

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

**Modelos Cinéticos da Equação  
Linearizada de Boltzmann e um  
Problema de Transferência de  
Calor em Microescala**

por

Caio Sarmiento Scherer

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

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello  
Orientadora

Porto Alegre, Janeiro de 2005.

**CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO**

Scherer, Caio Sarmento

Modelos Cinéticos da Equação Linearizada de Boltzmann e um Problema de Transferência de Calor em Microescala / Caio Sarmento Scherer.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2005.

78 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2005.

Orientadora: Barichello, Liliane Basso

Dissertação: Matemática Aplicada

Transferência de calor, Microfluidos, Equação linearizada de Boltzmann

# **Modelos Cinéticos da Equação Linearizada de Boltzmann e um Problema de Transferência de Calor em Microescala**

por

**Caio Sarmiento Scherer**

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. Fernando Carvalho da Silva  
PEN/COPPE/UFRJ

Prof. Dr. Roberto David Martinez Garcia  
IEAv/CTA

Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha  
PPGMAp/IM/UFRGS

Profa. Dra. Vanilde Bisognin  
UNIFRA

Dissertação apresentada e aprovada em  
13 de Janeiro de 2005.

Profa. Dra. Maria Cristina Varriale  
Coordenadora

## AGRADECIMENTO

Sempre que concluímos uma etapa em nossas vidas devemos lembrar que além do nosso esforço, dedicação, trabalho e perseverança, outras pessoas também contribuíram de forma decisiva para que o objetivo final fosse alcançado. Por isso, nesse momento não se pode deixar de lembrar dessas pessoas e agradecer pela sua ajuda.

Dessa maneira, agradeço aos meus pais Marcelo e Verginia que durante toda a minha vida me deram oportunidade para estudar e incentivo para superar as dificuldades quando elas apareceram.

À minha professora orientadora Liliane Barichello, que além de um excelente acompanhamento na elaboração desse trabalho, me ensinou a acreditar que problemas "aparentemente sem solução" podem ser resolvidos com mais algumas horas, ou dias, de trabalho.

Aos pesquisadores Charles Edward Siewert e Roberto Garcia por importantes contribuições com relação ao trabalho.

Aos meus professores de graduação na Unisinos: Cassol, Rogério e Cláudio, que me mostraram que a matemática, mais do que uma área de pesquisa, é uma ciência fascinante.

Ao CNPq pela bolsa de estudos.

E a todos os amigos, colegas e familiares que de uma forma ou de outra me ajudaram a completar essa jornada.

## SUMÁRIO

<b>LISTA DE FIGURAS</b> . . . . .	<b>7</b>
<b>LISTA DE TABELAS</b> . . . . .	<b>8</b>
<b>LISTA DE SÍMBOLOS</b> . . . . .	<b>10</b>
<b>RESUMO</b> . . . . .	<b>11</b>
<b>ABSTRACT</b> . . . . .	<b>12</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>13</b>
<b>2 EQUAÇÕES MODELO</b> . . . . .	<b>19</b>
2.1 Interação de partículas no modelo de esferas rígidas . . . . .	20
2.2 Livre caminho médio . . . . .	22
2.3 Núcleos sintéticos . . . . .	23
2.4 Os modelos BGK, S e Gross-Jackson . . . . .	24
<b>3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA</b> . . . . .	<b>28</b>
3.1 Definição do problema . . . . .	28
3.2 Formulação vetorial do problema . . . . .	30
3.3 A questão da unicidade . . . . .	32
<b>4 SOLUÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS</b> . . . . .	<b>34</b>
<b>5 RESULTADOS NUMÉRICOS</b> . . . . .	<b>43</b>
5.1 Considerações gerais . . . . .	43
5.2 Resultados da solução em ordenadas discretas . . . . .	43
<b>6 CONCLUSÃO</b> . . . . .	<b>63</b>
<b>BIBLIOGRAFIA</b> . . . . .	<b>65</b>

<b>ANEXO A</b>	<b>O PROCEDIMENTO DE GROSS-JACKSON . . . . .</b>	<b>71</b>
<b>A.1</b>	<b>Propriedades do operador de Boltzmann . . . . .</b>	<b>71</b>
<b>A.2</b>	<b>Construção de modelos cinéticos . . . . .</b>	<b>75</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 5.1	Densidade $N(\tau) \times$ largura do canal. . . . .	56
Figura 5.2	Temperatura $T(\tau) \times$ largura do canal. . . . .	57
Figura 5.3	Densidade $N(\tau)$ : efeito das temperaturas das paredes. . . . .	58
Figura 5.4	Temperatura $T(\tau)$ : efeito das temperaturas das paredes. . . . .	59
Figura 5.5	Densidade $N(\tau)$ : efeito dos coeficientes de acomodação. . . . .	60
Figura 5.6	Temperatura $T(\tau)$ : efeito dos coeficientes de acomodação. . . . .	61

## LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1	Perturbação da densidade $N(\tau)$ com $2a = 2.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	45
Tabela 5.2	Perturbação da densidade $N(\tau)$ com $2a = 2.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	46
Tabela 5.3	Perturbação da temperatura $T(\tau)$ com $2a = 2.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	46
Tabela 5.4	Perturbação da temperatura $T(\tau)$ com $2a = 2.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	47
Tabela 5.5	Perturbação da densidade $N(\tau)$ com $2a = 5.0$ , $\alpha_1 = 1.0$ , $\alpha_2 = 0.5$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	47
Tabela 5.6	Perturbação da densidade $N(\tau)$ com $2a = 5.0$ , $\alpha_1 = 1.0$ , $\alpha_2 = 0.5$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	48
Tabela 5.7	Perturbação da temperatura $T(\tau)$ com $2a = 5.0$ , $\alpha_1 = 1.0$ , $\alpha_2 = 0.5$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	48
Tabela 5.8	Perturbação da temperatura $T(\tau)$ com $2a = 5.0$ , $\alpha_1 = 1.0$ , $\alpha_2 = 0.5$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	49
Tabela 5.9	Fluxo de calor normalizado $q$ com $2a = 2.0$ e $2a = 5.0$ . . . . .	49
Tabela 5.10	Perturbação da densidade $N(\tau)$ com $2a = 1.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	51
Tabela 5.11	Perturbação da densidade $N(\tau)$ com $2a = 1.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	51
Tabela 5.12	Perturbação da temperatura $T(\tau)$ com $2a = 1.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	52
Tabela 5.13	Perturbação da temperatura $T(\tau)$ com $2a = 1.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 1.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	52
Tabela 5.14	Perturbação da densidade $N(\tau)$ com $2a = 1.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 2.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	53
Tabela 5.15	Perturbação da densidade $N(\tau)$ com $2a = 1.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 2.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	53
Tabela 5.16	Perturbação da temperatura $T(\tau)$ com $2a = 1.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 2.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_p$ . . . . .	54



Tabela 5.17	Perturbação da temperatura $T(\tau)$ com $2a = 1.0$ , $\alpha_1 = 0.7$ , $\alpha_2 = 0.3$ , $\delta_1 = 2.0$ , $\delta_2 = -1.0$ e $\varepsilon = \varepsilon_t$ . . . . .	54
Tabela 5.18	Fluxo de calor normalizado $q$ com $2a = 1.0$ . . . . .	55
Tabela A.1	Autovalores do operador de colisão de Maxwell . . . . .	78

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\mathbf{c}$	Vetor velocidade
$f_0(c)$	Distribuição Maxwelliana absoluta
$F(\mathbf{c}', \mathbf{c})$	Núcleo sintético de espalhamento
$f_n(c', c)$	Componentes do núcleo sintético de espalhamento
$h(x, \mathbf{c})$	Perturbação causada à distribuição Maxwelliana absoluta
$J_M$	Operador de colisão Maxwelliano
$k$	Constante de Boltzmann
$Kn$	Número de Knudsen
$K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$	Núcleo exato de espalhamento
$k_n(c', c)$	Componentes do núcleo exato de espalhamento
$l$	Livre caminho médio
$L$	Operador de colisão da equação linearizada de Boltzmann
$L_n^l$	Polinômio de Laguerre-Sonine
$N(\tau)$	Perturbação da densidade
$P_n$	Polinômio de Legendre
$P_n^m$	Função normalizada de Legendre
$Pr$	Número de Prandtl
$Q_x$	Fluxo de calor
$q$	Fluxo de calor normalizado
$T(\tau)$	Perturbação da temperatura
$Y_l^m$	Harmônicos esféricos
$\nu_j$	Constante de separação
$\nu(c)$	Frequência de colisão
$\xi_k$	Ponto de quadratura
$\omega_k$	Peso de quadratura
$\alpha$	Coefficiente de acomodação
$T_w$	Temperatura da parede
$\lambda_*$	Condutividade térmica
$\mu_*$	Viscosidade
$a_*$	Comprimento característico

### Lista de abreviaturas

ADO	Método analítico de ordenadas discretas
ELB	Equação linearizada de Boltzmann
MEMS	Sistemas microeletromecânicos

## RESUMO

Neste trabalho, um problema de transferência de calor da dinâmica de gases rarefeitos, causado pela diferença de temperaturas nas superfícies de um canal, é abordado. O problema é formulado através dos modelos cinéticos **BGK**, **S** e **Gross-Jackson** da equação linearizada de Boltzmann e resolvido, de forma unificada, pelo método analítico de ordenadas discretas (método ADO). Resultados numéricos para as perturbações de densidade e temperatura e também para o fluxo de calor são apresentados e comparados, mostrando que não se pode dizer que algum dos três modelos seja uma melhor aproximação da solução aos resultados da equação linearizada de Boltzmann.

## **ABSTRACT**

In this work, a heat transfer problem in the rarefied gas dynamics field, in a plane channel, is studied. In particular, the flow is induced by different temperatures at the wall surfaces. The formulation of the problem is based in an "unified" kinetic equation which includes the BGK model, the S-model and the Gross-Jackson model of the linearized Boltzmann equation. An analytical version of the discrete-ordinates method (the ADO method) is used to develop the solution and to evaluate the density, temperature and heat-flow profiles. Numerical results are presented and used to establish comparisons with the linearized Boltzmann equation results. It is shown that, for an analysis based in all cases, it is not possible to say that one of the models is a better approximation of the solution of the linearized Boltzmann equation.

# 1 INTRODUÇÃO

Sistemas microeletromecânicos (MEMS) são estruturas mecânicas com dimensões menores que 1mm e maiores que  $1\mu\text{m}$  [32]. No interior dessas pequenas máquinas existem microcanais contendo fluidos, que então são chamados de microfluidos. Segundo Karniadakis e Beskok [25], os primeiros estudos nessa área datam de meados do século XIX quando Poiseuille começou a estudar fluidos em tubos com diâmetro de  $30\mu\text{m}$  a  $150\mu\text{m}$ . Ele teria estudado as relações entre fluxo de massa, pressão e geometria dos tubos. Mais tarde, já no início do século XX, Knudsen estudou o comportamento de gases dentro de capilares. Ainda segundo Karniadakis e Beskok [25], o primeiro experimento com fluido em microcanal foi feito num trabalho com hidrogênio em um canal com  $4\mu\text{m}$  de largura. Os primeiros estudos com MEMS surgiram na década de 1980 em pesquisas com micromáquinas. Como exemplos, podem ser citados [25] pequenos acelerômetros usados para ativar sistemas de airbag em automóveis, sensores de pressão do tamanho da cabeça de um alfinete usados na extremidade de cateteres, microbombas, microválvulas, discos rígidos do tipo Winchester para computadores onde, nesse caso, a cabeça leitora flutua cerca de 50 nm acima do disco e o espaço é ocupado por um fluido.

Para um bom funcionamento dos MEMS tornou-se necessário conhecer detalhes de uma física não familiar e de um processo dinâmico complexo envolvidos no funcionamento de micromáquinas. A dinâmica dos fluidos e a interação com as superfícies em sistemas pequenos é muito diferente que em sistemas grandes. Nessa dinâmica, o material da superfície e sua rugosidade são muito mais importantes que em geometrias grandes [25].

Um parâmetro adimensional para caracterizar fluidos gasosos é o número de Knudsen, definido como a razão entre o livre caminho médio  $l$  (distância percorrida por uma partícula sem sofrer colisão) e um comprimento característico  $a_*$  [25],

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

De acordo com Karniadakis e Beskok [25], dependendo do intervalo de variação do número de Knudsen, são definidos quatro regimes para um gás:

- Contínuo: para  $Kn < 0.01$ ;
- "Slip-flow": para  $0.01 < Kn < 0.1$ ;
- Transição: para  $0.1 < Kn < 10$ ;
- Moléculas livres: para  $Kn > 10$ .

Os efeitos de rarefação começam a se tornar importantes com o crescimento do número de Knudsen, que claramente pode estar associado a um alto valor para o livre caminho médio, bem como ao fato de que o fluxo seja em um microcanal. Isso justifica por que aplicações em nanotecnologia e em micromáquinas são um campo de aplicação da dinâmica de gases rarefeitos, assim como as clássicas aplicações nas áreas de equipamentos de vácuo [44] e aeroespacial [19].

No que diz respeito à modelagem dos fenômenos associados à dinâmica de gases rarefeitos, no regime contínuo são válidas as equações de Navier Stokes. Já no regime "slip-flow", essas equações são usadas mas é necessário também considerar condições de contorno do tipo escorregamento ("slip") na descrição do fluxo de um gás. Essas condições de contorno incluem efeitos de rarefação presentes já nesse regime, tais como o salto de temperatura, o "creep" térmico, a velocidade de escorregamento e os coeficientes de acomodação das superfícies [25]. No regime de transição as equações de Navier Stokes não se aplicam mais [44] e o comportamento do gás pode ser modelado pela equação de Boltzmann. Ainda, como já foi mencionado, no regime de transição cresce a importância dos efeitos de rarefação e de interação do gás com a superfície. Para melhor descrever essa interação, define-se os coeficientes de acomodação térmica e de momento tangencial, que descrevem, respectivamente, como ocorre a troca de calor entre o fluido e a superfície e como é a reflexão de uma molécula de gás que incide no contorno [25]. No regime de moléculas livres, soluções analíticas associadas à distribuição de equilíbrio são conhecidas [44].

Ainda na modelagem de fluidos, é importante destacar que a equação de Boltzmann também pode ser usada no regime contínuo. Na verdade, Williams [50] apresenta uma derivação das equações de Navier Stokes a partir da equação de Boltzmann. Uma diferença básica entre essas duas equações [50] é que nas equações de Navier Stokes as incógnitas são as propriedades físicas do fluido, como densidade, temperatura e pressão, enquanto que na equação de Boltzmann, a variável é a função de distribuição de partículas, que deve ser integrada para que se conheça as características do fluido.

Neste trabalho, busca-se resolver um problema de transferência de calor associado ao comportamento de um gás contido num canal plano e no regime de transição, cuja perturbação do estado de equilíbrio é causada por temperaturas diferentes nas paredes do canal [49, 50]. Este é um problema clássico da dinâmica de gases rarefeitos que também se associa ao contexto de microfluidos. Na verdade, além do problema de transferência de calor mencionado, no estudo de efeitos térmicos associados à descrição do fluxo de um gás rarefeito vários aspectos são de interesse e vem sendo investigados ao longo dos anos, como, por exemplo: o chamado problema do salto de temperatura [48] determinado por um gradiente de temperatura normal à superfície do canal, no qual se busca avaliar a diferença existente entre a temperatura da parede e a temperatura do gás próximo à parede, determinando inclusive um coeficiente que é utilizado nas condições de contorno dos problemas em regime de "slip-flow" para caracterizar este fenômeno; os problemas de deslizamento térmico e "creep" térmico [49], caracterizados por efeitos de gradientes de temperatura tangenciais às paredes do canal; e ainda fluxos induzidos por descontinuidades de temperatura [25] ou diferenças de temperaturas nas superfícies do domínio de interesse. Vários trabalhos estão disponíveis na literatura referentes ao estudo destes problemas, tais como: Sharipov e Seleznev [44], Welander [48], Thomas Jr. et al. [46], Loyalka et al. [28], Cercignani [13], Siewert [40], Struchtrup [45], Frankowski et al. [20] e Bassanini et al. [6, 7].

Como considera-se o gás no regime de transição, o problema de transferência de calor é modelado pela equação linearizada de Boltzmann (ELB). Essa equação possui uma complicada estrutura no seu termo de colisão e uma estratégia que vem sendo

proposta ao longo dos anos é substituir o seu núcleo de colisão por uma expressão mais simples, dando origem a um modelo cinético ou a uma equação modelo [14]. A derivação e solução de equações modelo na dinâmica de gases rarefeitos tem sido um aspecto de interesse na investigação científica recente. Apesar destes aspectos não serem explorados em detalhes neste trabalho, as Refs. [2, 10, 21] podem ser mencionadas.

Neste trabalho, para descrever o processo de colisão entre as partículas do gás no problema mencionado, foram escolhidos os modelos, onde a frequência de colisão é considerada constante, **BGK** [8, 48], **S** [37, 42, 44] e **Gross-Jackson** [21, 24]. Este último trata de uma aproximação do modelo de interação de moléculas do tipo Maxwell na forma associada à colisões do tipo esferas rígidas [50]. Seguindo uma formulação proposta por Garcia e Siewert [21], pretende-se estabelecer um tratamento unificado para estes três modelos, uma vez que, mediante a escolha apropriada de certos parâmetros, os mesmos podem ser descritos através de uma expressão geral.

Para o tratamento e solução das equações cinéticas será usado o método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO: Analytical Discrete Ordinates). Esse método foi proposto por Barichello e Siewert [1], inicialmente associado à problemas de transferência radiativa, e é uma versão do método original de ordenadas discretas proposto por Chandrasekhar [15], o qual tem como base a aproximação da integral do termo de espalhamento da equação de transporte por uma quadratura numérica. O método ADO difere do método original basicamente pelo uso de um esquema de quadratura arbitrário e pela determinação das constantes de separação através da resolução de um problema de autovalor. Uma grande vantagem desse método se mostra no uso de um esquema de quadratura "half-range", que trata da singularidade natural do problema no contorno e implica em um ganho de precisão na discretização em relação à esquemas clássicos de quadratura.

Vários trabalhos já foram desenvolvidos com o objetivo de resolver problemas da dinâmica de gases rarefeitos com o método ADO. Na resolução dos problemas de Poiseuille, "Creep" térmico, Couette, Kramers e Deslizamento térmico, pode-se destacar



- Barichello et al. [5], onde usa-se o modelo **BGK**;
- Siewert [40], onde é usado o modelo **CES**;
- Cabrera e Barichello [9], onde usa-se o modelo **S**;
- Camargo e Barichello [11], onde é usado o modelo **CLF**.

Em relação aos problemas de transferência de calor e do salto de temperatura, pode-se citar

- Siewert [36] e Barichello e Siewert [3], onde usa-se o modelo **BGK**;
- Barichello et al. [4], onde é usado o modelo **CLF**;
- Siewert [38], onde usa-se a ELB.

Ainda há os trabalhos onde foram resolvidos problemas em misturas de gases baseados no modelo **McCormack** [29], como

- Garcia e Siewert [23], que trata do problema de Couette;
- Siewert e Valougeorgis [34], onde os problemas de Kramers e Deslizamento térmico são abordados;
- Siewert e Valougeorgis [35], que aborda os problemas de Poiseuille e "Creep" térmico;
- Siewert [41], que trata do problema do salto de temperatura;
- Garcia e Siewert [22], onde é tratado o problema de transferência de calor.

De forma geral, pode-se dizer que o método ADO tem sido usado na tentativa de estabelecer soluções "unificadas" (baseadas na mesma metodologia de caráter analítico) para uma classe ampla de problemas da dinâmica de gases rarefeitos, partindo de diferentes equações modelo e mesmo da ELB. Como objetivo final, acredita-se que

esta seja uma ferramenta importante em uma análise entre aspectos como modelagem  $\times$  precisão  $\times$  esforços computacionais para os diferentes problemas. Neste sentido, o problema de transferência de calor é abordado, neste trabalho, segundo o método ADO, com os modelos **S** e **Gross-Jackson**, para os quais ainda não se tinha resultados na literatura, buscando, entre outros aspectos, estabelecer comparações com resultados existentes para o modelo **BGK** e ELB. Além disso, no que diz respeito ao modelo **S**, a partir de uma solução diferenciada, os resultados aqui obtidos devem verificar o caso especial de uma espécie de gás, ao qual se restringe o problema de mistura binária de gases a partir do modelo **McCormack** [22].

Dessa forma, no capítulo 2 os modelos de colisão são apresentados dentro de contexto de colisões do tipo esferas rígidas. A formulação matemática do problema de transferência de calor com os modelos cinéticos é apresentada no capítulo 3. No capítulo 4 é construída a solução em ordenadas discretas e no capítulo 5 são apresentados e comentados alguns resultados numéricos.

## 2 EQUAÇÕES MODELO

Segundo Cercignani [14], um dos maiores problemas encontrados ao se trabalhar com a equação de Boltzmann é a complicada estrutura da sua integral de colisão. Por essa razão, não é surpresa que uma alternativa proposta para contornar esse problema seja substituir o termo de colisão por expressões mais simples. Essas expressões são chamadas de modelos de colisão, e uma equação simplificada de Boltzmann, onde a integral de colisão é substituída por um modelo de colisão, é chamada de equação modelo ou modelo cinético.

Inicia-se a abordagem das equações modelo seguindo a Ref. [2] e escreve-se a ELB como

$$c\mu\frac{\partial}{\partial x}h(x, \mathbf{c}) = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} L\{h\}(x, \mathbf{c}), \quad (2.1)$$

onde  $c(2kT_0/m)^{1/2}$  é a magnitude da velocidade das partículas,  $x$  é a variável espacial (medida em cm),  $n_0$  e  $\sigma_0$  são respectivamente a densidade e o diâmetro de colisão das partículas,  $m$  é a massa,  $k$  é a constante de Boltzmann,  $T_0$  é a temperatura de referência e  $h(x, \mathbf{c})$  define uma perturbação causada à distribuição Maxwelliana absoluta. O processo de colisão é descrito por

$$L\{h\}(x, \mathbf{c}) = -\nu(c)h(x, \mathbf{c}) + \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} h(x, \mathbf{c}') K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) c'^2 d\chi' d\mu' dc', \quad (2.2)$$

onde são usadas coordenadas esféricas  $(c, \arccos\mu, \chi)$  para definir o vetor velocidade  $\mathbf{c}$ ,  $\nu(c)$  é a frequência de colisão e  $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  é o núcleo de espalhamento. Nota-se que a função  $h(x, \mathbf{c})$  que se deseja encontrar é uma perturbação da função distribuição de partículas, a qual pode ser escrita como

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

onde

$$f_0(c) = n_0 \pi^{-3/2} e^{-c^2}. \quad (2.4)$$

Segundo Siewert e Sharipov [33], diversos trabalhos têm sido escritos com o objetivo de desenvolver equações modelo na dinâmica de gases rarefeitos. Porém, para

que se possa comparar de maneira consistente os resultados de diferentes aproximações da ELB, é necessário seguir uma metodologia que permita tratar os modelos cinéticos de uma mesma forma. Essa metodologia deve incluir uma maneira de definir livre caminho médio e frequência de colisão aplicável à cada modelo cinético, pois esses dados serão fundamentais na resolução de problemas, como será visto ao longo do trabalho. Se for usada a hipótese de colisão de partículas como esferas rígidas, Barichello e Siewert [2] apresentam um método sistemático para construir aproximações do núcleo exato de colisão, chamadas de núcleos sintéticos, e também para definir livre caminho médio e frequência de colisão para cada modelo. Alguns destes modelos serão apresentados neste capítulo.

## 2.1 Interação de partículas no modelo de esferas rígidas

Segundo Pekeris e Alterman [31], escreve-se o núcleo de espalhamento para esferas rígidas como

$$K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (2n+1)(2 - \delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) k_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi), \quad (2.5)$$

onde  $P_n^m(\mu)$  são as funções normalizadas de Legendre

$$P_n^m(\mu) = \left[ \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right]^{1/2} (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_n(\mu), \quad n \geq m \quad (2.6)$$

e  $P_n(\mu)$  são os polinômios de Legendre. Os elementos básicos  $k_n(c', c)$  foram avaliados em princípio por Pekeris e Alterman [31] para  $n = 1$  e  $2$ , e depois por Loyalka e Hickey [27] para os casos  $n = 0$  e  $3$ . Barichello e Siewert [2] apresentam esses elementos para os mesmos valores de  $n$ . Notando que  $k_n(c', c) = k_n(c, c')$ , tem-se para  $c' < c$

$$-(1/2)c'ck_0(c', c) = (2/3)c^3 + 2c'c^2 - 4P(c'), \quad (2.7)$$

$$-(1/2)c'^2c^2k_1(c', c) = (2/15)c^5 - 4c' - (2/3)c^3c^2 - 4(c'^2 - 1)P(c'), \quad (2.8)$$

$$-(1/2)c'^3c^3k_2(c', c) = a_2(c', c) + b_2(c', c)P(c') \quad (2.9)$$

e

$$-(1/2)c'^4c^4k_3(c', c) = a_3(c', c) + b_3(c', c)P(c'), \quad (2.10)$$

onde

$$a_2(c', c) = (2/35)c'^7 - 3c'^3 + 18c' - [(2/15)c'^5 - 3c'] c^2, \quad (2.11)$$

$$b_2(c', c) = -6c'^4 + 15c'^2 - 18 + [2c'^2 - 3] c^2, \quad (2.12)$$

$$a_3(c', c) = (2/63)c'^9 - 5c'^5 + 20c'^3 - 150c' - [(2/35)c'^7 - c'^3 + 30c'] c^2, \quad (2.13)$$

$$b_3(c', c) = -10c'^6 + 45c'^4 - 120c'^2 + 150 + [6c'^4 - 21c'^2 + 30] c^2 \quad (2.14)$$

e

$$P(c) = e^{c^2} \int_0^c e^{-x^2} dx. \quad (2.15)$$

Ainda seguindo [2], para que haja conservação de massa, momento e energia, o núcleo de espalhamento  $K(c', c)$  na Eq. (2.2) deve satisfazer

$$\nu(c)\mathbf{S}(c, \mu, \chi) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} \mathbf{S}(c', \mu', \chi') K(c', c) c'^2 d\chi' d\mu' dc', \quad (2.16)$$

onde

$$\mathbf{S}(c, \mu, \chi) = \begin{bmatrix} 1 \\ c\mu \\ c(1 - \mu^2)^{1/2} \cos\chi \\ c(1 - \mu^2)^{1/2} \text{sen}\chi \\ c^2 \end{bmatrix}. \quad (2.17)$$

Usando as Eqs. (2.5) e (2.16) obtém-se que a frequência de colisão  $\nu(c)$  deve satisfazer as condições

$$\nu(c) = \int_0^\infty e^{-c'^2} k_0(c', c) c'^2 dc', \quad (2.18)$$

$$\nu(c)c = \int_0^\infty e^{-c'^2} k_1(c', c) c'^3 dc' \quad (2.19)$$

e

$$\nu(c)c^2 = \int_0^\infty e^{-c'^2} k_0(c', c) c'^4 dc'. \quad (2.20)$$

Aplicando as Eqs. (2.7) e (2.8) nas Eqs. (2.18) a (2.20), encontra-se para a frequência de colisão, no caso de esferas rígidas, a expressão

$$\nu(c) = \frac{2c^2 + 1}{c} \int_0^c e^{-x^2} dx + e^{-c^2}. \quad (2.21)$$

## 2.2 Livre caminho médio

Antes de tratar-se especificamente das possíveis aproximações da Eq. (2.2), será abordada a questão da adimensionalização da Eq. (2.1). Para tornar a ELB adimensional, usa-se o livre caminho médio  $l$ , que é a distância percorrida por uma partícula sem sofrer colisão. Introduzindo a variável adimensional  $\tau = x/l$ , reescreve-se a Eq. (2.1) como [2]

$$c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon L \{h\}(\tau, \mathbf{c}), \quad (2.22)$$

onde

$$\varepsilon = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} l. \quad (2.23)$$

Nota-se que o livre caminho médio será ainda determinado. Na literatura, encontra-se que a determinação do livre caminho médio pode ser feita em termos da viscosidade ou da condutividade térmica. Para o problema de Poiseuille, Loyalka e Hickey [27] expressam o livre caminho médio para esferas rígidas em termos da viscosidade  $\mu_*$  como

$$l = l_p = (\mu_*/p_0)(2kT_0/m)^{1/2}, \quad (2.24)$$

onde  $p_0 = n_0 kT_0$  é a pressão. Utilizando a definição da viscosidade dada por Pekeris e Alterman [31]

$$\mu_* = \frac{8(2mkT_0)^{1/2}}{15\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2} b(c) c^6 dc, \quad (2.25)$$

obtém-se a partir da Eq. (2.23)

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

onde  $b(c)$  é definida como solução da equação integral de Chapman-Enskog para a viscosidade [2, 50]

$$\nu(c) c^2 b(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2} b(c') k_2(c', c) c'^4 dc' = c^2. \quad (2.27)$$

Em termos da condutividade térmica, Loyalka e Ferziger [26] usam para o problema do salto de temperatura um livre caminho médio dado por

$$l = l_t = [4\lambda_*/(5n_0k)] [m/(2kT_0)]^{1/2}, \quad (2.28)$$

onde  $\lambda_*$  é a condutividade térmica dada pela Ref. [31]

$$\lambda_* = \frac{4k(2kT_0/m)^{1/2}}{3\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 dc, \quad (2.29)$$

e  $a(c)$  satisfaz a equação integral de Chapman-Enskog para a condutividade térmica [2, 50]

$$\nu(c)ca(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2} a(c')k_1(c', c)c'^3 dc' = c(c^2 - 5/2) \quad (2.30)$$

e a condição de normalização

$$\int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^4 dc = 0. \quad (2.31)$$

Usando as Eqs. (2.28) e (2.29) na Eq. (2.23), encontra-se

$$\varepsilon = \varepsilon_t = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 dc. \quad (2.32)$$

Mais adiante nesse trabalho, as expressões para  $\varepsilon$  dadas pelas Eqs. (2.26) e (2.32) serão usadas na adimensionalização do problema de transferência de calor. Ainda, os valores de  $\varepsilon_p$  e  $\varepsilon_t$  dados pelas Eqs. (2.26) e (2.32) serão determinados segundo cada modelo cinético e serão importantes para gerar resultados numéricos.

## 2.3 Núcleos sintéticos

Os núcleos sintéticos têm a finalidade de simplificar o tratamento do núcleo de espalhamento da ELB do ponto de vista analítico e numérico. Uma simplificação do núcleo de espalhamento não depende somente de um truncamento da expansão do núcleo exato  $K(c', c)$ , pois mesmo para poucos termos ainda existe dificuldade do ponto de vista numérico [2]. Essa dificuldade acontece basicamente porque as funções  $k_n(c', c)$  têm derivadas descontínuas em  $c' = c$  mesmo para valores pequenos de  $n$ . Por essas razões, outras abordagens têm sido propostas na teoria cinética. Essas abordagens buscam simplificar a expansão do núcleo de espalhamento, mantendo as suas características e, por isso, se enquadram no conceito de equações modelo. Ao longo dos anos, vários modelos foram propostos neste sentido, tais como os modelos **BGK** [8], **S** [42, 44] e **Gross-Jackson** [24], onde considera-se frequência de colisão constante, os modelos **CLF** [39, 50], **CES** [2] e

**CEBS** [2], que se caracterizam por considerar frequência de colisão variável, ou ainda o modelo **McCormack** [29], o qual aplica-se para o caso de uma mistura de dois gases. Para construir um núcleo sintético a partir da Eq. (2.5), inicialmente trunca-se o somatório e reescreve-se essa equação como

$$F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n (2n+1)(2-\delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) f_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi), \quad (2.33)$$

onde, ao invés de usar as componentes exatas  $k_n(c', c)$ , serão usadas aproximações sintéticas  $f_n(c', c)$  para  $n \leq N$ . Assim, escreve-se a ELB adimensionalizada e aproximada pelo núcleo sintético  $F(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  como

$$c\mu \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c}), \quad (2.34)$$

onde

$$L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c}) = -\nu(c)h(\tau, \mathbf{c}) + \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) c'^2 d\chi' d\mu' dc' \quad (2.35)$$

e  $F(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  é dado pela Eq. (2.33). Como o núcleo sintético deve manter as características do núcleo exato, as Eqs. (2.18) a (2.20), (2.27), (2.30) e (2.31) devem ser satisfeitas também pelas componentes  $f_0(c', c)$ ,  $f_1(c', c)$  e  $f_2(c', c)$ , que substituem as componentes exatas  $k_0(c', c)$ ,  $k_1(c', c)$  e  $k_2(c', c)$ , respectivamente. A determinação das componentes  $f_n(c', c)$  para cada modelo abordado neste trabalho será discutida na próxima seção.

## 2.4 Os modelos BGK, S e Gross-Jackson

Após ter apresentado as Eqs. (2.34) e (2.35), que serão usadas na construção de equações modelo para a ELB, bem como as expressões necessárias para definir as funções de Chapman-Enskog e também os valores de  $\varepsilon$  em termos dessas funções, segue-se agora o desenvolvimento matemático dos modelos **BGK**, **S** e **Gross-Jackson** baseados no contexto de esferas rígidas. Seguindo Cabrera [10] e usando as relações entre coordenadas esféricas e cartesianas

$$c_x = c\mu, \quad c_y = c(1 - \mu^2)^{1/2} \text{sen}\chi, \quad c_z = c(1 - \mu^2)^{1/2} \text{cos}\chi, \quad (2.36)$$



escreve-se o vetor velocidade  $\mathbf{c}$  com componentes retangulares  $(c_x, c_y, c_z)$ . Então a ELB pode ser escrita como

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c}), \quad (2.37)$$

onde agora

$$L^* \{h\}(\tau, \mathbf{c}) = -\nu(c)h(\tau, \mathbf{c}) + \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) d\mathbf{c}'_x d\mathbf{c}'_y d\mathbf{c}'_z. \quad (2.38)$$

Barichello e Siewert [2] determinaram as componentes  $f_n(c', c)$  para o modelo **BGK** como caso particular do modelo **CES** e Siewert e Sharipov [33] as obtiveram usando em conjunto os modelos **BGK** e **S**. Porém, para o modelo **Gross-Jackson** elas ainda não eram conhecidas e foi necessário determiná-las. Segundo Garcia e Siewert [21], os núcleos de espalhamento desses três modelos podem ser escritos simultaneamente na expressão

$$F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + 2\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} + \frac{2}{3} \left( c'^2 - \frac{3}{2} \right) \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) + \beta M(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \varpi N(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad (2.39)$$

onde

$$M(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{4}{5} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} \left( c'^2 - \frac{5}{2} \right) \left( c^2 - \frac{5}{2} \right), \quad (2.40)$$

$$N(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2 \left[ (\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - \frac{1}{3} c'^2 c^2 \right] \quad (2.41)$$

e

$$\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} = c' c \sum_{m=0}^1 (2 - \delta_{0,m}) P_1^m(\mu') P_1^m(\mu) \cos m(\chi' - \chi). \quad (2.42)$$

Para obter o núcleo do modelo **BGK** na Eq. (2.39) deve-se escolher os parâmetros  $\beta = 0$  e  $\varpi = 0$ . Para ter o modelo **S**,  $\beta = \frac{1}{3}$  e  $\varpi = 0$ , e para o modelo **Gross-Jackson**  $\beta = \frac{5}{9}$  e  $\varpi = \frac{1}{3}$ .

Como se deseja escrever o núcleo de espalhamento dado pela Eq. (2.39) na forma da Eq. (2.33), define-se as componentes  $f_n(c', c)$  como

$$f_0(c', c) = 4\pi^{-1/2} \left[ 1 + \frac{2}{3} \left( c'^2 - \frac{3}{2} \right) \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) \right], \quad (2.43)$$

$$f_1(c', c) = \frac{8}{3} \pi^{-1/2} c' c \left[ 1 + \frac{2}{5} \beta \left( c'^2 - \frac{5}{2} \right) \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) \right], \quad (2.44)$$

$$f_2(c', c) = \frac{16}{15} \pi^{-1/2} \varpi c'^2 c^2 \quad (2.45)$$

e

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

A derivação das funções  $f_n(c', c)$  feitas neste trabalho para o modelo **Gross-Jackson** foram confirmadas na Ref. [21].

Usando as Eqs. (2.43) e (2.44) nas Eqs. (2.18) a (2.20), determina-se que  $\nu(c) = 1$  é a frequência de colisão para os três modelos. Aplicando as Eqs. (2.44) e (2.45) nas Eqs. (2.27) e (2.30), determina-se as funções de Chapman-Enskog, originalmente definidas nas Eqs. (2.27) e (2.30), para cada modelo. Para o modelo **BGK** tem-se

$$a(c) = (c^2 - 5/2) \quad (2.47)$$

e

$$b(c) = 1. \quad (2.48)$$

Para o modelo **S**,

$$a(c) = (3/2) (c^2 - 5/2) \quad (2.49)$$

e

$$b(c) = 1. \quad (2.50)$$

Já para o modelo **Gross-Jackson**,

$$a(c) = (9/4) (c^2 - 5/2) \quad (2.51)$$

e

$$b(c) = 3/2. \quad (2.52)$$

Usando as Eqs. (2.47) a (2.52) nas Eqs. (2.26) e (2.32), consegue-se determinar os valores de  $\varepsilon$  para os três modelos. Para o modelo **BGK** tem-se

$$\varepsilon_p = \varepsilon_t = 1, \quad (2.53)$$

para o modelo **S**

$$\varepsilon_p = 1 \quad \text{e} \quad \varepsilon_t = 3/2, \quad (2.54)$$

e para o modelo **Gross-Jackson**

$$\varepsilon_p = 3/2 \quad \text{e} \quad \varepsilon_t = 9/4. \quad (2.55)$$

Ressalta-se aqui que para a ELB tem-se [2]

$$\varepsilon_p = 0.449027806... \quad \text{e} \quad \varepsilon_t = 0.679630049... . \quad (2.56)$$

De acordo com a Ref. [2], o número de Prandtl seguidamente usado em teoria cinética pode ser expresso como

$$Pr = \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_t}. \quad (2.57)$$

Usando a Eq. (2.56) na Eq. (2.57), encontra-se para a ELB o resultado

$$Pr = 0.660694457... , \quad (2.58)$$

que é um valor próximo a  $2/3$ , o qual segundo Cercignani [14] é normalmente usado em teoria cinética. Usando as Eqs. (2.53) a (2.55) e (2.57), para o modelo **BGK** tem-se  $Pr = 1$ , enquanto nos modelos **S** e **Gross-Jackson**  $Pr = 2/3$ , embora todos tenham frequência de colisão constante. Sob esse ponto de vista, esses dois últimos modelos parecem estar mais de acordo com a teoria cinética.

Para resolver problemas da dinâmica de gases rarefeitos, além da ELB também são necessárias condições de contorno que descrevem o comportamento do gás quando ele está em contato com as paredes. Então, para descrever o processo de interação entre o gás e a parede, segue-se Williams [49] e utiliza-se o modelo difuso-especular, que considera que uma fração de partículas se reflete difusamente, enquanto que a fração restante é refletida especularmente.

No próximo capítulo será apresentada a formulação matemática do problema de transferência de calor num canal plano, o qual pretende-se resolver usando os modelos **BGK**, **S** e **Gross-Jackson** e o método ADO.

### 3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Apresentada uma formulação de equações modelo da ELB 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 o problema de transferência de calor usando cada um dos modelos cinéticos.

Assim, apresenta-se neste capítulo a formulação do referido problema com os modelos cinéticos mencionados no capítulo anterior e introduz-se, posteriormente, uma formulação vetorial que será abordada pelo método ADO.

#### 3.1 Definição do problema

O problema de transferência de calor no regime de transição e num canal plano pode ser modelado pela ELB ou por modelos cinéticos, com condições de contorno apropriadas [38]. Como nesse trabalho serão usados apenas modelos cinéticos com frequência de colisão constante, usando as Eqs. (2.37) e (2.38) com  $\nu(c) = 1$ , pode-se escrever o problema mencionado como

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) + \varepsilon h(\tau, \mathbf{c}) = \frac{\varepsilon}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) d\mathbf{c}'_x d\mathbf{c}'_y d\mathbf{c}'_z, \quad (3.1)$$

onde novamente  $h(\tau, \mathbf{c})$  é uma perturbação da distribuição de partículas na Maxwelliana absoluta e  $F(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  é o núcleo de espalhamento do modelo a ser utilizado. Como neste trabalho serão utilizados os modelos **BGK**, **S** e **Gross-Jackson**, seguindo a seção anterior

$$F(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + 2\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} + \frac{2}{3} \left( c'^2 - \frac{3}{2} \right) \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) + \beta M(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \varpi N(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad (3.2)$$

onde

$$M(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{4}{5} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} \left( c'^2 - \frac{5}{2} \right) \left( c^2 - \frac{5}{2} \right), \quad (3.3)$$

$$N(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2 \left[ (\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - \frac{1}{3} c'^2 c^2 \right] \quad (3.4)$$

e  $\beta$  e  $\varpi$  são como na seção 2.4. Ainda em relação a Eq. (3.1),  $\tau$  é a variável espacial adimensionalizada, e  $\mathbf{c}$  é o vetor velocidade adimensional com coordenadas retangulares

$(c_x, c_y, c_z)$  e magnitude  $c$ . Assim

$$h(\tau, \mathbf{c}) \Leftrightarrow h(\tau, c_x, c_y, c_z). \quad (3.5)$$

A constante  $\varepsilon$  é dada pelas Eqs. (2.26) ou (2.32) dependendo se é desejado trabalhar-se com o livre caminho médio baseado na viscosidade ou na condutividade térmica, respectivamente.

As condições de contorno associadas à Eq. (3.1) são escritas, segundo a Ref. [49], como

$$\begin{aligned} h(-a, c_x, c_y, c_z) &= \alpha_1 \delta_1 (c^2 - 2) + (1 - \alpha_1) h(-a, -c_x, c_y, c_z) \\ &+ \frac{2\alpha_1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(-a, -c'_x, c'_y, c'_z) c'_x \mathbf{d}c'_x \mathbf{d}c'_y \mathbf{d}c'_z, \quad c_x > 0 \end{aligned} \quad (3.6)$$

e

$$\begin{aligned} h(a, c_x, c_y, c_z) &= \alpha_2 \delta_2 (c^2 - 2) + (1 - \alpha_2) h(a, -c_x, c_y, c_z) \\ &+ \frac{2\alpha_2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(a, c'_x, c'_y, c'_z) c'_x \mathbf{d}c'_x \mathbf{d}c'_y \mathbf{d}c'_z, \quad c_x < 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde

$$\delta_1 = \frac{T_{\omega_1} - T_0}{T_0} \quad (3.8)$$

e

$$\delta_2 = \frac{T_{\omega_2} - T_0}{T_0}. \quad (3.9)$$

Nas Eqs. (3.8) e (3.9),  $T_{\omega_1}$  e  $T_{\omega_2}$  são as temperaturas das paredes localizadas em  $\tau = -a$  e  $\tau = a$ , respectivamente, e  $T_0$  é uma temperatura de referência. Usa-se  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ , pertencentes ao intervalo  $[0, 1]$ , para denotar os coeficientes de acomodação do gás nessas mesmas paredes. As quantidades de interesse físico a serem determinadas são as perturbações da densidade e da temperatura

$$N(\tau) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} h(\tau, \mathbf{c}) \mathbf{d}c_x \mathbf{d}c_y \mathbf{d}c_z \quad (3.10)$$

e

$$T(\tau) = \frac{2}{3\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) h(\tau, \mathbf{c}) \mathbf{d}c_x \mathbf{d}c_y \mathbf{d}c_z, \quad (3.11)$$

e o fluxo de calor entre as paredes

$$Q_x = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) h(\tau, \mathbf{c}) c_x \mathrm{d}c_x \mathrm{d}c_y \mathrm{d}c_z. \quad (3.12)$$

Nota-se que multiplicando a Eq. (3.1) por  $c^k e^{-c^2}$  para  $k = 0, 2$ , integrando para todo  $c_x, c_y, c_z$ , e usando as informações das condições de contorno, obtém-se que o fluxo de calor é uma função independente da variável  $\tau$ .

### 3.2 Formulação vetorial do problema

Observa-se nas Eqs. (3.10) a (3.12) que as quantidades de interesse são definidas em termos de integrais que envolvem a função  $h(\tau, \mathbf{c})$ . Dessa forma, ao invés de tratar-se diretamente com a Eq. (3.1), define-se problemas auxiliares que facilitam a resolução do problema original. Assim, define-se

$$g_1(\tau, c_x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c_y^2 - c_z^2} h(\tau, c_x, c_y, c_z) \mathrm{d}c_y \mathrm{d}c_z \quad (3.13)$$

e

$$g_2(\tau, c_x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (c_y^2 + c_z^2 - 1) e^{-c_y^2 - c_z^2} h(\tau, c_x, c_y, c_z) \mathrm{d}c_y \mathrm{d}c_z, \quad (3.14)$$

multiplica-se a Eq. (3.1) por

$$\phi_1(c_y, c_z) = \frac{1}{\pi} e^{-c_y^2 - c_z^2} \quad (3.15)$$

e integra-se para todo  $c_y, c_z$ . Fazendo  $c_x = \xi$  tem-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} g_1(\tau, \xi) + \varepsilon g_1(\tau, \xi) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{11}(\xi', \xi) g_1(\tau, \xi') + k_{12}(\xi', \xi) g_2(\tau, \xi')] \mathrm{d}\xi', \quad (3.16)$$

onde

$$k_{11}(\xi', \xi) = 1 + 2\xi\xi' + \frac{2}{3} \left( \xi^2 - \frac{1}{2} \right) \left( \xi'^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{4}{5} \beta \xi \xi' \left( \xi^2 - \frac{3}{2} \right) \left( \xi'^2 - \frac{3}{2} \right) + 2\varpi \left[ \frac{2}{3} \xi^2 \xi'^2 - \frac{1}{3} (\xi^2 + \xi'^2) + \frac{1}{6} \right] \quad (3.17)$$

e

$$k_{12}(\xi', \xi) = \frac{2}{3} \left( \xi^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{4}{5} \beta \xi \xi' \left( \xi^2 - \frac{3}{2} \right) + 2\varpi \left( \frac{1}{6} - \frac{1}{3} \xi^2 \right). \quad (3.18)$$

Da mesma forma, multiplica-se a Eq. (3.1) por

$$\phi_2(c_y, c_z) = \frac{1}{\pi}(c_y^2 + c_z^2 - 1)e^{-c_y^2 - c_z^2} \quad (3.19)$$

e integra-se para todo  $c_y, c_z$ . Fazendo  $c_x = \xi$  novamente, obtém-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} g_2(\tau, \xi) + \varepsilon g_2(\tau, \xi) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{21}(\xi', \xi)g_1(\tau, \xi') + k_{22}(\xi', \xi)g_2(\tau, \xi')] d\xi', \quad (3.20)$$

onde

$$k_{21}(\xi', \xi) = \frac{2}{3} \left( \xi'^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{4}{5} \beta \xi \xi' \left( \xi'^2 - \frac{3}{2} \right) + 2\varpi \left( \frac{1}{6} - \frac{1}{3} \xi'^2 \right) \quad (3.21)$$

e

$$k_{22}(\xi', \xi) = \frac{2}{3} + \frac{4}{5} \beta \xi \xi' + \frac{\varpi}{3}. \quad (3.22)$$

As Eqs. (3.16) e (3.20) podem ser escritas vetorialmente como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (3.23)$$

onde

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} g_1(\tau, \xi) \\ g_2(\tau, \xi) \end{bmatrix}, \quad (3.24)$$

$$\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \quad (3.25)$$

e

$$\mathbf{K}(\xi', \xi) = \begin{bmatrix} k_{11}(\xi', \xi) & k_{12}(\xi', \xi) \\ k_{21}(\xi', \xi) & k_{22}(\xi', \xi) \end{bmatrix}. \quad (3.26)$$

Para encontrar-se condições de contorno condizentes com a Eq. (3.23), repete-se esse procedimento nas Eqs. (3.6) e (3.7) obtendo para  $\xi > 0$

$$\mathbf{G}(-a, \xi) = (1 - \alpha_1) \mathbf{G}(-a, -\xi) + 2\alpha_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \int_0^{\infty} \mathbf{G}(-a, -\xi') e^{-\xi'^2} \xi' d\xi' + \alpha_1 \delta_1 \begin{bmatrix} \xi^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

e

$$\mathbf{G}(a, -\xi) = (1 - \alpha_2) \mathbf{G}(a, \xi) + 2\alpha_2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \int_0^{\infty} \mathbf{G}(a, \xi') e^{-\xi'^2} \xi' d\xi' + \alpha_2 \delta_2 \begin{bmatrix} \xi^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Ainda usando as Eqs. (3.13) e (3.14), encontra-se para as perturbações da densidade e da temperatura, em termos da solução  $\mathbf{G}(\tau, \xi)$ ,

$$N(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi \quad (3.29)$$

e

$$T(\tau) = \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - \frac{1}{2} \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi, \quad (3.30)$$

e ainda para o fluxo de calor

$$Q_x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \xi \begin{bmatrix} \xi^2 - \frac{3}{2} \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi. \quad (3.31)$$

A fim de se fazer comparações dos resultados deste trabalho com outros, segue-se Siewert [38] e calcula-se o fluxo de calor normalizado definido como

$$q = \frac{Q_x}{Q_{fm}}, \quad (3.32)$$

onde  $Q_{fm}$  é o fluxo de calor adimensional em condições de moléculas livres. Ainda seguindo a Ref. [38], usa-se

$$Q_{fm} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 (\delta_1 - \delta_2)}{(\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_2) \pi^{1/2}}. \quad (3.33)$$

Substituindo a Eq. (3.31) na Eq. (3.32) encontra-se para o fluxo de calor normalizado a expressão

$$q = \frac{(\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_2) \pi^{1/2}}{\alpha_1 \alpha_2 (\delta_1 - \delta_2)} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \xi \begin{bmatrix} \xi^2 - \frac{3}{2} \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi. \quad (3.34)$$

### 3.3 A questão da unicidade

Pode-se notar que o problema definido pelas Eqs. (3.23), (3.27) e (3.28) não tem solução única. Essa observação é facilmente verificada, pois se  $\mathbf{G}(\tau, \xi)$  é solução das Eqs. (3.23), (3.27) e (3.28), então

$$\hat{\mathbf{G}}(\tau, \xi) = \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathcal{K} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.35)$$



também é solução para qualquer valor de  $\mathcal{K}$ . Para definir a constante  $\mathcal{K}$ , segue-se Siewert [36, 38] e Garcia e Siewert [22] e usa-se a condição de normalização sobre a densidade

$$\int_{-a}^a N(\tau) d\tau = 0. \quad (3.36)$$

Nota-se que Garcia e Siewert [22] apresentam uma justificativa para o uso desta condição. Substituindo a Eq. (3.35) na Eq. (3.29) e a equação resultante na Eq. (3.36), encontra-se

$$\mathcal{K} = -\frac{1}{2a} \int_{-a}^a \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi d\tau. \quad (3.37)$$

Para avaliar-se os efeitos da constante  $\mathcal{K}$  nas quantidades de interesse, substitui-se a Eq. (3.35) nas Eqs. (3.30) e (3.34) e nota-se que essa constante não afeta a perturbação da temperatura nem o fluxo de calor normalizado. Entretanto, substituindo a Eq. (3.35) na Eq. (3.29) encontra-se para a perturbação da densidade

$$N(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi + \mathcal{K}. \quad (3.38)$$

No próximo capítulo será apresentada a construção da solução em ordenadas discretas para o problema de transferência de calor. Para isso, serão necessárias as equações apresentadas até aqui.

## 4 SOLUÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS

O método de ordenadas discretas proposto por Chandrasekhar [15] consiste basicamente na aproximação do termo integral da equação de transporte por uma fórmula de quadratura, transformando a equação íntegro-diferencial em um sistema de equações diferenciais ordinárias. No entanto, esse método apresenta uma dificuldade computacional que consiste no cálculo das constantes de separação como raízes de um polinômio. O método de Chandrasekhar foi reformulado por Barichello e Siewert [1] com algumas melhorias que o tornam bastante atrativo do ponto de vista computacional, como a determinação das constantes de separação através de um problema de autovalor e o uso de uma quadratura arbitrária.

Neste capítulo, será apresentada a versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO), para a resolução do problema de transferência de calor com os modelos **BGK**, **S** e **Gross-Jackson**.

Primeiramente notando que a Eq. (3.25) representa uma função par, tem-se

$$\psi(\xi) = \psi(-\xi). \quad (4.1)$$

Então segue-se Barichello e Siewert [1] e escreve-se o termo integral da Eq. (3.23) para a metade do seu domínio

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \int_0^{\infty} \psi(\xi') [\mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') + \mathbf{K}(-\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, -\xi')] d\xi'. \quad (4.2)$$

Introduzindo um esquema de quadratura para o intervalo  $[0, \infty)$ , pode-se discretizar a integral da Eq. (4.2) e escrever a equação resultante na forma

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \xi) \mathbf{G}(\tau, -\xi_k)], \quad (4.3)$$

onde  $\{\xi_k, \omega_k\}$  são os  $N$  pontos e pesos da quadratura. Fazendo  $\xi = \pm\xi_i$  na Eq. (4.3), para  $i = 1, \dots, N$ , obtém-se o sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\pm \xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \varepsilon \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \pm\xi_i) \mathbf{G}(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm\xi_i) \mathbf{G}(\tau, -\xi_k)]. \quad (4.4)$$

Para problemas da forma da Eq. (4.4) procura-se soluções da forma

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \Phi(\nu, \xi) e^{-\varepsilon\tau/\nu}, \quad (4.5)$$

onde

$$\Phi(\nu, \xi) = \begin{bmatrix} \Phi_1(\nu, \xi) \\ \Phi_2(\nu, \xi) \end{bmatrix}. \quad (4.6)$$

Assim, substituindo a Eq. (4.5) na Eq. (4.4) obtém-se

$$\left(1 \mp \frac{\xi_i}{\nu}\right) \Phi(\nu, \pm\xi_i) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \pm\xi_i) \Phi(\nu, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm\xi_i) \Phi(\nu, -\xi_k)]. \quad (4.7)$$

Fazendo  $i = 1, \dots, N$  pode-se escrever matricialmente a Eq. (4.7) como

$$\left(\mathbf{I} - \frac{1}{\nu} \mathbf{M}\right) \Phi_+(\nu) = \mathbf{W}(+, +) \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}(-, +) \Phi_-(\nu) \quad (4.8)$$

e

$$\left(\mathbf{I} + \frac{1}{\nu} \mathbf{M}\right) \Phi_-(\nu) = \mathbf{W}(+, -) \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}(-, -) \Phi_-(\nu), \quad (4.9)$$

onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade de dimensão  $2N \times 2N$ ,

$$\mathbf{M} = \text{diag} \{ \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N \}, \quad (4.10)$$

$$\Phi_{\pm}(\nu) = \begin{bmatrix} \Phi_1(\nu, \pm\xi_1) & \cdots & \Phi_1(\nu, \pm\xi_N) & \Phi_2(\nu, \pm\xi_1) & \cdots & \Phi_2(\nu, \pm\xi_N) \end{bmatrix}^T \quad (4.11)$$

e

$$\mathbf{W}(\pm, \pm) = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{11}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{12}(\pm, \pm) \\ \mathbf{W}_{21}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{22}(\pm, \pm) \end{bmatrix}, \quad (4.12)$$

onde os elementos da matriz  $\mathbf{W}(\pm, \pm)$  são definidos como

$$[\mathbf{W}_{m,n}(\pm, \pm)]_{i,j} = \omega_j \psi(\xi_j) k_{m,n}(\pm\xi_j, \pm\xi_i) \quad (4.13)$$

para  $m, n = 1, 2$  e  $i, j = 1, \dots, N$ . Nota-se pelas Eqs. (3.17), (3.18), (3.21) e (3.22) que a matriz  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  da Eq. (3.23) apresenta a seguinte simetria em relação aos sinais de  $\xi$  e  $\xi'$ :

$$\mathbf{K}(\xi', \xi) = \mathbf{K}(-\xi', -\xi) \quad (4.14)$$

e

$$\mathbf{K}(-\xi', \xi) = \mathbf{K}(\xi', -\xi). \quad (4.15)$$

Essa simetria é conservada na matriz  $\mathbf{W}(\pm, \pm)$ , portanto

$$\mathbf{W}(+, +) = \mathbf{W}(-, -) \quad (4.16)$$

e

$$\mathbf{W}(+, -) = \mathbf{W}(-, +). \quad (4.17)$$

Assim, define-se

$$\mathbf{W}_+ = \mathbf{W}(+, +) = \mathbf{W}(-, -) \quad (4.18)$$

e

$$\mathbf{W}_- = \mathbf{W}(+, -) = \mathbf{W}(-, +). \quad (4.19)$$

Pode-se notar que a matriz  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$ , que representa o núcleo de espalhamento, é diferente neste problema se comparado com os outros problemas de gases rarefeitos resolvidos com o modelo  $\mathbf{S}$  em Cabrera [10]. Nesta referência, a matriz do núcleo de espalhamento pode ser decomposta em um produto de duas matrizes da forma

$$\mathbf{K}(\xi', \xi) = \mathbf{Q}(\xi)\mathbf{Q}^T(\xi'). \quad (4.20)$$

Essa separação de variáveis implica que o problema de autovalor será mais simples que o obtido neste trabalho. Porém, a simetria da matriz  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  apresentada nas Eqs. (4.14) e (4.15) será fundamental para a obtenção de um problema de autovalor mais simples que o obtido na Ref. [22] com o modelo **McCormack**, o qual trata de uma mistura de dois gases.

Usando as Eqs. (4.18) e (4.19), as Eqs. (4.8) e (4.9) podem ser reescritas como

$$\left( \mathbf{I} - \frac{1}{\nu} \mathbf{M} \right) \Phi_+(\nu) = \mathbf{W}_+ \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}_- \Phi_-(\nu) \quad (4.21)$$

e

$$\left(\mathbf{I} + \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\right)\Phi_{-}(\nu) = \mathbf{W}_{-}\Phi_{+}(\nu) + \mathbf{W}_{+}\Phi_{-}(\nu). \quad (4.22)$$

Seja

$$\mathbf{U} = \Phi_{+}(\nu) + \Phi_{-}(\nu). \quad (4.23)$$

Somando e subtraindo as Eqs. (4.21) e (4.22) e usando a Eq. (4.23) obtém-se o problema de autovalor

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \lambda\mathbf{X}, \quad (4.24)$$

onde

$$\mathbf{A} = (\mathbf{W}_{+} - \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{W}_{+} + \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}, \quad (4.25)$$

$$\mathbf{X} = \mathbf{M}\mathbf{U} \quad (4.26)$$

e os autovalores, que neste caso são reais, são dados por

$$\lambda = \frac{1}{\nu^2}. \quad (4.27)$$

A Eq. (4.24) gera um conjunto de  $2N$  constantes de separação  $\nu_j$  e  $2N$  autovetores  $\mathbf{X}(\nu_j)$ .

Usando as Eqs. (4.21) e (4.22) encontra-se as soluções elementares

$$\Phi_{+}(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}[\mathbf{I} - \nu_j(\mathbf{W}_{+} + \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}]\mathbf{X}(\nu_j) \quad (4.28)$$

e

$$\Phi_{-}(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}[\mathbf{I} + \nu_j(\mathbf{W}_{+} + \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}]\mathbf{X}(\nu_j). \quad (4.29)$$

Determinadas as constantes de separação  $\nu_j$  e as soluções elementares  $\Phi_{+}(\nu_j)$  e  $\Phi_{-}(\nu_j)$ , pode-se então escrever a solução do problema em ordenadas discretas como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{2N} [A_j\Phi(\nu_j, \pm\xi_i)e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j\Phi(\nu_j, \mp\xi_i)e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}], \quad (4.30)$$

onde  $\Phi(\nu_j, \pm\xi_i)$  são vetores  $2 \times 1$  dados pela Eq. (4.6) avaliada nos pontos de quadratura  $\pm\xi_i$ .

Como problemas com gases rarefeitos são conservativos, é esperado que alguns autovalores definidos pela Eq. (4.24) tendam a zero quando  $N$  tende ao infinito. Tais autovalores são chamados de autovalores degenerados. Esse fato implica que as

constantes de separação associadas a esses autovalores tornam-se ilimitadas. Assim, para que não se percam as soluções elementares associadas aos autovalores degenerados, deve-se acrescentar à Eq. (4.30) outras soluções chamadas de "soluções exatas". Ao resolver o problema de autovalor dado pela Eq. (4.24), encontra-se dois autovalores degenerados e, conseqüentemente, deve-se acrescentar quatro soluções exatas à Eq. (4.30). Assim, a solução do problema em ordenadas discretas pode ser escrita como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \mathbf{G}^*(\tau, \pm\xi_i) + \sum_{j=1}^{2N-2} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}], \quad (4.31)$$

onde

$$\mathbf{G}^*(\tau, \xi) = A_1^* \mathbf{G}_1 + A_2^* \mathbf{G}_2(\xi) + B_1^* \mathbf{G}_3(\xi) + B_2^* \mathbf{G}_4(\tau, \xi). \quad (4.32)$$

Garcia e Siewert [22] resolveram o problema de transferência de calor usando o modelo **McCormack**. Entretanto, segundo esses autores, se esse modelo for particularizado para apenas um gás ele se reduz ao modelo **S**. Então, usando essa idéia e também a Ref. [22], obtém-se que as soluções exatas são

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4.33)$$

$$\mathbf{G}_2(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (4.34)$$

$$\mathbf{G}_3(\xi) = \begin{bmatrix} \xi \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

e

$$\mathbf{G}_4(\tau, \xi) = \tau \mathbf{H}(\xi) + \mathbf{F}(\xi), \quad (4.36)$$

onde

$$\mathbf{H}(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

e  $\mathbf{F}(\xi)$  é uma função a ser determinada para que se conheça a função  $\mathbf{G}_4(\tau, \xi)$ . Substituindo a Eq. (4.36) na Eq. (3.23) obtém-se

$$\mathbf{F}(\xi) = -\frac{\xi}{\varepsilon} \mathbf{H}(\xi) + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{F}(\xi') d\xi'. \quad (4.38)$$

Seguindo Siewert [41], a função  $\mathbf{F}(\xi)$  pode ser expressa como

$$\mathbf{F}(\xi) = \sum_{\alpha=0}^3 P_{\alpha}(\xi) \mathbf{F}_{\alpha}, \quad (4.39)$$

onde

$$P_0(\xi) = 1, \quad (4.40)$$

$$P_1(\xi) = \xi, \quad (4.41)$$

$$P_2(\xi) = \xi^2 - \frac{1}{2} \quad (4.42)$$

e

$$P_3(\xi) = \xi \left( \xi^2 - \frac{3}{2} \right). \quad (4.43)$$

Substituindo a Eq. (4.39) na Eq. (4.38), multiplicando a equação resultante por  $\psi(\xi)P_k(\xi)$ , para  $k=0, 1, 2, 3$  e integrando para todo  $\xi$ , obtém-se um sistema linear com oito equações lineares e oito incógnitas, que, ao contrário do obtido no caso de misturas, pode ser resolvido analiticamente para encontrar as componentes dos vetores  $\mathbf{F}_{\alpha}$ . Resolvendo esse sistema linear, encontra-se

$$\mathbf{F}(\xi) = -\frac{1}{\varepsilon(1-\beta)} \xi \begin{bmatrix} \xi^2 - \frac{3}{2} \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.44)$$

e então

$$\mathbf{G}_4(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} \tau \left( \xi^2 - \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{\varepsilon(1-\beta)} \xi \left( \xi^2 - \frac{3}{2} \right) \\ \tau - \frac{1}{\varepsilon(1-\beta)} \xi \end{bmatrix}. \quad (4.45)$$

Conhecidas as soluções exatas, o próximo passo é determinar os  $4N$  coeficientes  $A_1^*, A_2^*, B_1^*, B_2^*, A_j, B_j, j=1, \dots, 2N-2$  da Eq. (4.31). Para isso, são necessárias as versões em ordenadas discretas das condições de contorno dadas pelas Eqs. (3.27) e (3.28), que são

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(-a, \xi_i) = (1 - \alpha_1) \mathbf{G}(-a, -\xi_i) + 2\alpha_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k \mathbf{G}(-a, -\xi_k) e^{-\xi_k^2} \\ + \alpha_1 \delta_1 \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.46)$$

e

$$\mathbf{G}(a, -\xi_i) = (1 - \alpha_2) \mathbf{G}(a, \xi_i) + 2\alpha_2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k \mathbf{G}(a, \xi_k) e^{-\xi_k^2} + \alpha_2 \delta_2 \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.47)$$

Nota-se porém, que  $\mathbf{G}_1$  satisfaz a parte homogênea das condições de contorno e, por isso, o coeficiente  $A_1^*$  não pode ser determinado. Apesar disso, aplica-se a Eq. (4.31) nas Eqs. (4.46) e (4.47) e obtém-se o sistema linear com  $4N$  equações e  $4N - 1$  incógnitas

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{2N-2} B_j \left\{ \Phi(\nu_j, -\xi_i) - (1 - \alpha_1)\Phi(\nu_j, \xi_i) - 2\alpha_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{S}_+(\nu_j) \right\} e^{-2a\varepsilon/\nu_j} \\
& + \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \left\{ \Phi(\nu_j, \xi_i) - (1 - \alpha_1)\Phi(\nu_j, -\xi_i) - 2\alpha_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{S}_-(\nu_j) \right\} + \alpha_1 \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} A_2^* \\
& + \begin{bmatrix} (2 - \alpha_1)\xi_i + \frac{\alpha_1}{2}\sqrt{\pi} \\ 0 \end{bmatrix} B_1^* + \begin{bmatrix} \frac{\alpha_1 - 2}{\varepsilon(1 - \beta)} (\xi_i^3 - \frac{3}{2}\xi_i) - \alpha_1 a (\xi_i^2 - 1) \\ \frac{\alpha_1 - 2}{\varepsilon(1 - \beta)} \xi_i - \alpha_1 a \end{bmatrix} B_2^* = \alpha_1 \delta_1 \mathbf{R}(\xi_i)
\end{aligned} \tag{4.48}$$

e

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \left\{ \Phi(\nu_j, -\xi_i) - (1 - \alpha_2)\Phi(\nu_j, \xi_i) - 2\alpha_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{S}_+(\nu_j) \right\} e^{-2a\varepsilon/\nu_j} \\
& + \sum_{j=1}^{2N-2} B_j \left\{ \Phi(\nu_j, \xi_i) - (1 - \alpha_2)\Phi(\nu_j, -\xi_i) - 2\alpha_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{S}_-(\nu_j) \right\} + \alpha_2 \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} A_2^* \\
& + \begin{bmatrix} (\alpha_2 - 2)\xi_i - \frac{\alpha_2}{2}\sqrt{\pi} \\ 0 \end{bmatrix} B_1^* + \begin{bmatrix} \frac{2 - \alpha_2}{\varepsilon(1 - \beta)} (\xi_i^3 - \frac{3}{2}\xi_i) + \alpha_2 a (\xi_i^2 - 1) \\ \frac{2 - \alpha_2}{\varepsilon(1 - \beta)} \xi_i + \alpha_2 a \end{bmatrix} B_2^* = \alpha_2 \delta_2 \mathbf{R}(\xi_i),
\end{aligned} \tag{4.49}$$

onde  $\Phi(\nu_j, \pm\xi_i)$  são vetores  $2 \times 1$  dados pela Eq. (4.6) avaliados nos pontos de quadratura,

$$\mathbf{S}_-(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k e^{-\xi_k^2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \Phi(\nu_j, -\xi_k), \tag{4.50}$$

$$\mathbf{S}_+(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k e^{-\xi_k^2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \Phi(\nu_j, \xi_k) \tag{4.51}$$

e

$$\mathbf{R}(\xi_i) = \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{4.52}$$

Para substituir o coeficiente  $A_1^*$ , que não se pôde determinar com as condições de contorno, usa-se o coeficiente  $\mathcal{K}$  dado pela Eq. (3.35). Para isso, discretiza-se a integral em



$\xi$  da Eq. (3.37) e, aplicando a Eq. (4.31) na Eq. (3.37), obtém-se para o coeficiente  $\mathcal{K}$  a expressão

$$\mathcal{K} = -\frac{1}{2a\varepsilon} \sum_{j=1}^{2N-2} \nu_j (1 - e^{-2a\varepsilon/\nu_j}) (A_j + B_j) \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (4.53)$$

Adiciona-se a Eq. (4.53) ao sistema linear formado pelas Eqs. (4.48) e (4.49) e obtém-se dessa maneira um sistema linear com  $4N + 1$  equações e  $4N$  incógnitas, que pode ser resolvido pelo método de mínimos quadrados. Com isso consegue-se determinar todos os coeficientes necessários para se obter as perturbações da densidade e da temperatura e o fluxo de calor normalizado.

Aplicando a Eq. (4.31) nas Eqs. (3.38) e (3.30) obtém-se para as perturbações da densidade e da temperatura

$$N(\tau) = \mathcal{K} - B_2^* \tau + \sum_{j=1}^{2N-2} [A_j e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{V}(\nu_j) \quad (4.54)$$

e

$$T(\tau) = A_2^* + B_2^* \tau + \frac{2}{3} \sum_{j=1}^{2N-2} [A_j e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{Y}(\nu_j), \quad (4.55)$$

onde

$$\mathbf{V}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (4.56)$$

e

$$\mathbf{Y}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} \xi_k^2 - \frac{1}{2} \\ 1 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (4.57)$$

Aplicando a Eq. (4.31) na Eq. (3.34), obtém-se para o fluxo de calor normalizado

$$q = \frac{(\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_2) \pi^{1/2}}{\alpha_1 \alpha_2 (\delta_1 - \delta_2)} \left\{ -\frac{5}{4\varepsilon(1-\beta)} B_2^* + \sum_{j=1}^{2N-2} [A_j e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} - B_j e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{Z}(\nu_j) \right\}, \quad (4.58)$$

onde

$$\mathbf{Z}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} \xi_k^2 - \frac{3}{2} \\ 1 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) - \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (4.59)$$

No próximo capítulo descreve-se os procedimentos usados na implementação computacional do método ADO e apresenta-se os resultados numéricos obtidos para o problema de transferência de calor.

## 5 RESULTADOS NUMÉRICOS

### 5.1 Considerações gerais

Para se obter os resultados numéricos das quantidades de interesse definidas pelas Eqs. (4.54), (4.55) e (4.58), primeiramente deve-se definir o esquema de quadratura a ser usado na solução em ordenadas discretas. Em geral, usa-se a transformação não linear

$$u(\xi) = e^{-\xi} \quad (5.1)$$

para mapear o intervalo  $[0, \infty)$  para o intervalo  $[0, 1]$  e então usa-se a quadratura de Gauss Legendre mapeada linearmente para o intervalo  $[0, 1]$  pela transformação

$$v(u) = 2u - 1. \quad (5.2)$$

Definido o esquema de quadratura, desenvolve-se a implementação em FORTRAN da solução em ordenadas discretas. Calcula-se os autovalores e autovetores da Eq. (4.24) usando a rotina RG do pacote matemático EISPACK [43]. Depois determina-se as constantes de separação  $\nu_j$  definidas pela Eq. (4.27) e as soluções elementares  $\Phi_{\pm}(\nu_j)$  definidas pelas Eqs. (4.28) e (4.29). Para determinar os coeficientes  $\mathcal{K}$ ,  $A_2^*$ ,  $B_1^*$ ,  $B_2^*$ ,  $A_j$  e  $B_j$ ,  $j = 1, \dots, 2N - 2$  necessários na Eq. (4.31), utiliza-se as rotinas de mínimos quadrados DQRDC e DQRSL do pacote LINPACK [18] para resolver o sistema linear formado pelas Eqs. (4.48), (4.49) e (4.53). A seguir, calcula-se as quantidades de interesse desejadas.

### 5.2 Resultados da solução em ordenadas discretas

Devido a existência de resultados numéricos na literatura, no caso de uma espécie de gás, apenas para o modelo **BGK** [36] e para a ELB [38], não é possível comparar os resultados obtidos com os modelos **S** e **Gross-Jackson** com outros trabalhos. Por isso busca-se outros aspectos para dar confiabilidade aos resultados obtidos com esses modelos. Entre esses aspectos, pode-se notar que, aumentando o número de pontos de

quadratura do método ADO, obtém-se convergência numérica nos resultados encontrados. Além disso, se comparados com Siewert [36], os resultados obtidos com o modelo **BGK** se mostram corretos em todos os dígitos apresentados. Como o mesmo programa é usado com os modelos **S** e **Gross-Jackson**, esse fato também aumenta a confiabilidade dos resultados.

Afim de se comparar resultados não só com aqueles obtidos pelo modelo **BGK** [36], mas também com a ELB [38], foram gerados resultados para um canal com largura  $2a = 2.0$ , coeficientes de acomodação  $\alpha_1 = 0.7$  e  $\alpha_2 = 0.3$  e temperaturas nas paredes  $\delta_1 = 1.0$  e  $\delta_2 = -1.0$  (Caso I). A seguir foi usado outro canal com largura  $2a = 5.0$ , coeficientes de acomodação  $\alpha_1 = 1.0$  e  $\alpha_2 = 0.5$  e temperaturas nas paredes  $\delta_1 = 1.0$  e  $\delta_2 = -1.0$  (Caso II). Esses resultados estão nas Tabelas 5.1 a 5.9. Tentando evidenciar possíveis aspectos diferentes dos já disponíveis na literatura, foram gerados resultados para outros valores dos parâmetros de interesse. Assim, foram usados também canais com largura menor ou temperaturas diferentes nas paredes. Foram gerados resultados em um terceiro canal com largura  $2a = 1.0$ , coeficientes de acomodação  $\alpha_1 = 0.7$  e  $\alpha_2 = 0.3$  e temperaturas nas paredes  $\delta_1 = 1.0$  e  $\delta_2 = -1.0$  (Caso III), e também em um quarto canal com largura  $2a = 1.0$ , coeficientes de acomodação  $\alpha_1 = 0.7$  e  $\alpha_2 = 0.3$  e temperaturas nas paredes  $\delta_1 = 2.0$  e  $\delta_2 = -1.0$  (Caso IV). Os resultados para estes canais estão nas Tabelas 5.10 a 5.18. Além disso, em todos os casos foi usado o parâmetro  $\varepsilon$  dado pela Eq. (2.23) baseado na viscosidade e na condutividade térmica, denotado por  $\varepsilon_p$  e  $\varepsilon_t$ , respectivamente. Os resultados numéricos foram gerados com  $N = 30$  e os valores apresentados nas Tabelas 5.1 a 5.18 se repetem para um  $N$  maior com a exatidão de mais ou menos um dígito na última casa decimal. Em todas as situações analisadas foram encontrados sete algarismos significativos para a perturbação da densidade e para o fluxo de calor normalizado, e seis para a perturbação da temperatura.

As Tabelas 5.1 a 5.4 mostram as perturbações da densidade e da temperatura para o Caso I, enquanto que as Tabelas 5.5 a 5.8 mostram essas mesmas quantidades de interesse para o Caso II. O fluxo de calor normalizado para ambos está na Tabela 5.9.

Algumas características podem ser escritas em conjunto para as Tabelas 5.1 a 5.8, que são:

- para  $\varepsilon_t$  os resultados dos três modelos são mais próximos do que com  $\varepsilon_p$ ;
- para  $\varepsilon_p$  os resultados dos modelos **S** e **Gross-Jackson** estão mais próximos um do outro se comparados ao modelo **BGK**, como era de se esperar;
- com exceção da Tabela 5.3, de um modo geral os resultados do modelo **S** estão entre os resultados dos modelos **BGK** e **Gross-Jackson**.

Quanto à concordância de dígitos entre os modelos, cada tabela será analisada individualmente.

Na Tabela 5.1, o modelo **BGK** apresenta uma concordância de zero a um dígito com os modelos **S** e **Gross-Jackson**, enquanto que esses últimos concordam entre si entre zero e dois dígitos.

Tabela 5.1: Perturbação da densidade  $N(\tau)$  para o Caso I com  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-1.0	-2.645891(-1)	-2.161697(-1)	-2.178725(-1)
-0.8	-1.930967(-1)	-1.531382(-1)	-1.479868(-1)
-0.6	-1.411904(-1)	-1.109823(-1)	-1.061460(-1)
-0.4	-9.347171(-2)	-7.328989(-2)	-6.981796(-2)
-0.2	-4.744219(-2)	-3.739778(-2)	-3.565354(-2)
0.0	-1.940454(-3)	-2.068213(-3)	-2.185608(-3)
0.2	4.387489(-2)	3.359561(-2)	3.160752(-2)
0.4	9.091894(-2)	7.056904(-2)	6.684001(-2)
0.6	1.406371(-1)	1.103927(-1)	1.053410(-1)
0.8	1.963821(-1)	1.566399(-1)	1.515846(-1)
1.0	2.797634(-1)	2.323430(-1)	2.369868(-1)

Já na Tabela 5.2 os três modelos concordam entre si entre zero e dois dígitos. Se comparados com a ELB, o modelo **Gross-Jackson** se mostra mais adequado.

Tabela 5.2: Perturbação da densidade  $N(\tau)$  para o Caso I com  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

$\tau$	ELB[38]	BGK	S	GJ
-1.0	-2.5368(-1)	-2.645891(-1)	-2.682733(-1)	-2.675544(-1)
-0.8	-1.8265(-1)	-1.930967(-1)	-1.905462(-1)	-1.827593(-1)
-0.6	-1.3342(-1)	-1.411904(-1)	-1.385100(-1)	-1.318669(-1)
-0.4	-8.8300(-2)	-9.347171(-2)	-9.152498(-2)	-8.688809(-2)
-0.2	-4.4787(-2)	-4.744219(-2)	-4.652590(-2)	-4.412745(-2)
0.0	-1.7756(-3)	-1.940454(-3)	-2.154736(-3)	-2.082200(-3)
0.2	4.1504(-2)	4.387489(-2)	4.254529(-2)	4.024419(-2)
0.4	8.5893(-2)	9.091894(-2)	8.861857(-2)	8.394339(-2)
0.6	1.3278(-1)	1.406371(-1)	1.377655(-1)	1.308993(-1)
0.8	1.8556(-1)	1.963821(-1)	1.941117(-1)	1.860468(-1)
1.0	2.6933(-1)	2.797634(-1)	2.866885(-1)	2.883261(-1)

Na Tabela 5.3, observa-se que o modelo **BGK** concorda com os outros dois modelos entre zero e dois dígitos, enquanto que os modelos **S** e **Gross-Jackson** apresentam uma concordância de um a três dígitos entre si.

Tabela 5.3: Perturbação da temperatura  $T(\tau)$  para o Caso I com  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-1.0	6.74583(-1)	6.53158(-1)	6.59872(-1)
-0.8	5.96369(-1)	5.82962(-1)	5.81170(-1)
-0.6	5.39983(-1)	5.36032(-1)	5.33329(-1)
-0.4	4.88603(-1)	4.94437(-1)	4.92103(-1)
-0.2	4.39292(-1)	4.55047(-1)	4.53554(-1)
0.0	3.90626(-1)	4.16345(-1)	4.15850(-1)
0.2	3.41552(-1)	3.77207(-1)	3.77659(-1)
0.4	2.90926(-1)	3.36417(-1)	3.37536(-1)
0.6	2.36995(-1)	2.92103(-1)	2.93201(-1)
0.8	1.75848(-1)	2.40098(-1)	2.39380(-1)
1.0	8.40673(-2)	1.55442(-1)	1.42126(-1)

Analisando a Tabela 5.4, o modelo **Gross-Jackson** apresenta de zero a dois dígitos de concordância com os demais, enquanto que os modelos **BGK** e **S** concordam entre si em zero a três dígitos. Novamente nessa tabela o modelo **Gross-Jackson** parece estar mais de acordo com a **ELB**.

Tabela 5.4: Perturbação da temperatura  $T(\tau)$  para o Caso I com  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

$\tau$	ELB[38]	BGK	S	GJ
-1.0	6.7606(-1)	6.74583(-1)	6.80154(-1)	6.84732(-1)
-0.8	5.9100(-1)	5.96369(-1)	5.93935(-1)	5.89609(-1)
-0.6	5.3593(-1)	5.39983(-1)	5.36942(-1)	5.32607(-1)
-0.4	4.8692(-1)	4.88603(-1)	4.86226(-1)	4.83114(-1)
-0.2	4.4033(-1)	4.39292(-1)	4.38055(-1)	4.36583(-1)
0.0	3.9450(-1)	3.90626(-1)	3.90692(-1)	3.91002(-1)
0.2	3.4824(-1)	3.41552(-1)	3.42882(-1)	3.44960(-1)
0.4	3.0025(-1)	2.90926(-1)	2.93259(-1)	2.96912(-1)
0.6	2.4843(-1)	2.36995(-1)	2.39670(-1)	2.44341(-1)
0.8	1.8785(-1)	1.75848(-1)	1.77127(-1)	1.81134(-1)
1.0	8.4272(-2)	8.40673(-2)	7.35788(-2)	6.43816(-2)

Na Tabela 5.5 não se observa nenhum dígito de concordância entre o modelo **BGK** e os demais, enquanto que os modelos **S** e **Gross-Jackson** têm de zero a dois dígitos de concordância.

Tabela 5.5: Perturbação da densidade  $N(\tau)$  para o Caso II com  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-2.5	-5.787381(-1)	-4.935455(-1)	-4.898606(-1)
-2.0	-4.371448(-1)	-3.637638(-1)	-3.525300(-1)
-1.5	-3.238811(-1)	-2.680410(-1)	-2.591909(-1)
-1.0	-2.155265(-1)	-1.782201(-1)	-1.721746(-1)
-0.5	-1.089826(-1)	-9.057606(-2)	-8.731025(-2)
0.0	-2.944756(-3)	-3.540280(-3)	-3.068027(-3)
0.5	1.035007(-1)	8.398549(-2)	8.152315(-2)
1.0	2.113987(-1)	1.732575(-1)	1.675859(-1)
1.5	3.225774(-1)	2.664737(-1)	2.572804(-1)
2.0	4.418259(-1)	3.693916(-1)	3.569852(-1)
2.5	6.075009(-1)	5.281250(-1)	5.273068(-1)

Na Tabela 5.6 a concordância entre os três modelos varia de um a dois dígitos.

Tabela 5.6: Perturbação da densidade  $N(\tau)$  para o Caso II com  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

$\tau$	ELB[38]	BGK	S	GJ
-2.5	-5.6834(-1)	-5.787381(-1)	-5.777093(-1)	-5.744557(-1)
-2.0	-4.2825(-1)	-4.371448(-1)	-4.302270(-1)	-4.207801(-1)
-1.5	-3.1770(-1)	-3.238811(-1)	-3.183011(-1)	-3.114257(-1)
-1.0	-2.1140(-1)	-2.155265(-1)	-2.117074(-1)	-2.071454(-1)
-0.5	-1.0661(-1)	-1.089826(-1)	-1.069900(-1)	-1.044396(-1)
0.0	-2.2547(-3)	-2.944756(-3)	-2.814972(-3)	-2.185462(-3)
0.5	1.0237(-1)	1.035007(-1)	1.017004(-1)	1.002668(-1)
1.0	2.0807(-1)	2.113987(-1)	2.075761(-1)	2.036785(-1)
1.5	3.1637(-1)	3.225774(-1)	3.167049(-1)	3.096569(-1)
2.0	4.3158(-1)	4.418259(-1)	4.344377(-1)	4.235511(-1)
2.5	5.9529(-1)	6.075009(-1)	6.101076(-1)	6.081653(-1)

Na Tabela 5.7 o modelo **Gross-Jackson** apresenta zero a dois dígitos de concordância com os demais e o modelo **BGK** apresenta de zero a um dígito em relação ao **S**.

Tabela 5.7: Perturbação da temperatura  $T(\tau)$  para o Caso II com  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-2.5	8.26728(-1)	7.91686(-1)	7.93644(-1)
-2.0	6.75739(-1)	6.50609(-1)	6.43283(-1)
-1.5	5.58060(-1)	5.49579(-1)	5.43763(-1)
-1.0	4.46817(-1)	4.56286(-1)	4.52939(-1)
-0.5	3.38030(-1)	3.65945(-1)	3.65298(-1)
0.0	2.29936(-1)	2.76436(-1)	2.78586(-1)
0.5	1.21266(-1)	1.86236(-1)	1.91260(-1)
1.0	1.05785(-2)	9.36106(-2)	1.01545(-1)
1.5	-1.04577(-1)	-4.38745(-3)	6.24753(-3)
2.0	-2.30311(-1)	-1.15102(-1)	-1.03170(-1)
2.5	-4.10298(-1)	-2.91041(-1)	-2.95335(-1)



Na Tabela 5.8 a concordância entre os três modelos varia de zero a dois dígitos. Nesta tabela, nenhum dos modelos aparenta ter resultados mais próximos à ELB em relação aos demais.

Tabela 5.8: Perturbação da temperatura  $T(\tau)$  para o Caso II com  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

$\tau$	ELB[38]	BGK	S	GJ
-2.5	8.2333(-1)	8.26728(-1)	8.27698(-1)	8.28658(-1)
-2.0	6.6684(-1)	6.75739(-1)	6.68739(-1)	6.61561(-1)
-1.5	5.5223(-1)	5.58060(-1)	5.52586(-1)	5.47358(-1)
-1.0	4.4421(-1)	4.46817(-1)	4.43689(-1)	4.40718(-1)
-0.5	3.3853(-1)	3.38030(-1)	3.37426(-1)	3.36628(-1)
0.0	2.3353(-1)	2.29936(-1)	2.31937(-1)	2.33290(-1)
0.5	1.2816(-1)	1.21266(-1)	1.25965(-1)	1.29598(-1)
1.0	2.1165(-2)	1.05785(-2)	1.80643(-2)	2.42503(-2)
1.5	-8.8946(-2)	-1.04577(-1)	-9.43996(-2)	-8.53560(-2)
2.0	-2.1157(-1)	-2.30311(-1)	-2.18552(-1)	-2.07026(-1)
2.5	-4.0267(-1)	-4.10298(-1)	-4.12022(-1)	-4.14296(-1)

Analisando a Tabela 5.9, observa-se que usando  $\varepsilon_t$  os resultados dos três modelos estão mais próximos do que com  $\varepsilon_p$ , além do modelo **S** apresentar resultados intermediários aos demais. Com  $\varepsilon_p$  os resultados dos modelos **S** e **Gross-Jackson** estão mais próximos um do outro se comparados com o **BGK**. No único caso que existe comparação com a ELB, o modelo **BGK** apresentou-se mais apropriado. Quanto à concordância, o modelo **BGK** apresenta de zero a dois dígitos em relação aos demais, enquanto que os modelos **S** e **Gross-Jackson** concordam em um a três dígitos entre si.

Tabela 5.9: Fluxo de calor normalizado  $q$  para os Casos I e II.

	$\varepsilon$	ELB[38]	BGK	S	GJ
Caso I	$\varepsilon_p$	—	7.722926(-1)	8.231404(-1)	8.177086(-1)
Caso I	$\varepsilon_t$	7.75502(-1)	7.722926(-1)	7.677320(-1)	7.640570(-1)
Caso II	$\varepsilon_p$	—	4.472267(-1)	5.376703(-1)	5.363627(-1)
Caso II	$\varepsilon_t$	—	4.472267(-1)	4.465040(-1)	4.460350(-1)

De acordo com as Tabelas 5.1 a 5.9, não é possível afirmar que algum dos três modelos é melhor que os demais se comparado com a ELB. Além disso, de um modo

geral, os modelos apresentam de zero a três dígitos de concordância entre seus resultados, o que está de acordo com os problemas da dinâmica de gases rarefeitos resolvidos em Cabrera [10] e Cabrera e Barichello [9]. Nestas referências, no que diz respeito aos modelos **S** e **BGK**, foram encontrados, usando o parâmetro  $\varepsilon$  baseado na viscosidade, um a dois dígitos de concordância para os problemas de Couette e Poiseuille, dois a três dígitos para o problema de Kramers, zero a um dígito para o "Creep" térmico e nenhum dígito para o Deslizamento térmico. Ainda na Ref. [9], usando o parâmetro  $\varepsilon$  baseado na condutividade térmica foi encontrado zero a dois dígitos de concordância para o problema do "Creep" térmico e zero a um dígito para o problema do Deslizamento térmico.

Em relação aos dois outros casos, novamente algumas características em comum são observadas nas perturbações de densidade e temperatura dadas agora pelas Tabelas 5.10 a 5.17, que são:

- para  $\varepsilon_t$  os resultados dos três modelos são mais próximos do que com  $\varepsilon_p$ ;
- para  $\varepsilon_p$  os resultados dos modelos **S** e **Gross-Jackson** estão mais próximos um do outro se comparados ao modelo **BGK**;
- nas Tabelas 5.10, 5.13, 5.14 e 5.17, em geral os resultados do modelo **S** estão entre os resultados dos modelos **BGK** e **Gross-Jackson**.

Quanto à concordância de casas decimais, na Tabela 5.10 o modelo **BGK** apresenta de zero a um dígito em relação aos demais, enquanto que os modelos **S** e **Gross-Jackson** apresentam de zero a três dígitos se comparados um com o outro.

Tabela 5.10: Perturbação da densidade  $N(\tau)$  para o Caso III com  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-0.5	-1.778868(-1)	-1.485249(-1)	-1.547073(-1)
-0.4	-1.296852(-1)	-1.057447(-1)	-1.059560(-1)
-0.3	-9.458135(-2)	-7.653020(-2)	-7.580675(-2)
-0.2	-6.259044(-2)	-5.053978(-2)	-4.986146(-2)
-0.1	-3.189521(-2)	-2.589131(-2)	-2.564398(-2)
0.0	-1.597160(-3)	-1.654203(-3)	-1.970171(-3)
0.1	2.897711(-2)	2.286899(-2)	2.203016(-2)
0.2	6.055567(-2)	4.843234(-2)	4.730000(-2)
0.3	9.424390(-2)	7.618071(-2)	7.530148(-2)
0.4	1.324566(-1)	1.086151(-1)	1.093301(-1)
0.5	1.890710(-1)	1.601085(-1)	1.694222(-1)

Já na Tabela 5.11 o modelo **BGK** concorda com o **S** em um a dois dígitos e com o **Gross-Jackson** em zero a três. Os modelos **S** e **Gross-Jackson** apresentam de zero a dois dígitos em comum.

Tabela 5.11: Perturbação da densidade  $N(\tau)$  para o Caso III com  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-0.5	-1.778868(-1)	-1.851828(-1)	-1.888197(-1)
-0.4	-1.296852(-1)	-1.312964(-1)	-1.283976(-1)
-0.3	-9.458135(-2)	-9.504775(-2)	-9.189817(-2)
-0.2	-6.259044(-2)	-6.275901(-2)	-6.042218(-2)
-0.1	-3.189521(-2)	-3.209101(-2)	-3.096348(-2)
0.0	-1.597160(-3)	-1.925169(-3)	-2.149253(-3)
0.1	2.897711(-2)	2.856185(-2)	2.700185(-2)
0.2	6.055567(-2)	6.026330(-2)	5.755702(-2)
0.3	9.424390(-2)	9.456500(-2)	9.122114(-2)
0.4	1.324566(-1)	1.345951(-1)	1.320067(-1)
0.5	1.890710(-1)	1.994866(-1)	2.062686(-1)

A Tabela 5.12 apresenta de zero a dois dígitos em comum entre o modelo **BGK** e os demais, e um a três dígitos entre os modelos **S** e **Gross-Jackson**.

Tabela 5.12: Perturbação da temperatura  $T(\tau)$  para o Caso III com  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-0.5	6.26834(-1)	6.13506(-1)	6.23102(-1)
-0.4	5.73818(-1)	5.65740(-1)	5.67949(-1)
-0.3	5.34979(-1)	5.32657(-1)	5.32761(-1)
-0.2	4.99668(-1)	5.03228(-1)	5.02314(-1)
-0.1	4.65847(-1)	4.75342(-1)	4.73843(-1)
0.0	4.32481(-1)	4.47927(-1)	4.45978(-1)
0.1	3.98780(-1)	4.20166(-1)	4.17692(-1)
0.2	3.63897(-1)	3.91180(-1)	3.87874(-1)
0.3	3.26568(-1)	3.59661(-1)	3.54842(-1)
0.4	2.84110(-1)	3.22829(-1)	3.14924(-1)
0.5	2.21848(-1)	2.65487(-1)	2.46971(-1)

Na Tabela 5.13 o modelo **BGK** apresenta um a quatro dígitos em comum com o **S** e zero a dois dígitos em comum com o **Gross-Jackson**. Entre os modelos **S** e **Gross-Jackson** encontra-se de zero a quatro dígitos de concordância.

Tabela 5.13: Perturbação da temperatura  $T(\tau)$  para o Caso III com  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-0.5	6.26834(-1)	6.35763(-1)	6.43869(-1)
-0.4	5.73818(-1)	5.75646(-1)	5.75659(-1)
-0.3	5.34979(-1)	5.34932(-1)	5.33463(-1)
-0.2	4.99668(-1)	4.98837(-1)	4.97114(-1)
-0.1	4.65847(-1)	4.64672(-1)	4.63165(-1)
0.0	4.32481(-1)	4.31102(-1)	4.29962(-1)
0.1	3.98780(-1)	3.97127(-1)	3.96288(-1)
0.2	3.63897(-1)	3.61665(-1)	3.60822(-1)
0.3	3.26568(-1)	3.23078(-1)	3.21518(-1)
0.4	2.84110(-1)	2.77799(-1)	2.73774(-1)
0.5	2.21848(-1)	2.05323(-1)	1.89421(-1)

Já na Tabela 5.14 o modelo **BGK** concorda com os outros em zero a um dígito e o modelo **S** concorda com o **Gross-Jackson** em um a três dígitos.

Tabela 5.14: Perturbação da densidade  $N(\tau)$  para o Caso IV com  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-0.5	-2.668302(-1)	-2.227873(-1)	-2.320610(-1)
-0.4	-1.945278(-1)	-1.586171(-1)	-1.589340(-1)
-0.3	-1.418720(-1)	-1.147953(-1)	-1.137101(-1)
-0.2	-9.388566(-2)	-7.580967(-2)	-7.479219(-2)
-0.1	-4.784282(-2)	-3.883697(-2)	-3.846597(-2)
0.0	-2.395740(-3)	-2.481305(-3)	-2.955257(-3)
0.1	4.346567(-2)	3.430349(-2)	3.304524(-2)
0.2	9.083351(-2)	7.264851(-2)	7.095000(-2)
0.3	1.413658(-1)	1.142710(-1)	1.129522(-1)
0.4	1.986850(-1)	1.629228(-1)	1.639951(-1)
0.5	2.836066(-1)	2.401628(-1)	2.541333(-1)

Na Tabela 5.15 o modelo **BGK** apresenta zero a três dígitos em comum com os demais e os modelos **S** e **Gross-Jackson** têm de zero a dois dígitos em comum.

Tabela 5.15: Perturbação da densidade  $N(\tau)$  para o Caso IV com  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-0.5	-2.668302(-1)	-2.777742(-1)	-2.832295(-1)
-0.4	-1.945278(-1)	-1.969446(-1)	-1.925964(-1)
-0.3	-1.418720(-1)	-1.425716(-1)	-1.378472(-1)
-0.2	-9.388566(-2)	-9.413852(-2)	-9.063328(-2)
-0.1	-4.784282(-2)	-4.813652(-2)	-4.644523(-2)
0.0	-2.395740(-3)	-2.887753(-3)	-3.223879(-3)
0.1	4.346567(-2)	4.284277(-2)	4.050279(-2)
0.2	9.083351(-2)	9.039496(-2)	8.633553(-2)
0.3	1.413658(-1)	1.418475(-1)	1.368317(-1)
0.4	1.986850(-1)	2.018926(-1)	1.980101(-1)
0.5	2.836066(-1)	2.992299(-1)	3.094029(-1)

Na Tabela 5.16 o modelo **BGK** concorda com os demais em zero a dois dígitos e os modelos **S** e **Gross-Jackson** concordam em um a três dígitos entre si.

Tabela 5.16: Perturbação da temperatura  $T(\tau)$  para o Caso IV com  $\varepsilon = \varepsilon_p$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-0.5	1.44025	1.42026	1.43465
-0.4	1.36072	1.34861	1.35192
-0.3	1.30246	1.29898	1.29914
-0.2	1.24950	1.25484	1.25347
-0.1	1.19877	1.21301	1.21076
0.0	1.14872	1.17189	1.16896
0.1	1.09817	1.13024	1.12653
0.2	1.04584	1.08677	1.08181
0.3	9.89852(-1)	1.03949	1.03226
0.4	9.26165(-1)	9.84244(-1)	9.72387(-1)
0.5	8.32773(-1)	8.98231(-1)	8.70458(-1)

Já na Tabela 5.17 o modelo **BGK** concorda com o **S** em um a quatro dígitos e com o **Gross-Jackson** em zero a três dígitos. Os modelos **S** e **Gross-Jackson** apresentam concordância de zero a cinco dígitos entre si.

Tabela 5.17: Perturbação da temperatura para o Caso IV com  $\varepsilon = \varepsilon_t$ .

$\tau$	BGK	S	GJ
-0.5	1.44025	1.45364	1.46580
-0.4	1.36072	1.36347	1.36349
-0.3	1.30246	1.30239	1.30019
-0.2	1.24950	1.24825	1.24567
-0.1	1.19877	1.19701	1.19474
0.0	1.14872	1.14665	1.14494
0.1	1.09817	1.09569	1.09443
0.2	1.04584	1.04249	1.04123
0.3	9.89852(-1)	9.84618(-1)	9.82277(-1)
0.4	9.26165(-1)	9.16699(-1)	9.10661(-1)
0.5	8.32773(-1)	8.07985(-1)	7.84132(-1)

Na Tabela 5.18, novamente se observa que para  $\varepsilon_t$  os resultados estão mais próximos do que com  $\varepsilon_p$ , além do modelo **S** apresentar resultados intermediários aos demais. Com  $\varepsilon_p$  os resultados dos modelos **S** e **Gross-Jackson** estão mais próximos se comparados ao **BGK**. Quanto à concordância, ela é de exatamente um dígito entre os três modelos. Nesta tabela nota-se que o fluxo de calor normalizado não depende das temperaturas das paredes. Isso pode ser justificado pelo fato que o fluxo de calor  $Q_x$  é proporcional à diferença entre as temperaturas das paredes do canal, o que está de acordo com a lei de Fourier para difusão [50]. O mesmo acontece com o fluxo de calor em moléculas livres  $Q_{fm}$ , dado pela Eq. (3.33). Portanto, o termo  $(\delta_1 - \delta_2)$  presente nas definições de  $Q_x$  e  $Q_{fm}$  é cancelado na Eq. (3.32) e, como resultado, tem-se que o fluxo de calor normalizado  $q$ , dado pela Eq. (3.34), independe das temperaturas das paredes.

Tabela 5.18: Fluxo de calor normalizado  $q$  para os Casos III e IV.

	$\varepsilon$	BGK	S	GJ
Caso III	$\varepsilon_p$	8.622379(-1)	8.930329(-1)	8.858598(-1)
Caso III	$\varepsilon_t$	8.622379(-1)	8.556544(-1)	8.492411(-1)
Caso IV	$\varepsilon_p$	8.622379(-1)	8.930329(-1)	8.858598(-1)
Caso IV	$\varepsilon_t$	8.622379(-1)	8.556544(-1)	8.492411(-1)

Pode-se notar que o comportamento dos resultados nesses dois últimos canais é semelhante aos dois primeiros, tanto no que diz respeito à concordância de dígitos, quanto ao fato que, em muitos casos, o modelo **S** apresentou resultados intermediários aos outros dois modelos. Nota-se, também, que quando usou-se  $\varepsilon_t$  obteve-se valores mais próximos do que com  $\varepsilon_p$ .

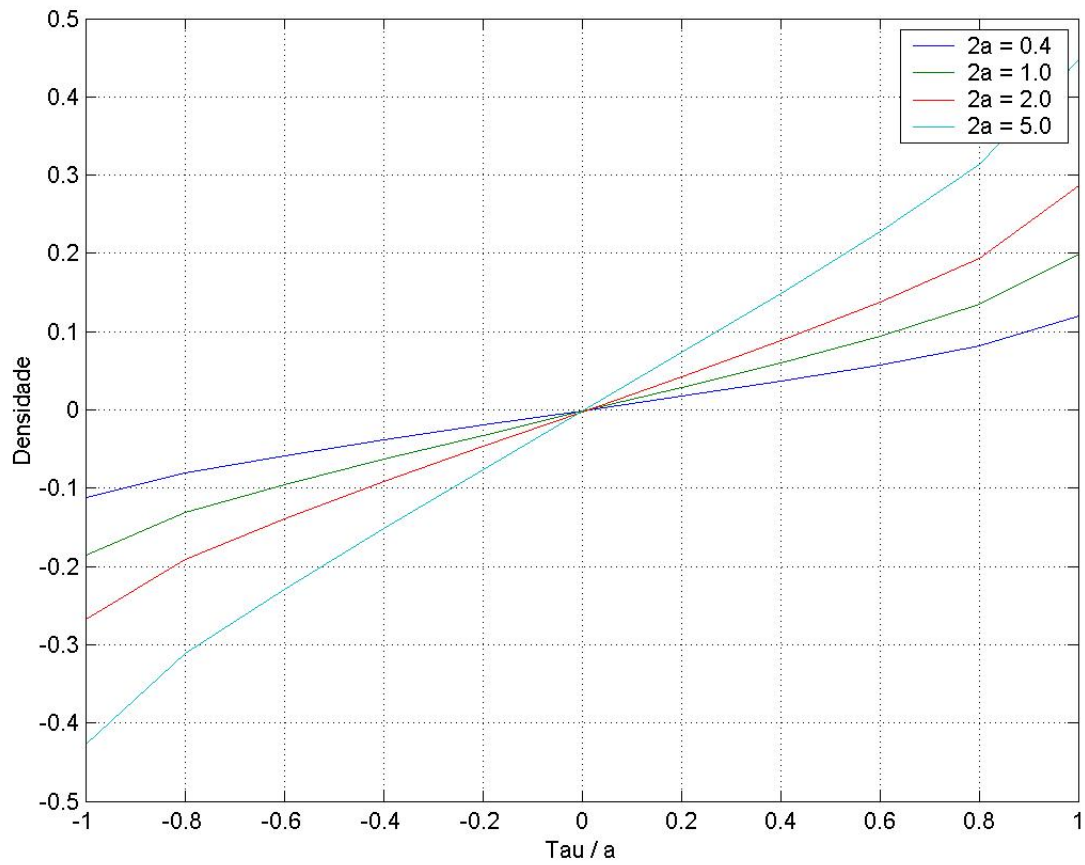
A fim de analisar o comportamento de resultados em canais que apresentam diferença apenas na largura, ou somente nas temperaturas das paredes, ou então apenas nos coeficientes de acomodação, apresenta-se as Figuras 5.1 a 5.6, que mostram através de gráficos os resultados encontrados em canais com estas características.

Nas Figuras 5.1 e 5.2 estão os gráficos das perturbações da densidade e da temperatura em canais com  $\alpha_1 = 0.7$ ,  $\alpha_2 = 0.3$ ,  $\delta_1 = 1.0$ ,  $\delta_2 = -1.0$ , mas de diferentes

larguras. Nas Figuras 5.3 e 5.4 encontram-se os resultados em canais com  $2a = 2.0$ ,  $\alpha_1 = 0.7$ ,  $\alpha_2 = 0.3$ , porém com diferença na temperatura em uma das paredes. Já nas Figuras 5.5 e 5.6 estão os gráficos de canais com  $2a = 2.0$ ,  $\delta_1 = 1.0$ ,  $\delta_2 = -1.0$ , mas com diferença em um dos coeficientes de acomodação. Como os modelos cinéticos apresentam boa concordância nos resultados apresentados até aqui, foi escolhido o modelo **S** com  $\varepsilon = \varepsilon_t$  para construir os gráficos.

Na Figura 5.1 nota-se que, quanto mais largo for o canal, maior é a perturbação da densidade do gás em relação ao seu estado natural. Em canais mais estreitos essa grandeza tende a ser menor.

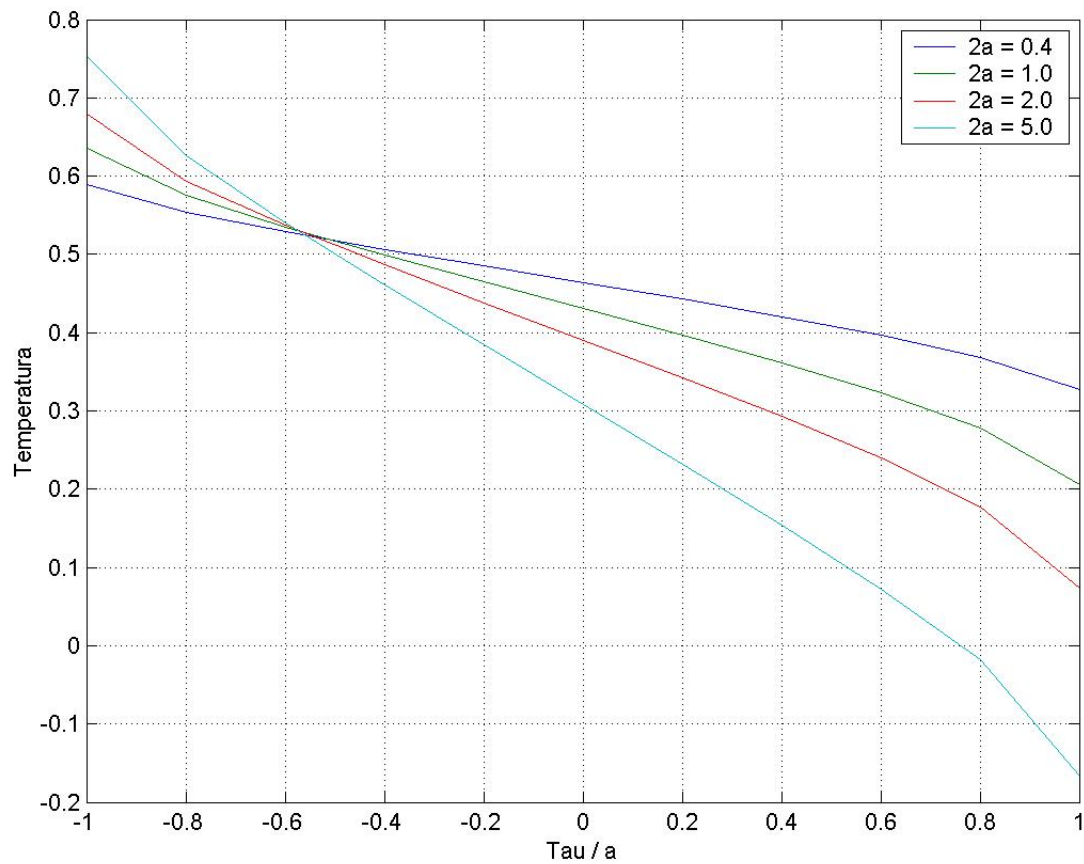
Figura 5.1: Densidade  $N(\tau) \times$  largura do canal.





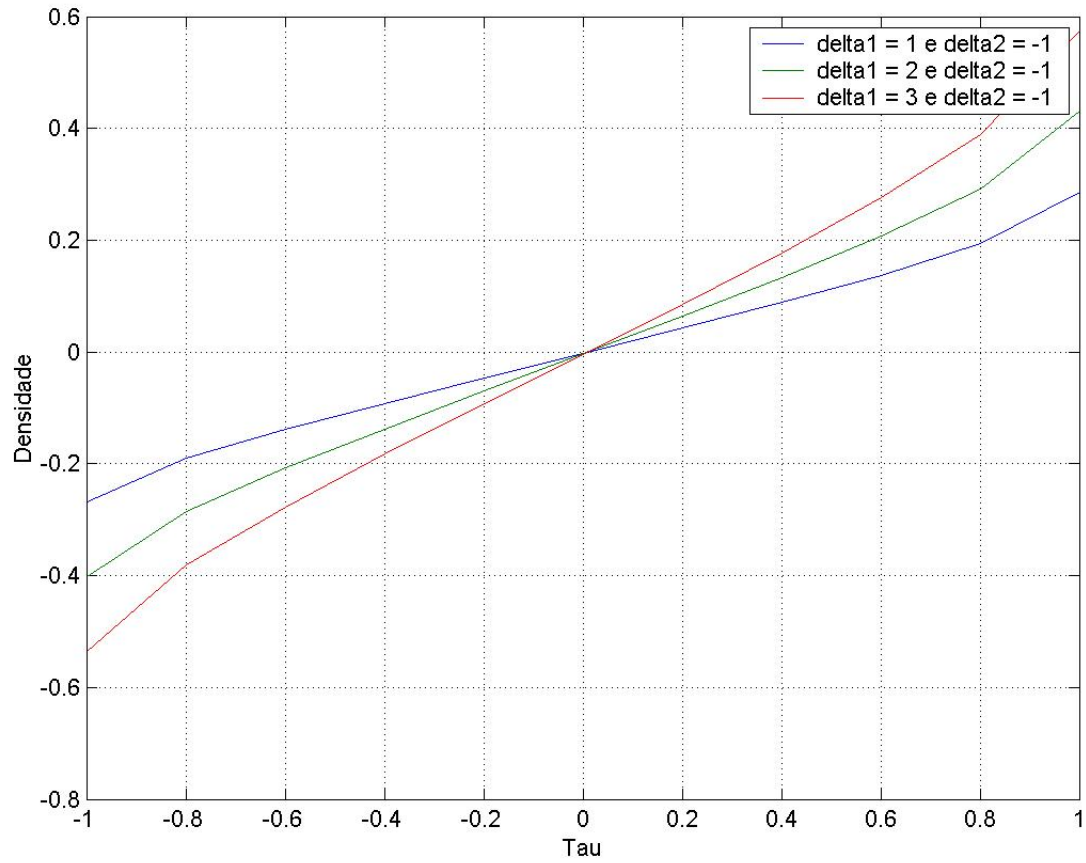
Observa-se na Figura 5.2 que, quanto maior a largura do canal, também será maior a variação da temperatura do gás. Além disso, nota-se que em  $\tau = -a$  a temperatura do gás está mais próxima da temperatura da parede do que em  $\tau = a$ . Isso ocorre porque o coeficiente de acomodação é maior na primeira parede do que na segunda. Também percebe-se que, quanto mais largo for o canal, menor será a diferença entre as temperaturas do gás e das paredes, nas suas proximidades.

Figura 5.2: Temperatura  $T(\tau) \times$  largura do canal.



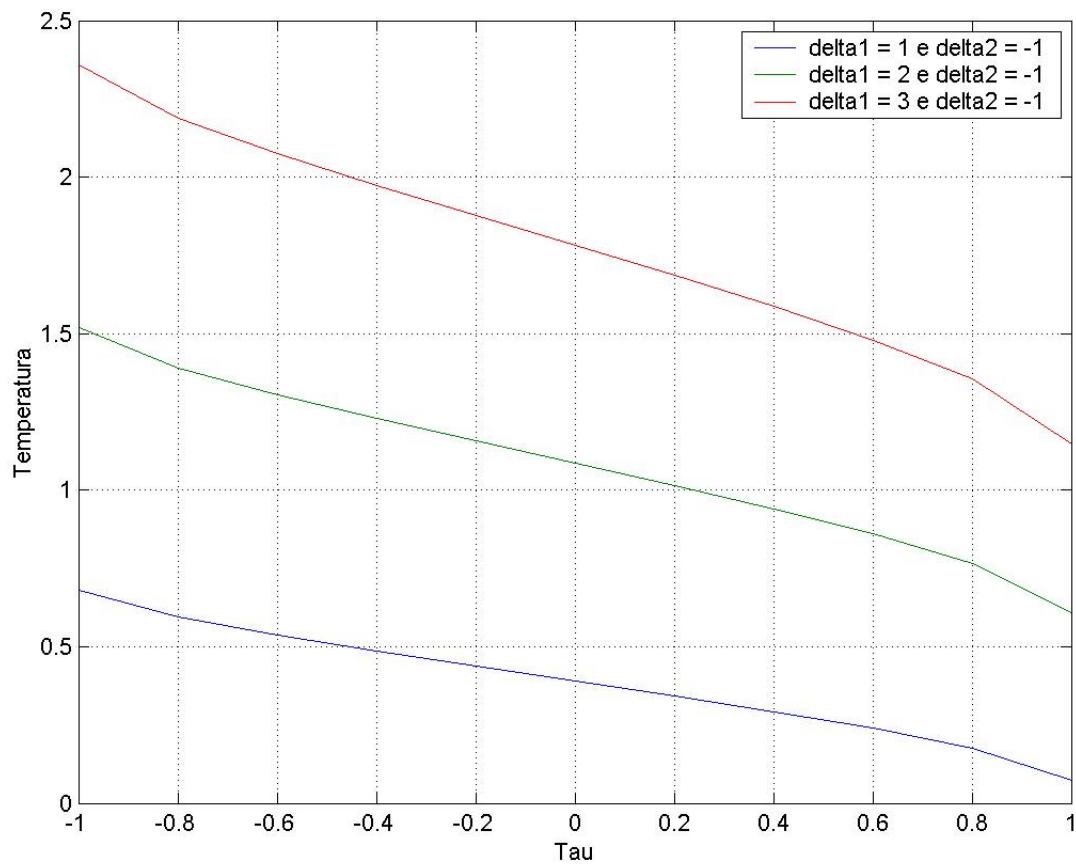
Na Figura 5.3 observa-se que, quanto maior a diferença entre as temperaturas das paredes, maior será a variação da densidade do gás.

Figura 5.3: Densidade  $N(\tau)$ : efeito das temperaturas das paredes.



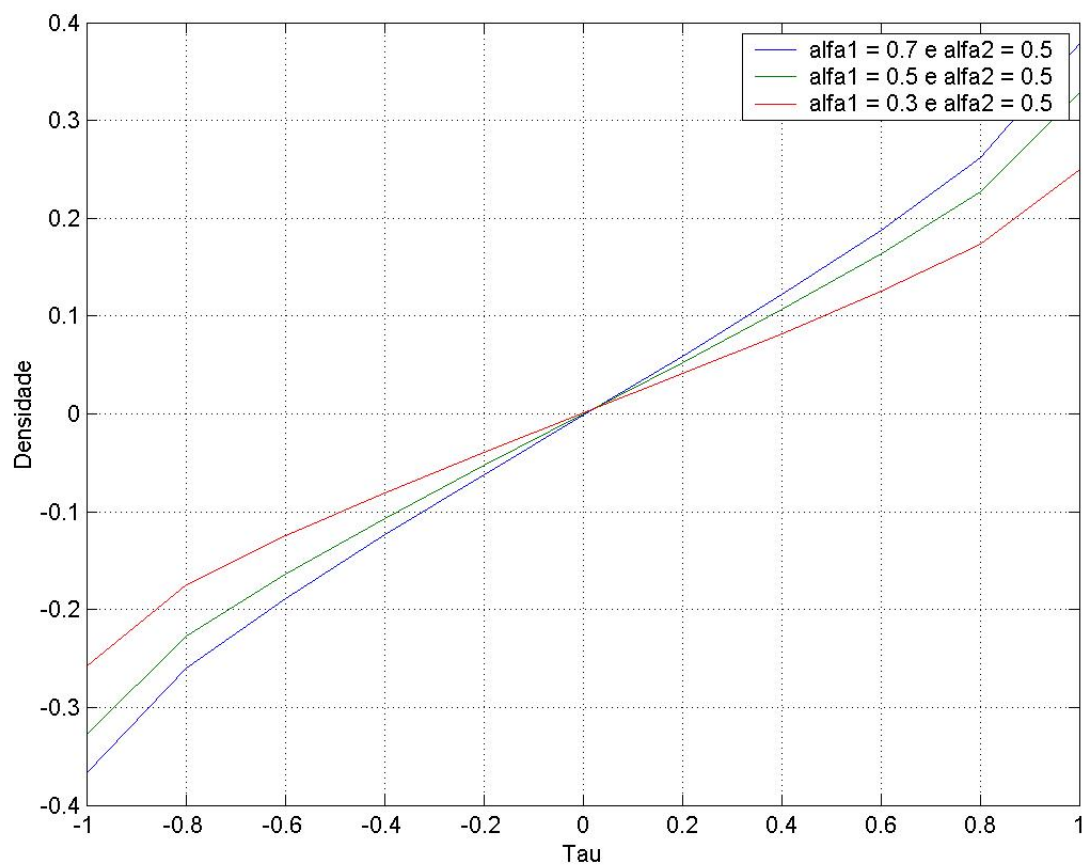
Percebe-se na Figura 5.4 que, quanto maior a diferença entre as temperaturas das paredes, também será maior a variação da temperatura do gás. Nota-se novamente que em  $\tau = -a$  a temperatura do gás está mais próxima da temperatura da parede do que em  $\tau = a$ . Isso ocorre porque na primeira parede o coeficiente de acomodação é maior que na segunda.

Figura 5.4: Temperatura  $T(\tau)$ : efeito das temperaturas das paredes.



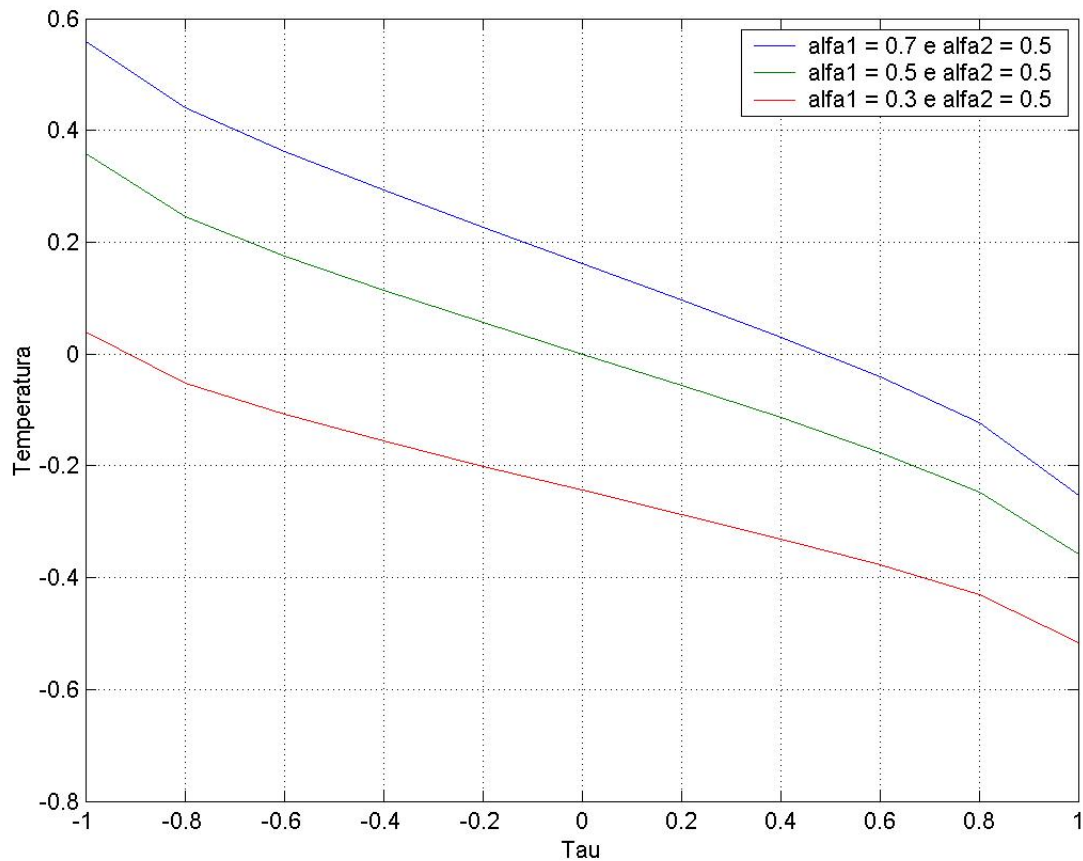
Nas Figuras 5.5 e 5.6 procura-se observar o comportamento do gás quando um dos coeficientes de acomodação varia, enquanto o outro permanece constante. Na Figura 5.5 observa-se que, quanto maior o coeficiente de acomodação  $\alpha_1$ , maior é a variação da densidade do gás.

Figura 5.5: Densidade  $N(\tau)$ : efeito dos coeficientes de acomodação.



E, finalmente, na Figura 5.6 percebe-se que, quanto maior o coeficiente de acomodação  $\alpha_1$ , também é maior a variação da temperatura do gás ao longo do canal. Além disso, observa-se que, fixando  $\alpha_2$ , quanto maior for o coeficiente de acomodação na placa mais quente (localizada em  $\tau = -a$ ) maior será a temperatura do gás no interior do canal.

Figura 5.6: Temperatura  $T(\tau)$ : efeito dos coeficientes de acomodação.



Por fim, nota-se em cada figura que as curvaturas dos gráficos são semelhantes, mudando apenas as inclinações. Nas Figuras 5.1, 5.3 e 5.5, observa-se que em  $\tau = 0$  não há variação da densidade do gás, o que significa que no meio do canal ela permanece inalterada.

Para finalizar esse capítulo, salienta-se que usando  $N = 30$ , o tempo de execução do programa em FORTRAN é de aproximadamente cinco segundos em um Pentium II 300 MHz com 64 MB de memória, demonstrando a eficiência do método ADO.

## 6 CONCLUSÃO

Analisando os resultados numéricos encontrados, verifica-se que os modelos **BGK**, **S** e **Gross-Jackson** são uma boa alternativa para aproximar o núcleo de colisão da ELB na resolução do problema de transferência de calor. Além disso, o uso destes modelos produziu uma solução em ordenadas discretas simples, precisa e de fácil implementação computacional. O método ADO mostrou-se novamente eficiente, apresentando exatidão de seis a sete dígitos e analiticidade na variável espacial para todas as quantidades de interesse avaliadas neste trabalho.

A implementação computacional foi favorecida devido à simetria do núcleo de colisão verificada nas Eqs. (4.14) e (4.15)

$$\mathbf{K}(\xi', \xi) = \mathbf{K}(-\xi', -\xi)$$

e

$$\mathbf{K}(-\xi', \xi) = \mathbf{K}(\xi', -\xi).$$

Na verdade, esta simetria foi fundamental na obtenção do problema de autovalor dado pela Eq. (4.24), que resulta em uma forma mais simples do que o caso de mistura de gases [22].

Observando os resultados encontrados com os modelos **S** e **Gross-Jackson**, não se nota significativa melhora dos resultados do modelo **BGK**, que possui uma expressão mais simples. Isso representa uma vantagem desse modelo em relação aos demais, pois, devido à sua maior simplicidade, pode gerar um núcleo de colisão da forma da Eq. (4.20) [36]

$$\mathbf{K}(\xi', \xi) = \mathbf{Q}(\xi)\mathbf{Q}^T(\xi'),$$

o que garante a obtenção de um problema de autovalor ainda mais simples que o encontrado para os demais modelos abordados neste trabalho.

Por fim, pode-se considerar que o objetivo desse trabalho foi plenamente alcançado, pois obteve-se de maneira unificada as soluções em ordenadas discretas para

o problema que se desejava. Assim, contribuiu-se com a solução de um problema da dinâmica de gases rarefeitos, cujos resultados não se encontravam na literatura, com os modelos **S** e **Gross-Jackson**. Os resultados gerados poderão servir de referência para outros trabalhos feitos com outros modelos e outros métodos computacionais.



## BIBLIOGRAFIA

- [1] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 62 (1999), 645-675.
- [2] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. Some comments on modeling the linearized Boltzmann equation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 77 (2003), 43-59.
- [3] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. The temperature-jump problem in rarefied-gas dynamics. *European Journal of Applied Mathematics* 11 (2000), 353-364.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] BASSANINI, P., CERCIGNANI, C., AND PAGANI, C.D. Comparison of kinetic theory analyses of linearized heat transfer between parallel plates. *Int. J. Heat Mass Transfer* 10 (1967) 447-460.
- [7] BASSANINI, P., CERCIGNANI, C., AND PAGANI, C.D. Influence of the accommodation coefficient on the heat transfer in a rarefied gas. *Int. J. Heat Mass Transfer* 11 (1968) 1359-1369.
- [8] 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.

- [9] CABRERA, L. C., AND BARICHELLO, L. B. Unified solutions to some classical problems in rarefied gas dynamics based on the S-model equations. Submitted a publicação (2004).
- [10] CABRERA, L. C. *Derivação e Solução de Equações Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos*. Dissertação de Mestrado do Programa de Pós graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2003.
- [11] CAMARGO, M., AND BARICHELLO, L. B. Unified approach for variable collision frequency models in rarefied gas dynamics. *Transp. Theory and Statistical Physics* (2004), em impressão.
- [12] 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.
- [13] CERCIGNANI, C. *Rarefied Gas Dynamics From Basic Concepts to Actual Calculations*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000.
- [14] CERCIGNANI, C. *The Boltzmann Equation and its Applications*. Springer Verlag, New York, 1988.
- [15] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, London, 1950.
- [16] CHAPMAN, S., AND COWLING, T. G. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*. Cambridge University Press, London, 1960.
- [17] CHENG, T. C., AND LOYALKA, S. K. Sound wave in a rarefied gas-II: Gross-Jackson model. *Progress in Nuclear Energy* 8 (1981), 263-267.
- [18] 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.

- [19] FAN, J., BOYD, I. D., CAI, C. P., HENNIGHAUSEN, K., AND CANDLER, G. V. Computational of rarefied gas flows around a NACA 0012 airfoil. *AIAA Journal* 39 (2001), 618-625.
- [20] FRANKOWSKI, F., ALTERMAN, Z., AND PEKERIS, C.L. Heat transport between parallel plates in a rarefied gas of rigid sphere molecules. *Phys. Fluids* 8 (1965), 245-258.
- [21] GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. The linearized Boltzmann equation: sound-wave propagation in a rarefied gas. Submetido a publicação (2004).
- [22] GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. The McCormack model for gas mixtures: heat transfer in a plane channel. *Physic of Fluids*,16 (2004), 3393-3402.
- [23] GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. The McCormack model for gas mixtures: plane Couette flow. *Physics of Fluids* (2005), em impressão.
- [24] GROSS, E. P., AND JACKSON, E. A. Kinetic models and the linearized Boltzmann equation. *The Physics of Fluids* 2 (1959), 432-441.
- [25] KARNIADAKIS, G. E., AND BESKOK, A. *Micro Flows*. Springer-Verlag, New York, (2002).
- [26] LOYALKA, S. K., AND FERZIGER, J. H. Model dependence of the slip coefficient. *Physics of Fluids* 10 (1967), 1833-1938.
- [27] LOYALKA, S. K., AND HICKEY, K. A. Plane Poiseuille flow: near continuum results for a rigid sphere gas. *Physica A* 160 (1989), 395-408.
- [28] LOYALKA, S. K., SIEWERT, C. S., AND THOMAS JR., J. R. Temperature-jump problem with arbitrary accommodation. *Phys. Fluids* 21 (1978), 854-855.
- [29] MCCORMACK, F. J. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixtures and molecular gases. *The Physics of Fluids* 16 (1973), 2095-2105.

- [30] PAN, S., AND STORVICH, T. S. Kinetic theory calculations of pressure effects of diffusion. *J. Chem. Phys.* 97 (1992), 2671-2681.
- [31] 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.
- [32] RAJU, R., AND ROY S. Numerical study of heat transfer in high speed microflows. *36th AIAA Thermophysics Conference*. Florida, 2003.
- [33] SIEWERT, C. E., AND SHARIPOV, F. Model equations in rarefield gas dynamics: viscous-slip and thermal-slip coefficients. *Physics of Fluids* 14 (2002), 4123-4129.
- [34] SIEWERT, C. E., AND VALOUGEORGIS, D. Analytical solutions to half-space binary-gas flow problems defined by the McCormack model and specular-diffuse wall conditions. *European J. Mechanics B/Fluids* (2004), em impressão.
- [35] SIEWERT, C. E., AND VALOUGEORGIS, D. The McCormack model: channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and density gradients *European J. Mechanics B/Fluids*, 23 (2004), 645-664.
- [36] SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for heat transfer in a plane channel. *Journal of Computational Physics* 152 (1999), 251-263.
- [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. Heat transfer and evaporation/condensation problems based on the linearized Boltzmann equation. *European Journal of Mechanics B/Fluids* 22 (2003), 391-408.
- [39] SIEWERT, C. E. Kramers problem for a variable collision frequency model. *European Journal of Applied Mathematics* 12 (2001), 179-191.

- [40] 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 (2002), 579-597.
- [41] SIEWERT, C. E. The McCormack model for gas mixtures: the temperature-jump problem. *Z. Angew. Math. Phys.* (2004), em impressão.
- [42] SHAKHOV, E. M. Method of investigation of rarefied gas flows. Nauka, Moscow, 1974.
- [43] 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.
- [44] SHARIPOV F., AND SELEZNEV, V. Data on internal gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data* 27 (1998), 657-706.
- [45] STRUCHTRUP, H. Heat transfer in the transition regime: solution of boundary value problems for Grad's moment equations via kinetic schemes. *Physical Review E* 65 (2002), 1-16.
- [46] THOMAS JR., J. R., CHANG, T. S., AND SIEWERT, C. E. Heat transfer between parallel plates with arbitrary surface accommodation, *Phys. Fluids* 16 (1973), 2116.
- [47] WANG CHANG, C. S., AND UHLENBECK, G. E. On the propagation of sound in monoatomic gases. *Project M999, Engineering Research Institute, University of Michigan*, (1952).
- [48] WELANDER, P. On the temperature jump in a rarefied gas. *Ark. Fys.* 7 (1954), 507-553.
- [49] 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.

- [50] WILLIAMS, M. M. R., *Mathematical Methods in Particle Transport Theory*.  
Butterworth, London, 1971.

## ANEXO A O PROCEDIMENTO DE GROSS-JACKSON

Neste anexo, será apresentado um método de construção de modelos cinéticos proposto por Gross e Jackson [24]. O procedimento foi desenvolvido para um processo de colisão de acordo com a lei de moléculas de Maxwell e se baseia em uma aproximação do termo de espalhamento na forma usada para esferas rígidas.

### A.1 Propriedades do operador de Boltzmann

Referências como o trabalho [12] e o livro [14], ambos de Cercignani, podem ser consideradas básicas na descrição de aspectos teóricos e propriedades matemáticas associadas à ELB. No entanto, segue-se Gross e Jackson [24] e escreve-se o operador de colisão da ELB da forma

$$J'(\phi) = \pi^{-3/2} \int \int \int (\phi_1 + \phi'_1 - \phi - \phi') e^{-c'^2} g \sin\theta I(g, \theta) d\theta d\epsilon d\mathbf{c}', \quad (\text{A.1})$$

onde  $\mathbf{c}$  é a velocidade molecular,  $I(g, \theta)$  é a seção de choque diferencial e  $g = |\mathbf{c} - \mathbf{c}'|$ . Chapman e Cowling [16] provaram que esse operador pode ser escrito como

$$J'(\phi) = -\nu(c)\phi(\mathbf{c}) - \int K(\mathbf{c}', \mathbf{c})\phi(\mathbf{c}')e^{-c'^2} d\mathbf{c}', \quad (\text{A.2})$$

onde o núcleo de colisão  $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  é uma função simétrica em relação a  $\mathbf{c}'$  e  $\mathbf{c}$ , isto é,

$$K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = K(\mathbf{c}, \mathbf{c}'). \quad (\text{A.3})$$

Nota-se aqui que, para simplificar a notação, as integrais do tipo presente na Eq. (A.2) representam uma integral tripla sobre as componentes do vetor velocidade  $\mathbf{c}'$ . Assim

$$\int d\mathbf{c}' = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dc'_x dc'_y dc'_z \quad (\text{A.4})$$

no caso de coordenadas retangulares, por exemplo. Seguindo Gross e Jackson [24] novamente, devido a simetria do núcleo  $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  usa-se a função

$$\Phi(\mathbf{c}) = \pi^{-3/4} e^{-c^2/2} \phi(\mathbf{c}) \quad (\text{A.5})$$

e reescreve-se a Eq. (A.2) como

$$J(\Phi) = -\nu(c)\Phi(\mathbf{c}) - \int K(\mathbf{c}', \mathbf{c})\Phi(\mathbf{c}')e^{-(c'^2+c^2)/2}d\mathbf{c}'. \quad (\text{A.6})$$

Para o desenvolvimento do procedimento de construção de modelos cinéticos, usa-se algumas propriedades do operador de colisão que independem da forma de interação entre partículas. Assim, as autofunções  $\Psi_i$  e os autovalores  $\lambda_i$  do operador de colisão são definidos como

$$J(\Psi_i) = \lambda_i\Psi_i, \quad (\text{A.7})$$

onde  $J(\Psi_i)$  é dado pela Eq (A.6). Como as colisões devem conservar número, momento e energia das partículas, o operador de colisão possui então o autovalor degenerado  $\lambda=0$  com multiplicidade cinco. Ainda, as autofunções podem ser escritas da forma separável

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{c}) = g_{nl}(c)Y_l^m(\theta, \zeta), \quad (\text{A.8})$$

onde  $\theta$  e  $\zeta$  são os ângulos de  $\mathbf{c}$  com relação aos eixos cartesianos e  $Y_l^m(\theta, \zeta)$  são os harmônicos esféricos normalizados

$$Y_l^m(\theta, \zeta) = \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta)e^{im\zeta}, \quad (\text{A.9})$$

que satisfazem

$$\int Y_l^m Y_{l'}^{m'} \sin\theta d\theta d\zeta = \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \quad (\text{A.10})$$

Expressões explícitas para as funções  $g_{nl}(c)$  são conhecidas para o caso de moléculas que se repelem com a quinta lei de força inversa, isto é, para moléculas de Maxwell. Neste caso, duas moléculas a uma distância  $r$  se repelem com uma força de repulsão  $P$  dada por

$$P = \frac{\gamma}{r^5}. \quad (\text{A.11})$$

Para esse tipo de moléculas, as funções referidas são

$$g_{nl}(c) = \left[ \frac{2(n!)}{\Gamma(n+l+3/2)} \right]^{1/2} c^l L_n^{l+1/2}(c^2)e^{-c^2/2}, \quad (\text{A.12})$$

onde  $L_n^l(c^2)$  são os polinômios de Laguerre-Sonine e  $\Gamma(z)$  é a função gamma. As funções  $g_{nl}(c)$  satisfazem

$$\int_0^\infty g_{rl}(c)g_{nl}(c)c^2 dc = \delta_{nr} \quad (\text{A.13})$$



e os polinômios de Laguerre-Sonine são dados explicitamente por [47]

$$L_n^l(x) = \sum_{p=0}^n \frac{(n+l)!}{p!(n-p)!(l+p)!} (-x)^p. \quad (\text{A.14})$$

Assim, os três primeiros polinômios de Laguerre-Sonine avaliados em  $c^2$  são

$$L_0^{l+1/2}(c^2) = 1, \quad (\text{A.15})$$

$$L_1^{l+1/2}(c^2) = l + \frac{3}{2} - c^2 \quad (\text{A.16})$$

e

$$L_2^{l+1/2}(c^2) = \frac{1}{2} \left( l + \frac{3}{2} \right) \left( l + \frac{5}{2} \right) - \left( l + \frac{5}{2} \right) c^2 + \frac{1}{2} c^4. \quad (\text{A.17})$$

Pelo fato de um sistema completo de autofunções ser conhecido para moléculas de Maxwell [24], o correspondente operador  $J(\Phi)$  é de particular interesse. Segundo Wang Chang e Uhlenbeck [47], para esse tipo de moléculas, a expressão

$$gI(g, \theta) \quad (\text{A.18})$$

é independente de  $g$  e pode ser escrita como

$$gI(g, \theta) = \left( \frac{\gamma}{kT_0} \right)^{1/2} F(\theta), \quad (\text{A.19})$$

onde  $k$  é a constante de Boltzmann,  $T_0$  é a temperatura de referência,  $\gamma$  é a contante de força da Eq. (A.11) e a função  $F(\theta)$  é definida na Ref. [47]. Devido a essa característica da seção de choque diferencial, Gross e Jackson [24] definem o operador Maxwelliano como

$$J_M(\Phi) = \left( \frac{kT_0}{\gamma} \right)^{1/2} J(\Phi), \quad (\text{A.20})$$

onde  $J(\Phi)$  é dado pela Eq. (A.6). Ainda seguindo a Ref. [24], esse operador pode ser escrito na forma da Eq. (A.6) como

$$J_M(\Phi) = -A_0 \Phi(\mathbf{c}) - \int K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) \Phi(\mathbf{c}') e^{-(c'^2 + c^2)/2} d\mathbf{c}', \quad (\text{A.21})$$

onde [47]

$$A_0 = 2\pi \int_0^\pi F(\theta) \text{sen } \theta d\theta, \quad (\text{A.22})$$

$$K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \pi^{-3/2} A_0 - 4\pi^{-1/2} \int_0^\pi \cos(\theta/2) \operatorname{cosec}^2(\theta/2) [F(\theta) + F(\pi - \theta)] \times \\ J_0[-2icc' \operatorname{sen}(\eta') \cot(\theta/2)] e^{-(c-c')^2 \cot^2(\theta/2)} d\theta, \quad (\text{A.23})$$

e  $\eta'$  é o ângulo entre  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{c}'$ . Ainda seguindo a Ref. [24], a constante  $A_0$  é infinita, mas a Eq. (A.21) é finita. Além disso, Wang Chang e Uhlenbeck [47] provaram que o núcleo de colisão  $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  dado pela Eq. (A.23) pode ser escrito como

$$K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \sum_{l=0}^{\infty} G_l(c, c') P_l(\cos \eta'), \quad (\text{A.24})$$

onde

$$G_l(c, c') = \pi^{-3/2} A_0 \delta_{l0} - \frac{2(2l+1)}{(cc')^{1/2}} i^{l+1/2} \int_0^\pi \cos^{1/2}(\theta/2) \operatorname{cosec}(\theta/2) P_l(\cos(\theta/2)) \times \\ [F(\theta) + F(\pi - \theta)] J_{l+1/2}[-2icc' \cot(\theta/2) \operatorname{cosec}(\theta/2)] e^{-(c^2+c'^2) \cot^2(\theta/2)} d\theta. \quad (\text{A.25})$$

Usando a função bilinear de Lebedeff geradora dos polinômios de Laguerre

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\Gamma(n + \alpha + 1)} L_n^\alpha(x) L_n^\alpha(y) z^n = \\ \frac{(xyz)^{-\alpha/2}}{1-z} e^{-z(x+y)/(1-z)} e^{i\alpha\pi/2} J_\alpha \left( 2 \frac{(xyx)^{1/2}}{1-z} e^{-i\pi/2} \right), \quad |z| < 1 \quad (\text{A.26})$$

e fazendo  $z^{1/2} = \cos(\theta/2)$ ,  $x = c^2$ ,  $y = c'^2$  e  $\alpha = l + \frac{1}{2}$ , as funções  $G_l(c, c')$  podem ser escritas como

$$G_l(c, c') = -\frac{(2l+1)}{4\pi} e^{(c^2+c'^2)/2} \sum_{n=0}^{\infty} g_{nl}(c) g_{nl}(c') \lambda'_{nl}, \quad (\text{A.27})$$

onde

$$\lambda'_{nl} = 2\pi \int_0^\pi \operatorname{sen}(\theta) \cos^{2n+l}(\theta/2) P_l(\cos(\theta/2)) [F(\theta) - F(\pi - \theta)] d\theta - A_0 \delta_{n0} \delta_{l0}. \quad (\text{A.28})$$

Assim, a Eq. (A.21) pode ser escrita como

$$J_M(\Phi) = -A_0 \Phi(\mathbf{c}) + \int \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} g_{nl}(c) g_{nl}(c') \lambda'_{nl} P_l(\cos \eta') \Phi(\mathbf{c}') d\mathbf{c}'. \quad (\text{A.29})$$

Comparando a Eq. (A.29) com a Eq. (A.6), pode-se concluir que o núcleo de colisão do operador Maxwelliano é dado por

$$K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = -\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} g_{nl}(c) g_{nl}(c') \lambda'_{nl} P_l(\cos \eta') e^{(c^2+c'^2)/2}. \quad (\text{A.30})$$

Nota-se na Eq. (A.29) que a função  $\Phi(\mathbf{c})$  pode ser escrita como

$$\Phi(\mathbf{c}) = \int \delta(\mathbf{c} - \mathbf{c}')\Phi(\mathbf{c}')d\mathbf{c}', \quad (\text{A.31})$$

sendo que essa equação pode ser reescrita como

$$\Phi(\mathbf{c}) = \int \sum_{n,l,m=0}^{\infty} \Psi_{nlm}(\mathbf{c})\Psi_{nlm}(\mathbf{c}')\Phi(\mathbf{c}')d\mathbf{c}' \quad (\text{A.32})$$

ou ainda

$$\Phi(\mathbf{c}) = \int \sum_{n,l=0}^{\infty} g_{nl}(c)g_{nl}(c') \sum_{m=0}^{\infty} Y_l^m(\theta, \zeta)Y_l^m(\theta', \zeta')\Phi(\mathbf{c}')d\mathbf{c}'. \quad (\text{A.33})$$

Usando o teorema da adição dos harmônicos esféricos,

$$\Phi(\mathbf{c}) = \sum_{n,l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} \int g_{nl}(c)g_{nl}(c')P_l(\cos \eta')\Phi(\mathbf{c}')d\mathbf{c}'. \quad (\text{A.34})$$

Combinando as Eqs. (A.29) e (A.34) obtém-se para o operador Maxwelliano a expressão

$$J_M(\Phi) = \int \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(\cos \eta') \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_{nl}g_{nl}(c)g_{nl}(c')\Phi(\mathbf{c}')d\mathbf{c}', \quad (\text{A.35})$$

onde

$$\lambda_{nl} = \lambda'_{nl} - A_0. \quad (\text{A.36})$$

A Eq. (A.35) não está na forma proposta pela Eq. (A.6), mas é a expressão exata do operador Maxwelliano. O núcleo de colisão, embora não apareça explicitamente, é dado pela Eq. (A.30).

## A.2 Construção de modelos cinéticos

O operador de colisão dado pela Eq. (A.35) está associado à lei de interação de moléculas do tipo Maxwell. Entretanto, segundo Williams [50], para esse tipo de interação não é possível definir um livre caminho médio e uma frequência de colisão. Para resolver esse problema é introduzida uma aproximação desse modelo de colisão para o modelo de esferas rígidas. Para isso, combina-se as Eqs. (A.34) e (A.35) e escreve-se o operador Maxwelliano como

$$J_M(\Phi) = \lambda_{st}\Phi(\mathbf{c}) + \sum_{n,l=0}^{\infty} (\lambda_{nl} - \lambda_{st}) \frac{(2l+1)}{4\pi} \int P_l(\cos \eta')g_{nl}(c)g_{nl}(c')\Phi(\mathbf{c}')d\mathbf{c}', \quad (\text{A.37})$$

onde  $\lambda_{st}$  é um número ou, mais precisamente, um autovalor. Segundo Williams [50] novamente, este procedimento converte o operador de colisão Maxwelliano para a forma de esferas rígidas. Entretanto, a escolha de  $\lambda_{st}$  é arbitrária e, além disso, é necessário truncar o somatório na Eq. (A.37) de alguma maneira conveniente. Para isso, nota-se na Eq. (A.12) que as funções  $g_{nl}(c)$  podem ser separadas na forma de um produto entre um polinômio e um termo exponencial, isto é

$$g_{nl}(c) = p(c)e^{-c^2/2}, \quad (\text{A.38})$$

onde

$$p(c) = \left[ \frac{2(n!)}{\Gamma(n+l+3/2)} \right]^{1/2} c^l L_n^{l+1/2}(c^2) \quad (\text{A.39})$$

é um polinômio de grau  $(2n+l)$ . Por esse motivo, diz-se que as funções  $g_{nl}(c)$  são de ordem  $(2n+l)$ . Assim, desejando-se truncar a Eq. (A.37) de maneira que ela conserve apenas funções  $g_{nl}(c)$  de ordem menor ou igual a um certo  $N$  a ser escolhido livremente, o somatório deve conter apenas termos com índices  $n$  ou  $l$  tais que  $2n+l \leq N$ . Para a escolha do autovalor  $\lambda_{st}$ , Gross e Jackson [24] propoem  $\lambda_{st} = \lambda_{0N}$  e definem a  $N$ -ésima aproximação de  $J_M(\Phi)$  como

$$J_M^{(N)}(\Phi) = -\lambda_{0N} \left\{ \sum_{2n+l \leq N} \left( 1 - \frac{\lambda_{nl}}{\lambda_{0N}} \right) g_{nl}(c) \frac{(2l+1)}{4\pi} \int P_l(\cos \eta') g_{nl}(c') \Phi(\mathbf{c}') d\mathbf{c}' - \Phi(\mathbf{c}) \right\}. \quad (\text{A.40})$$

Fazendo  $N = 2$  na Eq. (A.40) pode-se construir a aproximação de segunda ordem  $J_M^{(2)}(\Phi)$ . Usando os autovalores dados pela Eq. (A.36)

$$\lambda_{00} = \lambda_{01} = \lambda_{10} = 0 \quad (\text{A.41})$$

e

$$\lambda_{02} = -2\pi \frac{3}{4} \int_0^\pi \text{sen}^3 \theta F(\theta) d\theta = -\frac{3}{4} A_2, \quad (\text{A.42})$$

onde

$$A_2 = 2\pi(0.4359), \quad (\text{A.43})$$

obtem-se

$$J_M^{(2)}(\Phi) = \frac{3}{4} A_2 \left\{ \pi^{-3/2} \int K_1(\mathbf{c}', \mathbf{c}) \Phi(\mathbf{c}') e^{-(c^2+c'^2)/2} d\mathbf{c}' - \Phi(\mathbf{c}) \right\}, \quad (\text{A.44})$$

onde

$$K_1(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + 2\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} + \frac{2}{3} \left( c'^2 - \frac{3}{2} \right) \left( c^2 - \frac{3}{2} \right). \quad (\text{A.45})$$

A expressão entre chaves na Eq. (A.44) equivale ao operador de colisão do modelo **BGK**. Segundo Gross e Jackson [24], essa aproximação trata corretamente a viscosidade mas não a condutividade térmica. Para corrigir isso, deve-se usar a terceira aproximação de  $J_M^{(N)}$ . Então, fazendo  $N=3$  na Eq. (A.40) e adicionando os autovalores necessários

$$\lambda_{03} = -\frac{9}{8}A_2 \quad \text{e} \quad \lambda_{11} = -\frac{1}{2}A_2, \quad (\text{A.46})$$

obtém-se

$$J_M^{(3)}(\Phi) = \frac{9}{8}A_2 \left\{ \pi^{-3/2} \int [K_1(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + K_2(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + K_3(\mathbf{c}', \mathbf{c})] \Phi(\mathbf{c}') e^{-(c^2+c'^2)/2} d\mathbf{c}' - \Phi(\mathbf{c}) \right\}, \quad (\text{A.47})$$

onde  $K_1(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  é como na Eq. (A.45),

$$K_2(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{4}{9}\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c} \left( c'^2 - \frac{5}{2} \right) \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) \quad (\text{A.48})$$

e

$$K_3(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{2}{3} \left[ (\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - \frac{1}{3}c'^2c^2 \right]. \quad (\text{A.49})$$

O termo entre chaves da aproximação de terceira ordem dada pela Eq. (A.47) foi chamado neste trabalho de "modelo **Gross-Jackson**". Segundo a Ref. [24], este modelo trata corretamente os primeiros 20 momentos de  $J_M(\Phi)$  e se mostra adequado para a maioria dos problemas em gases Maxwellianos.

Para contruir modelos com maiores ordens de aproximação, encontra-se em Williams [50] a Tabela A.1 para os autovalores  $\lambda_{nl}$  dados pela Eq. (A.36). Nessa tabela os autovalores estão divididos por  $-A_2/2$ .

Tabela A.1: Autovalores do operador de colisão de Maxwell

$n$	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$
0	0	0	3/2	9/4	2.808	3.274
1	0	1	7/4	2.354	2.864	3.318
2	1	3/2	2.014	2.500	2.952	
3	3/2	1.8420	2.238	2.646	3.064	
4	1.8420	2.106	2.428	2.780		
5	2.106	2.320	2.598			
6	2.320					

Para finalizar, nos trabalhos de Cheng e Loyalka [17] e Pan e Storvich [30] também é mencionado um procedimento de Gross-Jackson, mas em ambos ele aparenta ser diferente do apresentado na Ref. [24].