas DGECO

e DGEGL (eliminação Gaussiana), do pacote LINPACK [20] para a resolução deste sistema.

É importante salientar que o tratamento escalar exige certo cuidado no que diz respeito à forma como está definida a função ϕ (componente independente da parte espacial da solução), uma vez que o denominador desta função pode se anular quando os pontos de quadratura μ forem iguais as constantes de separação ν . Quando isso acontece, caso onde a função característica $\Psi(\xi)$ é zero do ponto de vista computacional, usamos uma subrotina para fazer a comparação entre os pontos de quadratura μ e os autovalores ν , eliminando do nosso esquema de quadratura [5] os valores para os quais a igualdade acontece. Nos problemas tratados nesse trabalho isso não ocorre e portanto não foi necessário usarmos desse recurso. Já no tratamento vetorial, observamos que podem ocorrer autovalores repetidos, e por isso a opção em usarmos as autofunções numéricas, uma vez que a subrotina RG fornece autovetores linearmente independentes. Esta pode ser uma das vantagens de se usar o tratamento de soluções elementares numéricas, ou seja, quando ocorrem autovalores repetidos, este tipo de tratamento é simplificado pelo uso de autovetores numéricos. No entanto, é necessário salientar que a abordagem das soluções elementares analíticas também pode ser usada para o tratamento de problemas vetoriais, como já foi utilizada em problemas de outras áreas [7].

Apresentamos na tabela 6.1 a seguir os resultados encontrados para o coeficiente de salto de temperatura, dado pela eq. (4.91), para diferentes valores do coeficiente de acomodação α . Usamos diferentes valores de N , ou seja, pontos

de quadratura, e a formulação vetorial para gerar os dados mostrados na tabela a seguir.

Tabela 6.1: Coeficientes de salto de temperatura ζ para diferentes α

α	$N = 4$	$N = 10$	$N = 40$
	ζ		
0.1	21.19377	21.19359	21.19359
0.2	10.10750	10.10735	10.10735
0.3	6.406559	6.406418	6.406417
0.4	4.552007	4.551885	4.551884
0.5	3.436066	3.435961	3.435960
0.6	2.689474	2.689384	2.689383
0.7	2.153973	2.153897	2.153897
0.8	1.750436	1.750372	1.750372
0.9	1.434900	1.434848	1.434848
1.0	1.180989	1.180947	1.180947

Salientamos que os resultados obtidos foram confirmados usando a formulação escalar. Além disso, para $\alpha = 1.0$, fazendo a devida adequação do valor usado para sigma, o resultado obtido para o coeficiente de salto ($\xi = 0.799533$) pode ser comparado com o obtido por Williams e Cassel ($\xi = 0,799$), mostrando boa concordância .

Podemos observar melhor na figura (6.1) a seguir, a relação entre o coeficiente de acomodação e o de salto de temperatura.

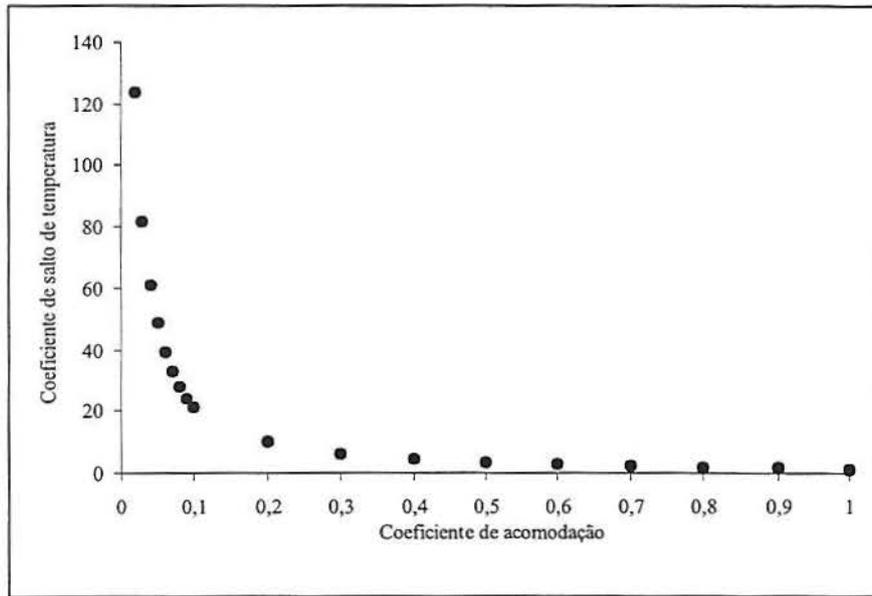


Figura 6.1: Coeficiente de acomodação \times Coeficiente de salto de temperatura

Nas tabelas 6.2, 6.3 e 6.4 a seguir, mostramos os valores obtidos usando $N = 4$, $N = 10$ e $N = 40$, $\alpha = 0.2$, $\alpha = 0.5$ e $\alpha = 1.0$ respectivamente para os desvios de temperatura, $T(x)$ e densidade, $N(x)$, conforme eqs.(4.87) e (4.88) no caso escalar e eqs.(5.76) e (5.77) no caso vetorial. É importante salientar que os resultados já são bastante precisos (em torno de quatro a cinco dígitos de precisão) para um número de pontos de quadratura pequeno, por exemplo, $N = 10$. Salientamos ainda que a execução das rotinas leva menos de 5 segundos, num pentium 200 MHz MMX. A figura (6.2) retrata os valores da tabela (6.2), onde podemos perceber o comportamento análogo descrito, segundo Welander [31], na figura (2.1).

Apesar de não termos prova rigorosa para convergência dos resultados apresentados nas tabelas desse trabalho, usamos alguns procedimentos para estabelecer confiança relativamente aos dígitos mostrados. Além da implementação através do tratamento escalar e vetorial para esse caso, duas diferentes aborda-

gens também foram usadas para o modelo associado ao caso chamado BGK clássico ($\eta(c) = 1$) [3, 8], sendo que todos os resultados foram obtidos por implementações computacionais independentes. Embora o problema aqui tratado seja considerado um problema clássico, obtivemos resultados ainda não disponíveis na literatura, através de uma formulação que se mostrou eficaz e capaz de ser genérica.

Tabela 6.2: Perturbação de Temperatura e Densidade para $\alpha = 0.2$

x	$N = 4$		$N = 10$		$N = 40$	
	$T(x)$	$N(x)$	$T(x)$	$N(x)$	$T(x)$	$N(x)$
0.0	9.69782	-9.90887	9.69786	-9.90881	9.69787	-9.90881
0.1	9.92584	-10.0712	9.92591	-10.0722	9.92599	-10.0722
0.2	10.0910	-10.2043	10.0857	-10.2015	10.0859	-10.2017
0.3	10.2318	-10.3242	10.2264	-10.3214	10.2264	-10.3214
0.4	10.3599	-10.4378	10.3564	-10.4360	10.3564	-10.4360
0.5	10.4811	-10.5481	10.4796	-10.5472	10.4796	-10.5472
0.6	10.5982	-10.6563	10.5981	-10.6561	10.5981	-10.6561
0.7	10.7125	-10.7631	10.7132	-10.7633	10.7132	-10.7634
0.8	10.8246	-10.8689	10.8257	-10.8693	10.8257	-10.8694
0.9	10.9349	-10.9738	10.9361	-10.9743	10.9362	-10.9744
1.0	11.0439	-11.0780	11.0450	-11.0785	11.0450	-11.0786
2.0	12.0884	-12.0990	12.0881	-12.0987	12.0881	-12.0987
3.0	13.1008	-13.1046	13.1004	-13.1043	13.1005	-13.1043
4.0	14.1049	-14.1064	14.1046	-14.1062	14.1047	-14.1062
5.0	15.1064	-15.1070	15.1062	-15.1069	15.1063	-15.1069
6.0	16.1070	-16.1073	16.1069	-16.1071	16.1069	-16.1072
7.0	17.1073	-17.1074	17.1071	-17.1072	17.1072	-17.1073
8.0	18.1074	-18.1075	18.1072	-18.1073	18.1073	-18.1073
9.0	19.1075	-19.1075	19.1073	-19.1073	19.1073	-19.1073
10.0	20.1075	-20.1075	20.1073	-20.1073	20.1073	-20.1073
20.0	30.1075	-30.1075	30.1073	-30.1073	30.1073	-30.1073

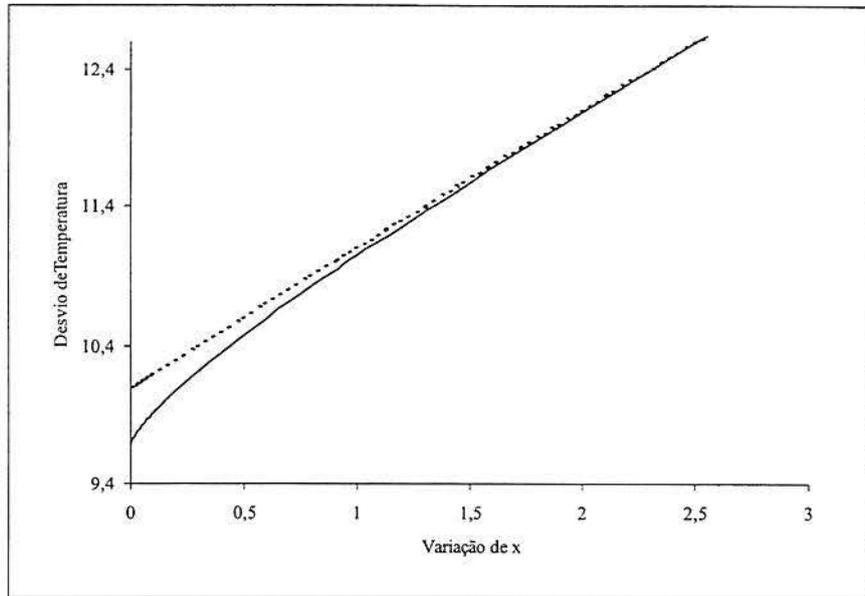


Figura 6.2: Desvio de Temperatura, para $\alpha = 0.2$

Tabela 6.3: Perturbação de Temperatura e Densidade para $\alpha = 0.5$

x	$N = 4$		$N = 10$		$N = 40$	
	$T(x)$	$N(x)$	$T(x)$	$N(x)$	$T(x)$	$N(x)$
0.0	3.10165	-3.27404	3.10167	-3.27399	3.10167	-3.27399
0.1	3.30397	-3.42466	3.30553	-3.42539	3.30560	-3.42542
0.2	3.45864	-3.55154	3.45434	-3.54933	3.45447	-3.54940
0.3	3.59193	-3.66779	3.58761	-3.66557	3.58758	-3.66556
0.4	3.71490	-3.77892	3.71213	-3.77748	3.71209	-3.77746
0.5	3.83232	-3.88732	3.83111	-3.88666	3.83110	-3.88665
0.6	3.94635	-3.99405	3.94628	-3.99396	3.94628	-3.99397
0.7	4.05804	-3.09964	4.05865	-4.09989	4.05866	-4.09990
0.8	4.16795	-4.20437	4.16890	-4.20479	4.16891	-4.20480
0.9	4.27644	-4.30841	4.27748	-4.30888	4.27749	-4.30888
1.0	4.38375	-4.41188	4.38475	-4.41232	4.38475	-4.41233
2.0	5.42037	-5.42905	5.42014	-5.42888	5.42014	-5.42888
3.0	6.43053	-6.43366	6.43030	-6.43349	6.43030	-6.43349
4.0	7.43389	-7.43514	7.43377	-7.43503	7.43378	-7.43503
5.0	8.43517	-8.43569	8.43507	-8.43559	8.43508	-8.43559
6.0	9.43568	-9.43591	9.43559	-9.43581	9.43559	-9.43581
7.0	10.4359	-10.4360	10.4358	-10.4359	10.4358	-10.4359
8.0	11.4360	-11.4360	11.4358	-11.4359	11.4359	-11.4359
9.0	12.4360	-12.4361	12.4359	-12.4359	12.4359	-12.4359
10.0	13.4361	-13.4361	13.4359	-13.4359	13.4359	-13.4360
20.0	23.4361	-23.4361	23.4359	-23.4359	23.4360	-23.4360

Tabela 6.4: Perturbação de Temperatura e Densidade para $\alpha = 1.0$

x	$N = 4$		$N = 10$		$N = 40$	
	$T(x)$	$N(x)$	$T(x)$	$N(x)$	$T(x)$	$N(x)$
0.0	0.96544	-1.07667	0.96544	-1.07664	0.96544	-1.07665
0.1	1.13079	-1.20899	1.13168	-1.20941	1.13172	-1.20943
0.2	1.26586	-1.32622	1.26309	-1.32481	1.26318	-1.32486
0.3	1.38731	-1.43668	1.38458	-1.43529	1.38456	-1.43528
0.4	1.50217	-1.54387	1.50044	-1.54298	1.50041	-1.54297
0.5	1.61346	-1.64931	1.61274	-1.64892	1.61273	-1.64892
0.6	1.72257	-1.75368	1.72257	-1.75365	1.72258	-1.75366
0.7	1.83017	-1.85731	1.83060	-1.85750	1.83061	-1.85751
0.8	1.93662	-1.96038	1.93726	-1.96068	1.93727	-1.96068
0.9	2.04214	-2.06300	2.04284	-2.06333	2.04285	-2.06334
1.0	2.14690	-2.16526	2.14756	-2.16557	2.14757	-2.16557
2.0	3.17074	-3.17642	3.17062	-3.17633	3.17062	-3.17634
3.0	4.17737	-4.17942	4.17724	-4.17934	4.17725	-4.17934
4.0	5.17957	-5.18038	5.17951	-5.18034	5.17952	-5.18034
5.0	6.18040	-6.18074	6.18036	-6.18070	6.18037	-6.18071
6.0	7.18074	-7.18089	7.18070	-7.18084	7.18071	-7.18085
7.0	8.18088	-8.18095	8.18084	-8.18090	8.18084	-8.18091
8.0	9.18094	-9.18097	9.18090	-9.18093	9.18090	-9.18093
9.0	10.1810	-10.1810	10.1809	-10.1809	10.1809	-10.1809
10.0	11.1810	-11.1810	11.1809	-11.1809	11.1809	-11.1809
20.0	21.1810	-21.1810	21.1809	-21.1809	21.1809	-21.1809

7 CONCLUSÕES

Observando os resultados apresentados nesse trabalho para a solução do problema de salto de temperatura, baseado em um modelo com frequência de colisão variável, verificamos que a versão do método de ordenadas discretas [5] aqui usada, e baseada em um esquema de N pontos de quadratura para metade do intervalo de integração, mostrou-se eficiente e simples para ambas as abordagens, escalar e vetorial, gerando resultados numéricos bastante precisos, incluindo casos, segundo nosso conhecimento, não encontrados na literatura. Como já observado em outras aplicações, além da ordem da matriz associada ao problema de autovalores se reduzir à metade das abordagens usadas tradicionalmente, em muitos casos os problemas de autovalores obtidos são também mais simplificados. Além disso, a abordagem permite que as componentes independentes da parte espacial, associadas às soluções elementares, sejam obtidas analítica ou numericamente. O segundo caso tem se mostrado apropriado para o tratamento de autovalores repetidos.

Outros modelos para o fator $\eta(c)$, ou seja, para descrição da frequência de colisão, já foram estudados através dessa formulação [3], obtendo resultados igualmente satisfatórios para esse problema. No nosso entendimento o tratamento de modelos com frequência de colisão variável representa um avanço importante no que diz respeito aos problemas de gases rarefeitos, uma vez que essas “equações modelo” resultam de simplificações do modelo original, a partir de considerações matemáticas

e propriedades físicas, sendo de extrema importância o tratamento de modelos mais complexos através de formulações mais simples.

Pretendemos agora investigar outros tipos de equações modelo, que não o CLF, como o modelo S [26], e também outras formas de interação entre as partículas e a parede, que de acordo com a literatura parecem melhorar significativamente a representação das propriedades físicas da dinâmica dos gases. O modelo S é um modelo derivado do BGK, que segundo Sharipov e Seleznev [26] determina melhores aproximações para parâmetros físicos como, por exemplo, o número de Prandtl, sendo que a principal modificação relativamente à formulação aqui apresentada diz respeito a forma do termo integral associado às colisões. No caso da interação gás-superfície, o modelo conhecido como condição de contorno de Cercignani-Lampis [16] é o que deverá ser estudado.

BIBLIOGRAFIA

- [1] ANDERSON JR., J.D., "An Engineering Survey of Radiating Shock Layers", *AIAA Journal*, **7**, 1665 (1969).
- [2] ARKILIC, E.B., SCHMIDT, M.A. and BREUER, K.S., "Gaseous Slip Flow in Long Microchannels", *J. Microelectromechanical*, **6**, 167 (1997).
- [3] BARICHELLO, L.B., BARTZ, A.C.R., CAMARGO, M. and SIEWERT, C.E., "The Temperature-Jump Problem for a Variable Collision Frequency Model", submetido a publicação .
- [4] BARICHELLO, L.B. and BARTZ, A.C.R., "A Discrete-Ordinates Solutions for the Temperature-Jump Problem in Rarefied-Gas Dynamics", *Anais do XXIII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - CNMAC 2000*, 099, realizado de 11 a 15 de setembro, Santos, São Paulo.
- [5] BARICHELLO, L.B. and SIEWERT, C.E., "A Discrete-Ordinates Solution for a Non-Grey Model with Complete Frequency Redistribution", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **62**, 665 (1999).
- [6] BARICHELLO, L.B. and SIEWERT, C.E., "A Discrete-Ordinates Solution for Poiseuille Flow in a Plane Channel", *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, **50**, 972 (1999).

- [7] BARICHELLO, L.B. and SIEWERT, C.E., "A Discrete-Ordinates Solution for a Polarization Model with Complete Frequency Redistribution", *The Astrophysical Journal*, **513**, 370 (1999).
- [8] BARICHELLO, L.B. and SIEWERT, C.E., "The Temperature-Jump Problem in Rarefied-Gas Dynamics", *Euro. J. Applied Math.*, **11**, 353 (2000).
- [9] BARICHELLO, L.B., CAMARGO, M., RODRIGUES, P. and SIEWERT, C.E., "Unified Solutions to Classical Flow Problems in the Rarefied Gas Dynamics", *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, em impressão.
- [10] BELLOUQUID, A., "The Hydrodynamical Limit of the Non Linear Boltzmann Equation", *Transport Theory and Stat. Phys.*, **28**, 57 (1999).
- [11] 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**, 511 (1954).
- [12] BURDEN, R.L. and FAIRES, J.D., "Numerical Analysis", Brooks/Cole Publishing Company, (1997).

- [13] BUSBRIDGE, I.W., "Coherent And Non-Coherent Scattering in the Theory of Line Formation", *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, **113**, 52 (1953).
- [14] CASE, K.M. and ZWEIFEL, P.F., "Linear Transport Theory", Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, (1967).
- [15] CASSEL, J.S. and WILLIAMS, M.M.R., "An Exact Solution of the Temperature Slip Problem in Rarefied Gases", *Transport Theory and Stat. Phys.*, **2**, 81 (1972).
- [16] CERCIGNANI, C., "Mathematical Methods in Kinetic Theory", 2nd Edition, Plenum Press, New York, (1990).
- [17] CERCIGNANI, C., "Plane Poiseuille Flow According to the Method of Elementary Solutions", *J. Math. Anal. Appl.*, **12**, 254 (1965).
- [18] CHALHOUB, E.S. and GARCIA, R.D.M., "The Equivalence Between Two Techniques of Angular Interpolation for the Discrete Ordinates Method", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **64**, 517 (2000).
- [19] CHANDRASEKHAR, S., "Radiative Transfer", Oxford University Press, London (1960).

- [20] 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).
- [21] GOLUB, G.H. and VAN LOAN, C.F., "Matrix Computations", Johns Hopkins University Press, Baltimore, (1989).
- [22] LOYALKA, S.K. and FERZIGER, J.H., "Model Dependence of the Slip Coefficient", *Phys. Fluids*, **10**, 1833 (1967).
- [23] LOYALKA, S.K. and FERZIGER, J.H., "Model Dependence of the Temperature Slip Coefficient", *Phys. Fluids*, **11**, 1668 (1968).
- [24] MEYER, C.D. , "Matrix Analysis and Applied Linear Algebra", Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM, Philadelphia, PA, (2000).
- [25] SHARIPOV, F., "Non-Isothermal Gas Flow Through Rectangular Microchannels", *J. Micromech. Microeng.*, **9**, 394 (1999).
- [26] SHARIPOV, F. and SELEZNEV, V., "Data On Internal Rarefied Gas Flow", *Journal of Phys. Chem.*, **27**, 657 (1998).
- [27] SIEWERT, C.E., "Poiseuille and Thermal-Creep Flow in a Cylindrical Tube", *J. Comput. Phys.*, **160**, 470 (2000).
- [28] SIEWERT, C.E., "Couette Flow for a Binary Gas Mixture", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, em impressão.

- [29] SIEWERT, C.E. and WRIGHT, S.J., "Efficient Eigenvalue Calculations in Radiative Transfer", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, (1998). Veja também o site <http://www.mcs.anl.gov/wright/dzpack/>
- [30] 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-Verlang*, Berlin (1976).
- [31] WELANDER, P., "On the Temperature Jump in a Rarefied Gas", *Arkiv för Fysik*, **7**, 507 (1954).
- [32] WILLIAMS, M. M. R., "Mathematical Methods in Particle Transport Theory", Butterworth, London (1971).
- [33] 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. (ZAMP)*, em impressão.

8 ANEXO

8.1 Um estudo dos autovalores de $\mathbf{D} + \alpha\mathbf{v}\mathbf{v}^T$

No capítulo 4, utilizamos um problema de autovalores cuja matriz tem a forma $\mathbf{D} - 2\mathbf{z}\mathbf{z}^T$, onde \mathbf{D} e \mathbf{z} estão definidos conforme equações (4.40) e (4.45) respectivamente. Algumas propriedades relativas à esse tipo de problema devem ser enfatizadas.

Conforme podemos ver, por exemplo, em [24], os autovalores têm um comportamento especial, ocorrendo um entrelaçamento entre os autovalores de \mathbf{D} e os autovalores de $\mathbf{D} + \alpha\mathbf{v}\mathbf{v}^T$, ajudando na localização dos autovalores de $\mathbf{D} + \alpha\mathbf{v}\mathbf{v}^T$. Na verdade, é possível mostrar [24] que, se α é real e não nulo, então os valores da matriz \mathbf{D} não são autovalores da matriz $\mathbf{D} + \alpha\mathbf{v}\mathbf{v}^T$ e ainda, os autovalores de $\mathbf{D} + \alpha\mathbf{v}\mathbf{v}^T$ são as soluções da equação secular $f(\xi) = 0$ definida por

$$f(\xi) = 1 + \alpha \sum_{i=1}^n \frac{v_i^2}{\lambda_i - \xi}, \quad (8.1)$$

onde λ_i são as componentes da matriz \mathbf{D} . Todos esses fatos contribuem na determinação dos autovalores de $\mathbf{D} + \alpha\mathbf{v}\mathbf{v}^T$.

Outro ponto importante nas considerações de Meyer [24] é o fato de que os autovetores possuem uma forma especial, descrita como $(\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v}$, a qual está associada com o autovalor ξ_i . Para mostrarmos tal situação, partimos do fato de que $f(\xi_i) = 1 + \alpha \mathbf{v}^T (\mathbf{D} - \xi_i \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v} = 0$ para escrever

$$(\mathbf{D} + \alpha\mathbf{v}\mathbf{v}^T)(\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v} = \mathbf{D}(\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v} + \mathbf{v}(\alpha\mathbf{v}^T (\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v}) \quad (8.2)$$

e assim

$$(\mathbf{D} + \alpha \mathbf{v}\mathbf{v}^T)(\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v} = \mathbf{D}(\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v} - \mathbf{v}. \quad (8.3)$$

Podemos ainda observar que

$$(\mathbf{D} + \alpha \mathbf{v}\mathbf{v}^T)(\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v} = (\mathbf{D} - (\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I}))(\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v}, \quad (8.4)$$

logo

$$(\mathbf{D} + \alpha \mathbf{v}\mathbf{v}^T)(\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v} = \xi_I (\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v}. \quad (8.5)$$

Concluimos então que a forma especial $(\mathbf{D} - \xi_I \mathbf{I})^{-1} \mathbf{v}$ é um autovetor de $\mathbf{D} + \alpha \mathbf{v}\mathbf{v}^T$ associado a ξ_i .



Impressão: Gráfica UFRGS
Rua Ramiro Barcelos, 2705 - 1º andar
Fone: 316 5088 Fax: 316 5083 - Porto Alegre - RS
E-mail: grafica@vortex.ufrgs.br