

Dissertação de Mestrado

**ESTUDO DA DINÂMICA DE UM GÁS
CONFINADO EM PLACAS
PARALELAS HETEROGÊNEAS
UTILIZANDO O MODELO S**

Letícia Oberoffer Stefenon

PPGMat

Santa Maria, RS, Brasil

2011

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
Programa de Pós-Graduação em Matemática

**ESTUDO DA DINÂMICA DE UM GÁS
CONFINADO EM PLACAS
PARALELAS HETEROGÊNEAS
UTILIZANDO O MODELO S**

Letícia Oberoffer Stefenon

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Dr. Rosenei Felipe Knackfuss, apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da UFSM, em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Matemática.

Santa Maria, RS, Brasil
2011

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada,
aprova a Dissertação de Mestrado

**ESTUDO DA DINÂMICA DE UM GÁS CONFINADO EM
PLACAS PARALELAS HETEROGÊNEAS UTILIZANDO
O MODELO S**

elaborada por
Letícia Oberoffer Stefenon

como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Matemática

COMISSÃO EXAMINADORA:

Rosenei Felipe Knackfuss, Prof. Dr.
(Orientador)

Janice Terezinha Reichert, Prof^a.Dr^a. (UFFS)

José Vanderlei Prestes Oliveira, Prof. Dr. (UFMS)

Santa Maria, 18 de maio de 2011.

Dedicatória

“À minha filha Danielly, meu amor maior que o infinito”

Epígrafe

*“A diferença entre o vencedor e o perdedor não é a força nem o conhecimento, mas
sim, a vontade de vencer.”*
(Vincent T. Lombard)

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a Deus por iluminar meus caminhos e estar sempre presente em minha vida.

À meus pais que sempre me deram oportunidade para estudar e incentivo para superar as dificuldades quando elas apareceram.

Agradeço ao meu orientador, professor Rosenei Knackfuss, por sua enorme paciência e dedicação, pelo seu entusiasmo e competência na condução deste trabalho.

À *Prof^a. Dr^a.* Carmen Vieira Mathias, pelo incentivo recebido desde o tempo da graduação.

Aos professores e colegas de mestrado pela convivência cordial e agradável. Em especial, à *Prof^a. Dr^a* Rosemaira Dalcin Copetti pelo carinho durante essa etapa de minha vida e ao colega Anderson Tres pelas discussões, estudos e apoio recebido.

À Universidade Federal de Santa Maria, ao PPGMat e a todos os amigos que conquistei durante esta jornada, que de uma forma ou de outra contribuíram para o meu sucesso.

Em especial, agradeço ao meu esposo Lucio e minha filha Danielly, que sempre me apoiaram durante essa caminhada, entendendo minha ausência e a falta de tempo.

Resumo

Neste trabalho, uma versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) é utilizada no desenvolvimento de soluções para problemas de gases rarefeitos confinados por duas placas paralelas infinitas com constituições químicas diferentes, isto é, sem a condição de simetria. A modelagem dos problemas (Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico) são realizados a partir dos modelos cinéticos **BGK** e **S**, derivados da equação linearizada de Boltzmann. A fim de descrever o processo de interação entre o gás e a superfície, utiliza-se o núcleo de Maxwell que apresenta um único coeficiente de acomodação e o núcleo de Cercignani-Lampis definido em termos dos coeficientes de acomodação do momento tangencial e o coeficiente de acomodação da energia cinética. Uma série de resultados são apresentados a fim de estabelecer uma comparação dos efeitos de superfície para os problemas apresentados.

Palavras-chave: Dinâmica de Gases Rarefeitos, Núcleo de Maxwell, Núcleo de Cercignani-Lampis, Método de Ordenadas Discretas.

Abstract

In this work, an analytical version of the method of discrete ordinates (ADO) is used in developing solutions to problems of rarefied gases confined by two infinite parallel plates with different chemical constitutions, that is, without the symmetry condition. The modeling of problems (Poiseuille Flow and Thermal Creep) are performed using the kinetic models of **BGK** and **S**, derived from the linearized Boltzmann equation. In order to describe the interaction between gas and surface, we use the core of Maxwell presenting a single accommodation coefficient and the Cercignani-Lampis core defined in terms of the coefficients of accommodation of tangential momentum and energy accommodation coefficient kinetics. A series of results are presented in order to establish a comparison of surface effects to the problems presented.

Keywords: Dynamics of rarefied gases, Maxwell Kernel, Cercignani-Lampis Kernel, discrete ordinates method.

Lista de Símbolos

a	Comprimento característico
\mathbf{c} e v	Vetores velocidade
$f_n(c', c)$	Componente do núcleo sintético de espalhamento
$f(r, v)$	Função distribuição de partículas
$f_0(c)$	Distribuição Maxwelliana absoluta
$\mathbf{F}(c', c)$	Núcleo sintético de espalhamento
$h(\xi, c)$	Perturbação causada a Maxwelliana absoluta
$I_0(w)$	Função de Bessel modificada
J	Operador de colisão Maxwelliana
$J(f', f)$	Integral de colisões
K_n	Número de Knudsen
$\mathbf{K}(c', c)$	Núcleo exato de espalhamento
k	Constante de Boltzmann
k_t	Gradiente de temperatura
k_p	Gradiente de pressão
m	Massa molecular de partícula gasosa
$n(t, r)$	Densidade
n_0	Densidade de equilíbrio
P_n	Polinômio de Legendre
P_n^m	Função normalizada de Legendre
P_{xz}	Componente do tensor pressão

p	Pressão
$q(\tau)$	Perfil de fluxo de calor
Q	Taxa de fluxo de calor
$r = (x, y, z)$	Vetor de coordenadas espaciais
R_{CL}	Núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis
R_{DE}	Núcleo de espalhamento Difuso-especular
$S(c)$	Termo de fonte
t	Tempo
$T(r, v)$	Temperatura
T_0	Temperatura constante
T_w	Temperatura da superfície
$u(\tau)$	Perfil de velocidade
U	Taxa de fluxo de partícula
w_k	Pesos da quadratura
α_t	Coefficiente de acomodação tangencial
α_n	Coefficiente de energia cinética
μ	Viscosidade
δ	Rarefação do gás
δ^*	Função de Dirac
$\delta_{n,n'}$	Delta de Kronecker
$\eta(c)$	Frequência de colisão das partículas
λ_*	Condutividade térmica
σ_0	Diâmetro de colisão das partículas gasosas
ξ_k	Pontos de quadratura
τ	Variável espacial adimensional

Abreviações

ADO	Versão Analítica do Método de Ordenadas Discretas
BGK	Modelo de Bhatnagar-Gross-Krook
DGR	Dinâmica de Gases Rarefeitos
ELB	Equação Linearizada de Boltzmann
GJ	Modelo de Gross-Jackson
MEMS	Sistemas Microeletromecânicos
MST	Microsistemas Tecnológicos

Lista de Tabelas

Tabela 7.1 Fluxo de Poiseuille; perfil de velocidade $u(\tau)$, $2a = 1$	72
Tabela 7.2 Fluxo de Poiseuille; perfil de fluxo de calor $q(\tau)$, $2a = 1$	72
Tabela 7.3 Fluxo de Poiseuille; Taxa de fluxo de partícula U	73
Tabela 7.4 Fluxo de Poiseuille; Taxa de fluxo de calor Q	74
Tabela 7.5 <i>Creep</i> Térmico; perfil de velocidade $u(\tau)$, $2a = 1$	75
Tabela 7.6 <i>Creep</i> Térmico; perfil de fluxo de calor $q(\tau)$, $2a = 1$	75
Tabela 7.7 <i>Creep</i> Térmico; Taxa de fluxo de partícula U	76
Tabela 7.8 <i>Creep</i> Térmico; Taxa de fluxo de calor Q	76

Lista de Figuras

Figura 1.1 Ludwig Boltzmann [21];	17
Figura 7.a Fluxo de Poiseuille, perfil de velocidade, modelo S, condições de contorno de Cercignani-Lampis utilizando a variação no α_n	76
Figura 7.b Fluxo de Poiseuille, perfil de velocidade, modelo S, condições de contorno de Cercignani-Lampis utilizando a variação no α_t	76
Figura 7.c Fluxo de Poiseuille, perfil de fluxo de calor, modelo S, condições de contorno de Cercignani-Lampis utilizando a variação no α_n	77
Figura 7.d Fluxo de Poiseuille, perfil de fluxo de calor, modelo S, condições de contorno de Cercignani-Lampis utilizando a variação no α_t	77
Figura 7.e Fluxo de Poiseuille, perfil de velocidade, modelo S, condições de contorno Difuso-especular utilizando a variação no α_t	78
Figura 7.f Fluxo de Poiseuille, perfil de fluxo de calor, modelo S, condições de contorno Difuso-especular utilizando a variação no α_t	78
Figura 7.g <i>Creep</i> Térmico, perfil de velocidade, modelo S, condições de contorno de Cercignani-Lampis utilizando a variação no α_n	78
Figura 7.h <i>Creep</i> Térmico, perfil de velocidade, modelo S, condições de contorno de Cercignani-Lampis utilizando a variação no α_t	78
Figura 7.i <i>Creep</i> Térmico, perfil de velocidade, modelo S, condições de contorno Difuso-especular utilizando a variação no α_t	79
Figura 7.j <i>Creep</i> Térmico, perfil de fluxo de calor, modelo S, condições de contorno Difuso-especular utilizando a variação no α_t	79
Figura 7.k Fluxo de Poiseuille, perfil de velocidade, modelo S, condições de contorno Cercignani-Lampis e Difuso-especular.....	80
Figura 7.l Fluxo de Poiseuille, perfil de fluxo de calor, modelo S, condições de contorno Cercignani-Lampis e Difuso-especular.....	80
Figura 7.m <i>Creep</i> Térmico, perfil de velocidade, modelo S, condições de contorno	

Cercignani-Lampis e Difuso-especular	80
Figura 7.n <i>Creep</i> Térmico, perfil de fluxo de calor, modelo S, condições de contorno	
Cercignani-Lampis e Difuso-especular	80

Sumário

Introdução	15
1 Conceitos da Dinâmica de Gases Rarefeitos	19
1.1 Número de Knudsen	19
1.2 Função de Distribuição	20
1.3 A equação de transporte de Boltzmann	22
1.3.1 Equação de Boltzmann Linear	23
1.4 Livre Caminho Médio	25
1.5 Interação Gás-Superfície	27
2 Modelos Cinéticos	31
2.1 Modelo BGK e Modelo S	33
3 Formulação Matemática do Problema	36
3.1 Formulação geral	36
3.1.1 Modelo BGK	36
3.1.2 Modelo S	38
3.2 Problemas Clássicos	40
3.2.1 Fluxo de Poiseuille	40
3.2.2 Problema <i>Creep</i> Térmico	40
4 Grandezas Físicas	42
5 Solução em Ordenadas Discretas	44
5.1 Solução particular	44
5.2 Solução em Ordenadas Discretas	46
5.2.1 Modelo BGK	46

5.2.2	Modelo S	51
6	Solução através das Condições de Contorno	56
6.1	Núcleo de Maxwell (Difuso-especular)	58
6.2	Núcleo de Cercignani-Lampis	60
6.3	Quantidades de Interesse	63
6.3.1	Núcleo Difuso-Especular	63
6.3.2	Núcleo Cercignani-Lampis	66
7	Resultados Numéricos	70
7.1	Fluxo de Poiseuille	71
7.2	<i>Creep</i> Térmico	74
	Conclusão	82
	Referências Bibliográficas	83

Introdução

A Dinâmica de Gases Rarefeitos (DGR), tem por objetivo o estudo de fenômenos relacionados ao escoamento de gases em sistemas com comprimento característico da mesma ordem de grandeza do livre caminho médio das moléculas de gás. A base da (DGR) é a Teoria Cinética dos Gases [18, 19, 29, 35, 40] que determina as propriedades macroscópicas de um gás através do estado do sistema formado pelas moléculas que o compõem utilizando a equação proposta por Ludwig Boltzmann [8]. A pesquisa em Dinâmica de Gases Rarefeitos teve início por volta de 1879, através de estudos realizados por James Clerk Maxwell [7] devido a necessidade de aplicação da equação de Boltzmann a problemas onde a natureza molecular da matéria não pode ser desprezada.

Um dos fatores que motivaram o desenvolvimento de pesquisas envolvendo a dinâmica de gases rarefeito é a diversidade de aplicações que essa área contempla, como por exemplo, o estudo de fluxo de gases em microcanais.

Atualmente, os microsistemas são utilizados em diversas áreas [50], que incluem medicina, aviação, meteorologia, telecomunicação, tecnologia de computadores, robótica, engenharia, entre outras.

Expressões do tipo: sistemas microeletromecânicos (MEMS) e microsistemas tecnológicos (MST) têm sido muito utilizadas para caracterizar o modelo e a metodologia no processo envolvendo microcomponentes. Em se tratando de microsistemas, grande parte incluem, inevitavelmente, fluxo de fluido. Quando se trabalha com fluxos em micro ou menores configurações, observa-se muitos fenômenos [33] como o fator de fricção e a viscosidade aparente dos fluidos em microcanais [46, 47]. Devido a importância dos (MEMS) e (MST), países como Estados Unidos e Japão estão cada vez mais investindo em programas de pesquisas relacionadas a essa área.

Em simulações numéricas devido a pequena escala de comprimento característico, tem-se fluxos que não podem ser modelados pela equação de Navier-Stokes, princi-

palmente em (MEMS). Neste caso, a equação de Boltzmann passa a ser considerada de grande importância para calcular e compreender o fluxo nesses dispositivos [19, 20, 22].

Os problemas de dinâmica de gases são resolvidos baseados no estado de rarefação do gás [60], este estado é classificado pelo número de Knudsen (Kn), um parâmetro essencial em (DGR), conforme será abordado adiante neste trabalho. O ponto fundamental da (DGR) encontra-se na equação de Boltzmann, pois em diversos casos o número de Knudsen assume um valor intermediário e o gás está em regime de transição e as equações de Navier-Stokes não podem ser aplicadas [77]. Na literatura tem-se, nesse contexto, o livro de Cercignani [19, 20] na área da dinâmica de gases, bem como o trabalho de Sharipov e Seleznev [60] que fornece uma ampla revisão e fonte de dados úteis na comparação de diversos métodos computacionais e formulações matemáticas básicas nessa área.

A equação de Boltzmann foi desenvolvida para descrever a dinâmica do gás ideal. A chamada equação de transporte de partículas pode ser expressa através de três formas [30], a forma íntegro-diferencial, a forma integral e a forma integral de superfície [51]. Quando se trata da equação de transporte íntegro-diferencial pode-se dizer que ela fornece uma descrição quantitativa da distribuição espacial, direcional, energética e temporal de partículas gasosas em meios materiais.

Assim, a equação de Boltzmann interpreta como um gás transporta determinadas quantidades físicas tais como calor e massa. A mesma foi introduzida no fim do século XIX por Ludwig Boltzmann (fig.1), em seus estudos pioneiros da teoria cinética de gases [8], no entanto, foi estudada de forma mais intensa no início dos anos 60 com o objetivo de resolver problemas de fluxo de gases rarefeitos. Apesar dos vários estudos, a resolução de problemas de fluxo via equação de Boltzmann não é fácil devido a presença da integral de colisões, mesmo utilizando-se de métodos semi-analíticos ou puramente numéricos.

Cabe ressaltar que a teoria desenvolvida para a Equação de Boltzmann é de grande importância em fenômenos de transporte, abrangendo teoria cinética, mecânica dos fluidos e mecânica estática [48].

Por ser uma equação não linear e muito complexa de ser resolvida, mesmo com o grande avanço tecnológico, simplifica-se a integral de colisões por ser a responsável pela dificuldade na resolução da equação de Boltzmann, através de uma função de distribuição Maxwelliana local. As equações aproximadas conservam as características



Figura 1: Ludwing Boltzmann [21]

físicas fundamentais como os princípios de conservação de massa, momento e energia do processo de colisão da equação exata de Boltzmann, além de reduzir de maneira significativa o esforço computacional. A expressão que simplifica a integral de colisão é chamada de modelo de colisão, enquanto a equação aproximada é considerada equação cinética ou equação modelo.

É possível resolver a equação de Boltzmann com a integral de colisão original mas a mesma se restringe na utilização de modelos simples de interação intermolecular e esferas rígidas que podem ser vistas em trabalhos existentes na literatura [8, 79, 81].

A idéia de uma equação modelo foi introduzida por Bhatnagar, Gross e Krook (**BGK**) [6]. Posteriormente, surgiram outros modelos para serem utilizados em problemas clássicos relacionados a dinâmica de gases rarefeitos, dentre eles, o modelo **S**, proposto por Shakhov [57], o modelo Gross-Jackson(**GJ**) [32], o modelo **MRS** [31], o modelo **CLF** [16, 42], os modelos **CES** e **CEBS** [5].

Os modelos **BGK** e **S**, que serão abordados neste trabalho, caracterizam-se por apresentar a frequência de colisão das partículas de gás, constante. O estudo teórico de problemas clássicos da (DGR) que modelam escoamentos de gases em canais planos (fluxo de Poiseuille, fluxo de Couette, Creep-térmico,...) é de extrema importância no surgimento de novos modelos matemáticos bem como no desenvolvimento de novas técnicas computacionais.

No que diz respeito a métodos determinísticos, vários métodos são apresentados na literatura, dentre eles, enfatiza-se o método de solução aproximado *two-stream* [53, 56], o método dos harmônicos esféricos [34], o método de ordenadas discretas [23, 80], a versão analítica do método de ordenadas discretas [2, 64], o método de velocidades discretas [61] e o método Case [13] que é um método exato de solução,

sendo válido em casos onde o termo integral é bem simples.

Neste trabalho, aplica-se uma versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO), que consiste em aproximar o termo integral da equação de transporte íntegro-diferencial por uma fórmula de quadratura, transformando a equação em um sistema de equações algébricas que pode ser resolvido de maneira analítica. Devido a possibilidade da construção de soluções unificadas para diferentes modelos cinéticos, a versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) é de muita utilidade na resolução de vários problemas de dinâmica de gases rarefeitos.

Aplica-se o método (ADO) para resolver de maneira unificada os problemas de Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico que aqui são derivados segundo os modelos **BGK** e **S**. Considera-se um gás confinado entre placas paralelas com constituições químicas diferentes, ou seja, tem-se a não-simetria das placas. Tendo em vista uma análise mais detalhada dos efeitos de superfície na dinâmica de gases rarefeitos os problemas serão relativos às condições de contorno propostas por Cercignani-Lampis [17] e Maxwell [77]. As condições de contorno propostas por Cercignani-Lampis modelam a acomodação considerando diferentes propriedades físicas [66], por apresentar dois coeficientes de acomodação na qual a quantidade α_n descreve o coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal e α_t representa o coeficiente de acomodação do momento tangencial, diferentemente das condições de contorno de Maxwell que apresentam apenas um coeficiente de acomodação, tornando o uso das condições de contorno propostas por Cercignani-Lampis mais precisas.

Desta forma, este trabalho foi estruturado da seguinte forma:

No capítulo 1 apresenta-se conceitos básicos para o desenvolvimento deste trabalho e a equação de Boltzmann linearizada. O capítulo 2 trata da formulação do modelo cinético utilizado. No capítulo 3 apresenta-se a formulação dos problemas propostos. O capítulo 4 refere-se às grandezas físicas de interesse a qual deseja-se encontrar. No capítulo 5 tem-se a solução em ordenadas discretas. O capítulo 6 apresenta a solução através das condições de contorno do tipo Difuso-especular e Cercignani-Lampis bem como os resultados para as quantidades de interesse. No capítulo 7 apresenta-se os resultados numéricos para as grandezas macroscópicas dos problemas de Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico.

Capítulo 1

Conceitos da Dinâmica de Gases Rarfeitos

Neste capítulo será apresentado, de forma resumida, alguns conceitos básicos da dinâmica de gases, utilizados no desenvolvimento deste trabalho e importante para o entendimento dos próximos capítulos.

1.1 Número de Knudsen

Um dos principais parâmetros utilizados na Dinâmica de Gases Rarfeitos é o número de Knudsen, K_n , que caracteriza a rareação do gás [60, 77], sendo definido pela razão entre o livre caminho médio molecular, λ , e um comprimento característico do escoamento a [78], ou seja,

$$K_n = \frac{\lambda}{a} \quad (1.1)$$

De acordo com o valor que o parâmetro K_n assume pode-se dividir o regime de escoamento do fluxo gasoso em três tipos:

(i) Regime hidrodinâmico ($K_n \leq 10^{-2}$): esse regime é caracterizado por apresentar o livre caminho médio muito menor que o comprimento característico do escoamento e, conseqüentemente, o meio gasoso é considerado contínuo, onde as equações de Navier-Stokes são aplicadas.

(ii) Regime de moléculas livres ($K_n \geq 10$): esse regime apresenta o livre caminho médio muito maior que o comprimento característico do escoamento, dessa forma,

as partículas gasosas se chocam com menor frequência que as colisões das partículas com a superfície sólida que delimita o fluxo do gás. Considerando o movimento das partículas independente, a interação gás-superfície pode ser desprezada.

(iii) Regime de transição ($10^{-2} < K_n < 10$): este regime é caracterizado por apresentar o número de Knudsen não muito pequeno e nem muito grande, onde não se pode desprezar a interação entre as partículas e nem considerar o meio como um contínuo. Nesse regime, o livre caminho médio e o tamanho característico do escoamento possuem a mesma ordem de grandeza. Nesse caso, as equações de Navier-Stokes não podem ser utilizadas, dessa forma, necessita-se formulações com base na equação de Boltzmann ou equações cinéticas (modelos), sendo que estas apresentam maior complexidade no estudo dos fluxos gasosos.

Alguns autores [7], definem outro regime de escoamento intermediário aos regimes hidrodinâmico e de transição, o qual chama-se regime de deslizamento. Esse regime é uma extensão do regime hidrodinâmico onde ainda pode-se utilizar as equações de Navier-Stokes para encontrar a solução da equação cinética, porém ela é válida desde que as condições de contorno na interface gás-sólido sejam utilizadas. Tem-se que o intervalo do número de Knudsen nesse regime é $10^{-2} \leq K_n \leq 10^{-1}$.

1.2 Função de Distribuição

Através do sistema formado pelas moléculas que compõe um gás, a Teoria Cinética tem o objetivo de determinar as propriedades do mesmo. O estado de um sistema de partículas é determinado em qualquer instante t se a velocidade (\mathbf{v}) e a posição (\mathbf{r}) de cada partícula gasosa for conhecida neste instante.

O número de partículas da qual o gás é composto, é muito grande, logo considera-se que o estado do sistema de partícula é descrito em termos da uma função de distribuição $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ que satisfaz um sistema de equações acopladas baseadas na Equação de Boltzmann, portanto a função de distribuição contém informações sobre a distribuição de velocidade e espacial das partículas do gás em estudo em qualquer instante t .

Assim, as propriedades macroscópicas como temperatura, pressão e velocidade do gás são determinadas através da função de distribuição $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$. Todas as características expressas podem ser encontradas em [29, 60].

A expressões para as macrocaracterísticas do gás podem ser calculadas através da função de distribuição como:

Velocidade:

$$u(t, r) = \frac{1}{n(r)} \int V_z f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) dv \quad (1.2)$$

Tensor pressão:

$$P_{xz} = m \int V_x V_z f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) dv \quad (1.3)$$

Fluxo de calor:

$$q(t, r) = \frac{m}{2} \int V^2 V f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) dv \quad (1.4)$$

Temperatura:

$$T(r, v) = \frac{m}{3nk} \int V^2 f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) dv \quad (1.5)$$

Densidade:

$$n(t, r) = \int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) dv \quad (1.6)$$

onde m é a massa molecular, k é a constante de Boltzmann e V é a velocidade.

Calcula-se a pressão como valor médio dos termos diagonais do tensor pressão

$$p = \frac{1}{3}(P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}). \quad (1.7)$$

1.3 A equação de transporte de Boltzmann

A equação de Boltzmann é uma equação íntegro-diferencial não linear que objetiva determinar uma evolução na função de distribuição, ou seja, a função de distribuição de um determinado gás deve satisfazer a equação de Boltzmann não linear [11, 18, 22, 24, 29, 40].

Vários estudos na dinâmica de gases rarefeitos são realizados através da equação íntegro-diferencial, quando as equações de Navier-Stokes não podem ser utilizadas [60] que é o caso quando tem-se um regime de transição, utiliza-se a equação de Boltzmann não linear [19] que é expressa como

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial r} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = J(f', f) \quad (1.8)$$

onde $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ é a função de distribuição, $r = (x, y, z)$ é o vetor de coordenadas espaciais, $v = (v_x, v_y, v_z)$ é o vetor velocidade das partículas, t é o tempo e $J(f', f)$ é a integral de colisões dada por

$$J(f', f) = \int w(v, v_*; v', v'_*) (f' f'_* - f f'_*) dv' dv'_* dv_* \quad (1.9)$$

aqui (v', v'_*) corresponde a velocidade antes das colisões e (v, v_*) a velocidade após as colisões de duas partículas gasosas.

A integral de colisão expressa a taxa de variação temporal da função de distribuição devido as colisões moleculares. A quantidade $w(v, v_*; v', v'_*)$ é a função frequência de espalhamento diferencial para uma colisão binária (ou de duas partículas de gás).

A presença da integral de colisões J acarreta grande dificuldade na resolução da equação de Boltzmann, devido a isto, foram desenvolvidos vários métodos analíticos a fim de facilitar a resolução desta equação, como por exemplo, método dos momentos de Grad [11, 18, 40] e método de Chapman-Enskog [11, 18, 24]. No entanto, os resultados obtidos por estes métodos fornecem resultados aproximados que são válidos somente no regime hidrodinâmico, ou seja, $K_n \ll 10^{-2}$.

Com o objetivo de considerar todo o intervalo do número de Knudsen, surgiu a possibilidade de simplificar a integral de colisões utilizando-se um modelo matemático para essa integral. No entanto, cabe ressaltar que esse modelo matemático ou modelo cinético deve conservar as propriedades fundamentais da integral de colisão original,

todos os coeficientes de transporte como condutividade térmica, viscosidade, velocidade, devem ser fornecidos de maneira correta e a integral de colisões deve ser nula no estado de equilíbrio.

Quando a integral de colisões é substituída por um modelo cinético, a equação de Boltzmann passa a ser chamada de equação modelo ou equação cinética.

Cabe destacar que é possível resolver a equação de Boltzmann com a integral de colisões exata, mas mesmo com o avanço tecnológico, ainda existe um grande esforço computacional.

Pode-se encontrar na literatura [72, 79] trabalhos nos quais a equação de Boltzmann é resolvida com a integral de colisões original mas estes, se restringem somente a utilização do modelo mais simples de interação molecular. Assim, torna-se indispensável a utilização de modelos cinéticos em cálculos práticos que envolvem a solução da equação de Boltzmann por apresentarem menor esforço computacional e ao mesmo tempo resultados experimentais satisfatórios.

1.3.1 Equação de Boltzmann Linear

Neste trabalho, utiliza-se a equação linearizada de Boltzmann unidimensional e no estado estacionário, logo para soluções fracas, situações em que o estado do gás é fracamente removido do seu estado de equilíbrio f_0 , de acordo com Williams [76] escreve-se a função de distribuição na forma

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})[1 + h(\mathbf{r}, \mathbf{v})] \quad (1.10)$$

onde h representa uma pequena perturbação ($|h| \ll 1$) causada à distribuição Maxwelliana local $f_0(r, v)$ pelo fato de conter uma superfície delimitando o gás.

Segundo Williams [76] pode-se escrever a Maxwelliana local $f_0(r, v)$ de uma maneira mais geral como

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = n_\infty(r) \left[\frac{m}{2\pi k T_\infty(r)} \right]^{3/2} \exp \left[- \frac{m[v_x^2 + v_y^2 + [v_z - u_1(x)]^2]}{2k T_\infty(r)} \right] \quad (1.11)$$

onde $\mathbf{r} = (\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ é o vetor de coordenadas espaciais, m é a massa molecular, k é a constante de Boltzmann, $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_x, \mathbf{v}_y, \mathbf{v}_z)$ é o vetor velocidade, n_∞ é a densidade e T_∞ é a temperatura.

Considera-se que as funções n , T , e u são lineares de x, y e z como segue

$$n_\infty(x, z) = n_0(1 + R_x x + R_z z) \quad (1.12)$$

$$T_\infty(x, z) = T_0(1 + K_x x + K_z z) \quad (1.13)$$

e

$$u(x) = Kx, \quad (1.14)$$

onde n_0 é a densidade de equilíbrio das partículas de gás, T_0 é a temperatura constante de referência, K é um gradiente de velocidade na direção x , R_i e K_i são gradientes de densidade e temperatura na direção i , respectivamente.

Seguindo Williams [76, 77] e partindo da Eq.(1.10), a função de distribuição será determinada em termos da perturbação h . Para isso, substitui-se a linearização dada pela Eq.(1.10) na Eq.(1.8). Deve-se considerar as propriedades simétricas da função frequência de espalhamento diferencial para a colisão entre dois corpos [12, 76] e faz-se a adimensionalização da forma

$$c = v \left[\frac{m}{2kT_0} \right]^{1/2} \quad (1.15)$$

e

$$K_0 = K \left[\frac{m}{2kT_0} \right]^{1/2} \quad (1.16)$$

onde v é a magnitude da velocidade da partícula. Desta forma, obtém-se a equação balanço

$$S(c) + C_y \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, c) = \sigma_0^2 \eta_0 \pi^{1/2} \mathcal{L} \{h\}(\tau, c) \quad (1.17)$$

onde σ_0 é o diâmetro de colisão das partículas de gás [5], $S(c)$ é o termo de fonte que é definido para cada problema e o operador de colisão é descrito por

$$\mathcal{L} \{h\}(\tau, c) = -\eta(c)h(\tau, c) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} F(c', c) h(\tau, c') dc_z dc_y dc_x \quad (1.18)$$

onde τ é a variável espacial, $\mathbf{F}(c', c)$ é chamado núcleo de espalhamento e $\eta(c)$ é a

frequência de colisão das partículas dada por

$$\eta(c) = \frac{2c^2 + 1}{c} \int_0^c e^{-x^2} dx + e^{-c^2}. \quad (1.19)$$

Assim, pode-se reescrever a Eq.(1.8) na forma

$$C_y \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, c) + \epsilon h(\tau, c) = \epsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, c) \mathbf{F}(c' : c) dc'_x dc'_y dc'_z + S(c) \quad (1.20)$$

onde

$$\epsilon = \sigma_0^2 \eta_0 \pi^{1/2} l \quad (1.21)$$

e

$$\mathbf{F}(c' : c) = 1 + 2(c' \cdot c) + (2/3)(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2) + \beta \mathbf{M}(c', c) + \varpi \mathbf{N}(c', c) \quad (1.22)$$

com

$$\mathbf{M}(c' : c) = (4/15)(c' \cdot c)(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2) \quad (1.23)$$

e

$$\mathbf{N}(c' : c) = 2(c' \cdot c)^2 - (2/3)c'^2 c^2 \quad (1.24)$$

Os parâmetros dependem do modelo a ser trabalhado, para o modelo **BGK** tem-se $\beta = \varpi = 0$, para o modelo **S** os parâmetros assumem os seguintes valores $\beta = 1$ e $\varpi = 0$.

1.4 Livre Caminho Médio

O Livre Caminho Médio representa a distância média percorrida por uma partícula gasosa antes de sofrer uma colisão. Introduzindo a variável adimensional $\tau = y^*/l$ pode-se escrever a Eq.(1.20) na versão homogênea como

$$c_y \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, c) = \epsilon \mathcal{L} \{h\}(\tau, c), \quad (1.25)$$

com

$$\epsilon = \sigma_0^2 \eta_0 \pi^{1/2} l \quad (1.26)$$

onde σ_0 é o diâmetro das partículas do gás e ν_0 é a densidade (constante) das partículas gasosas.

Na literatura, o livre caminho médio é definido em função da viscosidade e da condutividade térmica, dependendo do tipo de problema que está sendo trabalhado. Tem-se, por exemplo, para o problema de Poiseuille, segundo Loyalka e Hickey [44], o livre caminho médio definido em termos da viscosidade μ é dado por

$$l = l_p = \left(\frac{\mu_*}{p_0} \right) (2kT_0 m)^{1/2}. \quad (1.27)$$

Segundo Loyalka e Ferziger [42], o livre caminho médio definido em termos da condutividade térmica λ_* é dado por

$$l = l_t = \left[\frac{4\lambda_*}{(5\eta_0 k)} \right] \left[\frac{m}{(2kT_0)} \right]^{1/2}, \quad (1.28)$$

onde $p_0 = \eta k T_0$ é a pressão, m é a massa molecular, k é a constante de Boltzmann e T_0 é a temperatura constante.

Tem-se ainda, definido por Pekeris e Alterman [45], a viscosidade como

$$\mu_* = \frac{8(2mkT_0)^{1/2}}{15\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2} b(c) c^6 dc, \quad (1.29)$$

e a condutividade térmica da forma

$$\lambda_* = \frac{4k(2kT_0/m)^{1/2}}{3\pi\sigma_0^2} \int_0^\infty e^{-c^2} a(c) c^6 dc, \quad (1.30)$$

onde nas equações (1.29) e (1.30), as funções $b(c)$ e $a(c)$ são soluções da equação de Chapman-Enskog para a viscosidade e condutividade térmica, respectivamente, estas devem satisfazer equações integrais da forma

$$\eta(c) c^2 b(c) - \int_0^\infty e^{-c'^2} b(c') k_2(c', c) c'^4 dc' = c^2 \quad (1.31)$$

e

$$\eta(c)c^2ca(c) - \int_0^\infty e^{-c^2} a(c')k_1(c', c)c'^3 dc' = c(c^2 - 5/2) \quad (1.32)$$

com a condição de normalização

$$\int_0^\infty e^{-c^2} a(c)c^4 dc = 0. \quad (1.33)$$

Logo, obtém-se, substituindo as equações (1.27),(1.29) e (1.31) na equação (1.26) em termos da viscosidade

$$\epsilon = \epsilon_p = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2b(c)} c^6 dc, \quad (1.34)$$

e substituindo as equações (1.28), (1.30) e (1.32) na equação (1.26), obtém-se em termos da condutividade térmica

$$\epsilon = \epsilon_t = \frac{16}{15}\pi^{-1/2} \int_0^\infty e^{-c^2a(c)} c^6 dc. \quad (1.35)$$

As expressões para ϵ_p e ϵ_t dependem do modelo cinético utilizado, para obter os resultados numéricos.

Conforme Barichello e Siewert [5], tem-se que as equações (1.34) e (1.35) produzem para o modelo **S**, $\epsilon_p = 1$ e $\epsilon_t = \frac{3}{2}$.

1.5 Interação Gás-Superfície

O estudo da interação gás-superfície é de grande importância na Dinâmica dos Gases Rarefeitos, pois frequentemente os gases estão limitados por superfícies, as quais impõem condições de contorno à função de distribuição.

Geralmente, a função de distribuição é dada através do núcleo de espalhamento $R(v' : v)$ [19] como

$$|v_n|f(v) = \int_{v'_n < 0} |v'_n|R(v' : v)f(v')dv', v_n > 0 \quad (1.36)$$

onde v' é a velocidade molecular das partículas de incidência e v é a velocidade molecular das partículas de reflexão, $v_n = v \cdot n$ é a componente normal da velocidade v e n é o vetor normal à superfície.

No entanto, o núcleo de espalhamento $R(v' : v)$ deve satisfazer algumas propriedades como: condição de normalização

$$\int_{v'_n < 0} R(v' : v) dv = 1, \quad (1.37)$$

e relação de reciprocidade [18]

$$|v'_n| \exp\left(-\frac{mv'^2}{2kT_w}\right) R(v' : v) = |v_n| \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT_w}\right) R(-v : -v'). \quad (1.38)$$

O núcleo de espalhamento mais usado é o difuso-especular, proposto por Maxwell, que não depende da velocidade das moléculas antes da colisão com a superfície, e é dado por

$$R_{DE}(v' : v) = (1 - \alpha)\delta^*(v' - v + 2nv_n) + \alpha \frac{m^2 v_n}{2\pi(kT_w)^2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT_w}\right), \quad (1.39)$$

onde δ^* é a função de Dirac, m é a massa molecular das partículas gasosas, k é a constante de Boltzmann, T_w é a temperatura da superfície e α é o coeficiente de acomodação. Este núcleo de espalhamento representa, fisicamente, que a fração α de partículas é refletida difusivamente e o restante da fração $(1 - \alpha)$ é refletida especularmente.

Em problemas de fluxo entre duas placas paralelas, localizadas em $\tau = -a$ e $\tau = a$, o modelo difuso-especular, segundo Williams [76] é escrito em coordenadas cartesianas como

$$h(-a, c_x, c_y, c_z) - (1 - \alpha)h(-a, -c_x, c_y, c_z) = \frac{2\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(-a, -c'_x, c'_y, c'_z) dc'_x dc'_z dc'_y \quad (1.40)$$

e

$$h(a, -c_x, c_y, c_z) - (1 - \alpha)h(a, c_x, c_y, c_z) = \frac{2\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(a, c'_x, c'_y, c'_z) dc'_x dc'_z dc'_y \quad (1.41)$$

onde $\alpha \in (0, 1]$, representa o coeficiente de acomodação das paredes e $c_y > 0$.

Considerando o modelo difuso-especular, existem na literatura vários trabalhos da (DGR) baseados no núcleo de Maxwell dentre eles pode-se citar [3, 4, 14, 15, 65, 68, 69, 70].

Como o modelo de Maxwell (difuso-especular) considera apenas um coeficiente de acomodação para todas as propriedades físicas [62] e na prática necessita-se de no mínimo dois coeficientes de acomodação, utiliza-se neste trabalho, além das condições difuso-especular, o núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis [17] que possui dois coeficientes de acomodação para descrever as propriedades físicas do gás. Este núcleo é dado, em coordenadas retangulares por

$$R_{CL}(c'_x, c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) = \frac{2c'_y}{\pi\alpha_n\alpha_t(2-\alpha_t)} T(c'_x : c_x) S(c'_y : c_y) T(c'_z : c_z) \quad (1.42)$$

com

$$T(x : z) = \exp \left[- \frac{((1-\alpha_t)z - x)^2}{\alpha_t(2-\alpha_t)} \right] \quad (1.43)$$

e

$$S(x : z) = \exp \left[- \frac{[(1-\alpha_n)^{1/2}z - x]^2}{\alpha_n} \right] \cdot \hat{I}_0 \left[\frac{2(1-\alpha_n)^{1/2}|xz|}{\alpha_n} \right] \quad (1.44)$$

onde

$$\hat{I}_0(w) = I_0(w)e^{-w} \quad (1.45)$$

$I_0(w)$ denota a função de Bessel modificada expressa como:

$$I_0(w) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{w\cos\phi} d\phi. \quad (1.46)$$

Tem-se ainda que o coeficiente de acomodação tangencial (α_t) tem uma variação no intervalo $[0,2]$ e o coeficiente de energia cinética (α_n) varia no intervalo $[0,1]$ que corresponde à componente normal de velocidade. Isto significa, que o núcleo de Cercignani-Lampis admite a reflexão para trás que pode ocorrer em superfícies rugosas.

Usando a adimensionalização para o vetor velocidade c , a interação entre o gás e

a parede [68] pode ser descrita, para o núcleo de Cercignani-Lampis como

$$h(-a, c_x, c_y, c_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(-a, -c'_x, c'_y, c'_z) R(c'_x, -c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) dc'_x dc'_z dc'_y \quad (1.47)$$

e

$$h(a, c_x, -c_y, c_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(a, c'_x, c'_y, c'_z) R(c'_x, c'_y, c'_z : c_x, -c_y, c_z) dc'_x dc'_z dc'_y \quad (1.48)$$

para $c_y \in (0, \infty)$ e $c_x, c_z \in (-\infty, \infty)$.

Apesar do núcleo de Cercignani-Lampis representar melhor as propriedades físicas do gás, por ter dois coeficientes de acomodação, neste trabalho também será encontrado resultados utilizando as condições de Maxwell.

Capítulo 2

Modelos Cinéticos

Devido a grande dificuldade encontrada na estrutura da integral de colisão da equação de Boltzmann, percebeu-se a necessidade de apresentar alternativas que possibilitassem resolver esse problema. Assim, surgiu a idéia de substituir o termo de colisão por expressões mais simples, mas que conservassem certas propriedades físicas de interação entre as partículas. Essas expressões são chamadas de modelos de colisão e após a substituição do termo integral por um modelo de colisão, a equação de Boltzmann passa a ser chamada de equação cinética ou modelo cinético. Existem vários trabalhos apresentados na literatura [66] que procuram desenvolver equações modelo na dinâmica de gases rarefeitos. No entanto, é necessário que se permita estabelecer uma comparação, de maneira consistente, aos diferentes resultados encontrados nas aproximações de ELB. Para isso é necessário adotar uma metodologia onde os modelos cinéticos são tratados de uma mesma forma, como a maneira de definir o livre caminho médio e a frequência de colisão, aplicável à cada modelo cinético. Para simplificar o núcleo de espalhamento $\mathbf{F}(c', c)$ foi desenvolvido núcleos aproximados, os chamados núcleos sintéticos.

Foi proposto por Pekeris e Alterman [45] uma expansão em termos dos polinômios de Legendre. Através do teorema da adição dos harmônicos esféricos, o núcleo de espalhamento $\mathbf{F}(c', c)$ é escrito na forma

$$\mathbf{F}(c', c) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (2n+1)(2-\delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) K_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi), \quad (2.1)$$

onde as funções de Legendre normalizadas são dadas por

$$P_n^m(\mu) = \left[\frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right]^{1/2} (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_n(\mu), \quad (2.2)$$

$n \geq m$ $P_n(\mu)$ são os polinômios de Legendre , tais que

$$\int_{-1}^1 P_n^m(\mu) P_{n'}^m(\mu) = \left(\frac{2}{2n+1} \right) \delta_{n,n'} \quad (2.3)$$

onde $\delta_{n,n'}$ representa o delta de Kronecker. Pode-se encontrar em [5, 44, 45], para alguns valores de n , as expressões para as componentes $K_n(c', c)$.

Geralmente, essa simplificação do núcleo de espalhamento não depende somente de um truncamento da expansão do núcleo exato $\mathbf{F}(c', c)$, pois as maiores dificuldades encontram-se nas funções $k_n(c', c)$ que possuem derivadas descontínuas nos pontos $c' = c$ mesmo para valores pequenos de n . Devido a isto, são apresentadas na teoria cinética outras abordagens, as chamadas equações modelo que preservam características da equação original como a conservação dos invariantes de colisão e, em alguns casos, a existência do teorema H [8].

Para obter os modelos cinéticos, substitui-se as componentes exatas $k_n(c', c)$ de forma truncada do núcleo de espalhamento $\mathbf{F}(c', c)$ por uma aproximação que preserva as propriedades físicas do número de espalhamento original [5], ou seja, a Eq.(2.1) é truncada e o núcleo de espalhamento passa a ser descrito como

$$\mathbf{F}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (2n+1)(2-\delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) f_n(c', c) \cos m(\chi' - \chi), \quad (2.4)$$

aqui são usadas aproximações sintéticas $f_n(c', c)$ para $n \leq N$ ao invés de utilizar componentes exatas $k_n(c', c)$.

A ELB adimensionalizada e aproximada pelo núcleo sintético $\mathbf{F}(c', c)$ é escrita como

$$c_y \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, c) = \epsilon \mathcal{L}^* \{h\}(\tau, c) \quad (2.5)$$

onde

$$\mathcal{L}^* \{h\}(\tau, c) = -\nu(c)h(\tau, c) + \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-c'^2} h(\tau, c) \mathbf{F}(c', c) c'^2 d\chi' d\mu' dc' \quad (2.6)$$

A fim de se obter resultados numéricos, foram propostos alguns modelos como **BGK** [6], **S** [57], Gross-Jackson [32] e **MRS** [31] onde as frequências de colisão são constantes, neste trabalho serão tratados os modelos **BGK** e **S**.

2.1 Modelo BGK e Modelo S

O modelo de colisão **BGK**, proposto por Bhatnagar, Gross e Krook [6] é o modelo mais conhecido. O operador de colisão **BGK** expressa a mudança líquida no número de partículas como sendo proporcional à frequência de colisão e à diferença entre a função distribuição e a distribuição Maxwelliana local.

O modelo **BGK** fornece resultados aproximados para muitos problemas, embora este modelo não permita a escolha independente da viscosidade e da condutividade térmica, essa característica faz com que este modelo possua um número de Prandtl fixo, ou seja, o número de Prandtl caracteriza-se por ser um número adimensional que aproxima a razão da viscosidade cinemática e difusividade térmica de um fluido. Para o modelo **BGK** tem-se

$$Pr = \epsilon_p / \epsilon_t = 1, \quad (2.7)$$

cujos valores normalmente utilizados na teoria cinética correspondem a 2/3 [60]. Além disso, a utilização mais acentuada do modelo **BGK** ocorre pelo fato do mesmo ser de fácil solução analítica de problemas em configurações simples e por constituir a base da grande maioria das abordagens numéricas para a solução da equação de Boltzmann.

Com o objetivo de comparar com os resultados do modelo **BGK**, decidiu-se investigar também o modelo **S**, associado a condição de contorno difuso-especular e Cercignani-Lampis sem a condição de simetria, na resolução de alguns problemas da (DGR), visto que estes resultados ainda não estão disponíveis na literatura existente.

A fim de desenvolver matematicamente os modelos **BGK** e **S** que baseiam-se no modelo de esferas rígidas, utiliza-se as relações existentes entre coordenadas esféricas e cartesianas e obtém-se o vetor velocidade c em coordenadas retangulares (c_x, c_y, c_z) e a ELB é escrita como

$$c_y \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, c) = \epsilon \mathcal{L}^* h(\tau, c) \quad (2.8)$$

onde

$$\mathcal{L}^*h(\tau, c) = -\epsilon h(\tau, c) + \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, c') \mathbf{F}(c' : c) dc'_x dc'_y dc'_z. \quad (2.9)$$

O modelo **S**, proposto por Sharkhov [57], é uma modificação do modelo **BGK**, conforme observado por Sharipov [60].

Conforme Garcia e Siewert [31] e Scherer [55], o núcleo de espalhamento pode ser considerado em uma mesma relação levando em conta que para o modelo **BGK** tem-se $\beta = 0$, já para o modelo **S** o parâmetro assume valor diferente neste caso, tem-se $\beta = 1$, e é descrito como

$$\mathbf{F}(c', c) = 1 + 2(c'.c) + \frac{2}{3} \left(c'^2 - \frac{3}{2} \right) \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) + \beta \mathbf{M}(c', c) \quad (2.10)$$

onde

$$\mathbf{M}(c', c) = (4/15)(c'.c)(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2). \quad (2.11)$$

A fim de reescrever a Eq.(2.8) na forma da Eq.(2.1), deve-se escolher

$$f_0(c', c) = 4\pi^{-1/2} [1 + (2/3)(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2)], \quad (2.12)$$

$$f_1(c', c) = (8/3)c'c\pi^{-1/2} [1 + (2/15)\beta(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)] \quad (2.13)$$

e

$$f_n(c', c) = 0, \quad n > 1. \quad (2.14)$$

Já sendo definido o núcleo de espalhamento para os modelos em questão, e considerando a relação existente entre coordenadas esféricas e cartesianas, considera-se a equação cinética escrita em termos da perturbação $h(\tau, c)$, para a função distribuição de uma Maxwelliana local, como

$$c_y \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, c) + \epsilon h(\tau, c) = \epsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} \mathbf{F}(c', c) h(\tau, c) dc'_x dc'_y dc'_z + \mathbf{S}(c) \quad (2.15)$$

onde $\mathbf{F}(c', c)$ é definido pela Eq.(2.10).

Nos próximos capítulos, apresenta-se as quantidades físicas de interesse e os pro-

blemas na dinâmica de gases rarefeitos que pretende-se resolver aplicando-se os modelos **BGK** e **S** juntamente com a versão analítica do método de ordenadas discretas.

Capítulo 3

Formulação Matemática do Problema

Após a derivação das equações modelo da equação linearizada de Boltzmann para esferas rígidas, neste capítulo formula-se o problema clássico de Fluxo de Poiseuille e o problema de transferência de calor *Creep* Térmico utilizando-se os modelos **BGK** e **S**.

3.1 Formulação geral

3.1.1 Modelo BGK

Primeiramente, considera-se a equação cinética já escrita em termos de uma perturbação $h(\tau, c)$ da função distribuição

$$c_y \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, c) = \epsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, c') \mathbf{F}(c' : c) dc'_x dc'_y dc'_z + \mathbf{S}(c) \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{S}(c)$ é o termo de fonte e $\mathbf{F}(c' : c)$ é o mesmo núcleo sintético mencionado anteriormente Eq.(2.10).

Com a finalidade de reduzir o número de variáveis no problema, verificou-se que os resultados desejados podem ser obtidos através de dois momentos de integração da função de distribuição. Assim, multiplica-se a Eq.(3.1) primeiramente por

$$\Phi_1(c_x, c_z) = \frac{c_x}{\pi} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \quad (3.2)$$

e integra-se o produto em relação a c_x e c_z em $(-\infty, \infty)$.

Posteriormente, repete-se o mesmo procedimento multiplicando-se a Eq.(3.1) por

$$\Phi_2(c_x, c_z) = \left[\frac{c_x}{(2^{1/2}\pi)} \right] (c_y^2 + c_z^2 - 2) e^{-(c_y^2 + c_z^2)}, \quad (3.3)$$

e integra-se o produto em relação a c_x e c_z em $(-\infty, \infty)$. Considera-se a nova variável $c_y = \xi$ e obtém-se as seguintes equações balanço

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_1(\tau, \xi) + \epsilon h_1(\tau, \xi) = \frac{\epsilon}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} h_1(\tau, \xi') d\xi' + a_1(\xi), \quad (3.4)$$

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_2(\tau, \xi) + \epsilon h_2(\tau, \xi) = a_2(\xi), \quad (3.5)$$

onde

$$h_1(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_1(c_x, c_z) h(\tau, c_x, \xi, c_z), dc_x dc_z \quad (3.6)$$

$$h_2(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_2(c_x, c_z) h(\tau, c_x, c_y, c_z), dc_x dc_z \quad (3.7)$$

$$a_1(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_1(c_x, c_z) S(c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z \quad (3.8)$$

e

$$a_2(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_2(c_x, c_z) S(c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z. \quad (3.9)$$

O problema pode ser escrito vetorialmente como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \epsilon \mathbf{H}(\tau, \xi) = \epsilon \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi') \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{A}(\xi), \quad (3.10)$$

onde

$$\Psi(\xi') = \pi^{-1/2} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q} \quad (3.11)$$

com

$$\mathbf{Q}(\xi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

Como a Eq.(3.10) é não homogênea para encontrar sua solução precisa-se resolver o problema homogêneo e encontrar uma solução particular para o termo não-homogêneo. Ou seja, a solução geral da equação é dada por

$$\mathbf{H}(\tau, \xi) = \mathbf{H}^h(\tau, \xi) + \mathbf{H}^p(\tau, \xi) \quad (3.13)$$

onde $\mathbf{H}^h(\tau, \xi)$ representa a solução do problema homogêneo e $\mathbf{H}^p(\tau, \xi)$ a solução do problema particular.

3.1.2 Modelo S

De forma análoga ao modelo **BGK**, multiplica-se a Eq.(3.1) pelos dois momentos (integrais) Eqs.(3.2) e (3.3), integra-se o produto em relação a c_x e c_z em $(-\infty, \infty)$. Considera-se a nova variável $c_y = \xi$ e obtém-se as seguintes equações balanço

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_1(\tau, \xi) + \epsilon h_1(\tau, \xi) = \frac{\epsilon}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \left[f_{11}(\xi', \xi) h_1(\tau, \xi') + f_{12}(\xi', \xi) h_2(\tau, \xi') \right] d\xi' + a_1(\xi), \quad (3.14)$$

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} h_2(\tau, \xi) + \epsilon h_2(\tau, \xi) = \frac{\epsilon}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \left[f_{12}(\xi', \xi) h_1(\tau, \xi') + f_{22}(\xi', \xi) h_2(\tau, \xi') \right] d\xi' + a_2(\xi), \quad (3.15)$$

onde

$$h_1(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_1(c_x, c_z) h(\tau, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (3.16)$$

$$h_2(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_2(c_x, c_z) h(\tau, c_x, \xi, c_z) dc_x dc_z, \quad (3.17)$$

$$f_{11}(\xi', \xi) = 1 + \left(\frac{2}{15} \right) (\xi^2 - 1/2)(\xi'^2 - 1/2), \quad (3.18)$$

$$f_{12}(\xi', \xi) = \left(\frac{2}{15} \right) 2^{1/2} (\xi^2 - 1/2), \quad (3.19)$$

$$f_{22}(\xi', \xi) = \frac{4}{15}, \quad (3.20)$$

tem-se ainda que, $a_1(\xi)$ e $a_2(\xi)$ são escritas conforme as Eqs.(3.8) e (3.9), respectivamente.

O problema pode ser escrito vetorialmente como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}(\tau, \xi) + \epsilon \mathbf{H}(\tau, \xi) = \epsilon \pi^{-1/2} \mathbf{Q}(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}^T(\xi') \mathbf{H}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{A}(\xi), \quad (3.21)$$

onde T denota a operação transposta, e

$$\mathbf{Q}(\xi) = \begin{bmatrix} (2/15)^{1/2}(\xi^2 - 1/2) & 1 \\ 2(15)^{-1/2} & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.22)$$

os elementos de $\mathbf{A}(\xi)$ são compostos como

$$\mathbf{A}(\xi) = \begin{bmatrix} a_1(\xi) \\ a_2(\xi) \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

e

$$\mathbf{H}(\xi) = \begin{bmatrix} h_1(\xi) \\ h_2(\xi) \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

escrevendo

$$\mathbf{H}(\tau, \xi) = \mathbf{Q}(\xi) \mathbf{G}(\tau, \xi) \quad (3.25)$$

e

$$\mathbf{A}(\xi) = \mathbf{Q}(\xi) \mathbf{\Gamma} \quad (3.26)$$

reescreve-se a Eq.(3.21) como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \epsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \epsilon \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\Psi}(\xi') \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi' + \mathbf{\Gamma}, \quad (3.27)$$

onde

$$\mathbf{\Psi}(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \mathbf{Q}^T(\xi) \mathbf{Q}(\xi). \quad (3.28)$$

3.2 Problemas Clássicos

3.2.1 Fluxo de Poiseuille

Segundo Williams [77], quando um gás rarefeito confinado entre duas placas paralelas infinitas, separadas a uma distância de $2a$ ($\tau = \pm a$) está sujeito a um gradiente (constante) de pressão (K_p) ortogonal à direção do fluxo, caracteriza um problema clássico da (DGR) denominado Fluxo de Poiseuille. Segundo Scherer [54], tem-se na Eq.(2.15) que

$$S(c) = -K_p c_y \quad (3.29)$$

onde, para a resolução do problema e obtenção de resultados numéricos, será tomado $K_p = 1$.

Após a multiplicação da Eq.(2.15) pelos momentos de integração Eqs.(3.2) e (3.3) e usando as Eqs.(3.6)-(3.9), encontra-se para o modelo **BGK**

$$\mathbf{A}(\xi) = - \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

e para o modelo **S**

$$\mathbf{\Gamma}(\xi) = - \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

Observa-se que no problema de fluxo de Poiseuille, pode-se encontrar duas equações quando o mesmo é escrito na forma escalar, neste caso, as equações são independentes uma da outra, o problema poderia ser visto de forma escalar conforme Knackfuss e Barichello [36], no entanto, neste trabalho terá tratamento vetorial.

3.2.2 Problema *Creep* Térmico

Quando se trata de um gás confinado entre duas placas paralelas infinitas, situadas a uma distância $\tau = \pm a$ e o movimento deste gás se dá através de um gradiente constante de temperatura (K_t) na direção paralela às placas que delimitam o gás, o mesmo refere-se ao Problema *Creep* Térmico. Geralmente, este fenômeno se refere a pequenas partículas gasosas que se movem na direção em que a temperatura decresce. Para este problema, o termo de fonte da Eq.(2.15) é dado como

$$S(c) = -c_y(cx^2 + cy^2 + cz^2 - 5/2)K_t \quad (3.32)$$

onde será adotado $K_t = 1$ a fim de obter-se os resultados numéricos. De forma análoga ao procedimento utilizado no problema de Poiseuille, obtém-se para o modelo **BGK**

$$\mathbf{A}(\xi) = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \xi^2 - \frac{1}{2} \\ 2^{1/2} \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

e para o modelo **S**

$$\mathbf{\Gamma}(\xi) = - \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(\xi^2 - \frac{1}{2}) \\ 2^{-1/2} \end{bmatrix}. \quad (3.34)$$

Capítulo 4

Grandezas Físicas

Este trabalho tem por objetivo avaliar as quantidades físicas de interesse relacionadas a velocidades das partículas e fluxo de calor. Assim para o perfil de velocidade e para o perfil de fluxo de calor, conforme Siewert [68], tem-se respectivamente,

$$u(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc'_x dc'_y dc'_z \quad (4.1)$$

e

$$q(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, c_x, c_y, c_z) \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) c_y dc'_x dc'_y dc'_z \quad (4.2)$$

Para os problemas analisados, busca-se também, avaliar a taxa de fluxo de partícula

$$U = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a u(\tau) d\tau \quad (4.3)$$

e a taxa de fluxo de calor

$$Q = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a q(\tau) d\tau. \quad (4.4)$$

No entanto, cabe ressaltar que as quantidades físicas devem ser reescritas de acordo com a forma vetorial, na qual está sendo desenvolvido o problema. O perfil de velocidade pode ser reescrito em ordenadas discretas como

$$u(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi) [1 \quad 0] \mathbf{H}(\tau, \xi) d\xi \quad (4.5)$$

para o modelo **BGK**, e considerando a Eq.(3.25) tem-se para o modelo **S**

$$u(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi) [1 \quad 0] \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi \quad (4.6)$$

da mesma forma, o perfil de fluxo de calor é reescrito como

$$q(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi) [(\xi^2 - 1/2) \quad 2^{1/2}] \mathbf{H}(\tau, \xi) d\xi \quad (4.7)$$

para o modelo **BGK** e

$$q(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi) [(\xi^2 - 1/2) \quad 2^{1/2}] \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi \quad (4.8)$$

para o modelo **S**.

Capítulo 5

Solução em Ordenadas Discretas

A versão original do método das Ordenadas Discretas foi introduzido por Wick [80] e Chandrasekhar [23] e tem como base a aproximação da integral angular no termo de espalhamento da equação de transporte por uma fórmula de quadratura, esta aproximação resulta em um sistema de equações algébricas que pode ser resolvido analiticamente. Uma versão analítica do método de Ordenadas Discretas (ADO) é apresentado por [2, 64].

Para obtenção dos resultados numéricos dos problemas propostos neste trabalho, derivados segundo os modelos **BGK** e **S**, utiliza-se a versão analítica do método de Ordenadas Discretas (ADO). A interação entre o gás e a superfície é descrita pelos modelos difuso-especular e Cercignani-Lampis. No entanto, para encontrar a solução em ordenadas discretas, é necessário desenvolver uma solução particular, devido a presença do termo de fonte que verifica-se nas Eqs.(3.10)e (3.27), a qual veremos neste capítulo.

5.1 Solução particular

Segundo Knackfuss e Barichello [37], propõe-se uma solução da forma

$$\mathbf{H}^{\mathbf{P}}(\tau, \xi) = \mathbf{B}\tau^2 + \mathbf{C}\tau\xi + \mathbf{D}\xi^2 + \mathbf{E}\xi + \mathbf{F} \quad (5.1)$$

para o modelo **BGK** e para o modelo **S**, segundo Siewert [68] tem-se a proposta de solução escrita como

$$\mathbf{G}^p(\tau, \xi) = \mathbf{B}\tau^2 + \mathbf{C}\tau\xi + \mathbf{D}\xi^2 + \mathbf{E}\xi + \mathbf{F} \quad (5.2)$$

onde **B**, **C**, **D**, **E** e **F** são vetores (2x1) constantes.

Substituindo-se a proposta de solução Eq.(5.1) na Eq.(3.10) encontra-se para o problema de Poiseuille, modelo **BGK**

$$\mathbf{H}^p(\tau, \xi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \tau^2 - 2\tau\xi + 2\xi^2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.3)$$

Do mesmo modo, substituindo a proposta de solução Eq.(5.2) na Eq.(3.27), obtém-se para o problema de Poiseuille, modelo **S** a seguinte solução particular

$$\mathbf{G}^p(\tau, \xi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{30}/10 \\ \tau^2 - 2\tau\xi + 2\xi^2 \end{bmatrix}. \quad (5.4)$$

A solução particular para o problema *Creep* Térmico, modelos **BGK** e **S** tem-se respectivamente,

$$\mathbf{H}^p(\tau, \xi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} - \xi^2 \\ -\sqrt{2} \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

e

$$\mathbf{G}^p(\tau, \xi) = -\frac{3}{8\epsilon} \begin{bmatrix} \sqrt{30} \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (5.6)$$

Uma vez conhecida as soluções particulares, propõe-se para o problema em função de $\mathbf{H}(\tau, \xi)$ quando refere-se ao modelo **BGK** e em função de $\mathbf{G}(\tau, \xi)$ quando refere-se ao modelo **S** uma solução da forma

$$\mathbf{H}(\tau, \xi) = \mathbf{H}^h(\tau, \xi) + \mathbf{H}^p(\tau, \xi) \quad (5.7)$$

e

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{G}^h(\tau, \xi) + \mathbf{G}^p(\tau, \xi) \quad (5.8)$$

onde $\mathbf{H}^p(\tau, \xi)$ e $\mathbf{G}^p(\tau, \xi)$ referem-se a solução particular encontrada anteriormente e $\mathbf{H}^h(\tau, \xi)$ e $\mathbf{G}^h(\tau, \xi)$ é a solução homogênea que pode ser definida a partir das Eqs.

(3.10) e (3.27) como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{H}^h(\tau, \xi) + \epsilon \mathbf{H}^h(\tau, \xi) = \epsilon \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi') \mathbf{H}^h(\tau, \xi') d\xi' \quad (5.9)$$

e

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}^h(\tau, \xi) + \epsilon \mathbf{G}^h(\tau, \xi) = \epsilon \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi') \mathbf{G}^h(\tau, \xi') d\xi' \quad (5.10)$$

respectivamente para os modelos **BGK** e **S** com

$$\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \quad (5.11)$$

para o modelo **BGK** e

$$\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \mathbf{Q}^T(\xi) \mathbf{Q}(\xi) \quad (5.12)$$

para o modelo **S**.

5.2 Solução em Ordenadas Discretas

Para buscar a solução da equação homogênea será utilizada uma versão analítica do método de Ordenadas Discretas (ADO) proposto por Barichello e Siewert [2] para a solução de problemas baseados em modelos cinéticos derivados da equação de Boltzmann linearizada em geometria plana. Com o objetivo de encontrar a solução homogênea, define-se o esquema de quadratura de Gauss-Legendre associado a versão analítica do método de Ordenadas Discretas.

5.2.1 Modelo BGK

Propõe-se então, como solução para o problema homogêneo, uma solução na forma exponencial

$$\mathbf{H}^h(\tau, \pm\xi) = \Phi(\nu, \xi) e^{-\epsilon\tau/\nu_j}, \quad (5.13)$$

onde a constante de separação ν_j e as funções $\Phi(\nu, \xi)$ que são as componentes independentes da variável espacial das soluções elementares, serão determinadas. Para

isso, primeiramente, discretiza-se a Eq.(5.9), ou seja, aproxima-se o termo integral desta equação pela fórmula de quadratura de Gauss-Legendre que, segundo Davis e Poloski [26], no caso de $c_y \in [-1, 1]$ segue a fórmula básica

$$\int_{-1}^1 f(y)dy = \sum_{k=1}^N \omega_k f(\xi_k), \quad (5.14)$$

onde, na prescrição de Gauss, os nós $\{y_k\}$ são os zeros do polinômio de Legendre $P_N(x)$ e $\{\omega_k\}$ os pesos associados. Escreve-se a Eq.(5.9) como

$$\xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{H}^h(\tau, \pm \xi_i) + \epsilon \mathbf{H}^h(\tau, \pm \xi_i) = \epsilon \left(\int_{-\infty}^0 \Psi(\xi') \mathbf{H}^h(\tau, -\xi') d\xi' + \int_0^{\infty} \Psi(\xi') \mathbf{H}^h(\tau, \xi') d\xi' \right), \quad (5.15)$$

observa-se que o intervalo de integração é $[0, \infty)$, logo utiliza-se a transformação $u(\xi) = e^{-\xi}$ para mapear $\xi \in [0, \infty)$ sobre $u \in [0, 1]$, assim aplica-se a fórmula de Gauss-Legendre (linearmente) no intervalo $[0, 1]$ e tem-se

$$\pm \xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{H}^h(\tau, \pm \xi_i) + \epsilon \mathbf{H}^h(\tau, \pm \xi_i) = \epsilon \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k) [\mathbf{H}^h(\tau, \xi_k) + \mathbf{H}^h(\tau, -\xi_k)] \quad (5.16)$$

denota-se por $\{\xi_k\}$ e $\{\omega_k\}$, respectivamente, os conjuntos dos N pontos de quadratura e N pesos obtidos para o intervalo de $[0, \infty)$, para $i = 1, 2, \dots, N$.

A partir daí, substitui-se a proposta de solução Eq.(5.13) na Eq.(5.16) e obtém-se

$$(\nu - \xi_i) \Phi(\nu, \xi_i) = \nu \sum_{k=1}^N \omega(k) \Psi(\xi_k) [\Phi(\nu, \xi_k) + \Phi(\nu, -\xi_k)] \quad (5.17)$$

e

$$(\nu + \xi_i) \Phi(\nu, -\xi_i) = \nu \sum_{k=1}^N \omega(k) \Psi(\xi_k) [\Phi(\nu, \xi_k) + \Phi(\nu, -\xi_k)], \quad (5.18)$$

escrevendo de forma acoplada, tem-se

$$(\nu \mp \xi_i) \Phi(\nu, \pm \xi_i) = \nu \sum_{k=1}^N \omega(k) \Psi(\xi_k) [\Phi(\nu, \xi_k) + \Phi(\nu, -\xi_k)]. \quad (5.19)$$

Considera-se

$$\Phi_+ = \Phi(\nu, \xi_i) \quad (5.20)$$

e

$$\Phi_- = \Phi(\nu, -\xi_i) \quad (5.21)$$

e reescreve-se a Eq.(5.17) como

$$\frac{\xi_i}{\nu} \Phi_+ = \Phi_+ - \sum_{k=1}^N \omega(k) \Psi(\xi_k) [\Phi_+ + \Phi_-] \quad (5.22)$$

tomando

$$\Xi = \text{diag} \{ \xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_N \} \quad (5.23)$$

e

$$(W)_{ij} = W_j \Psi(\xi_j) \quad (5.24)$$

tem-se

$$\frac{1}{\nu} \Xi \Phi_+ = (I - W) \Phi_+ - W \Phi_- \quad (5.25)$$

onde I é a matriz identidade ($N \times N$).

Do mesmo modo, considerando as igualdades Eqs.(5.20) e (5.21) reescreve-se a Eq.(5.18) como

$$-\frac{\xi_i}{\nu} \Phi_- = \Phi_- - \sum_{k=1}^N \omega(k) \Psi(\xi_k) [\Phi_+ + \Phi_-] \quad (5.26)$$

pelos Eqs.(5.23) e (5.24) tem-se

$$-\frac{1}{\nu} \Xi \Phi_- = (I - W) \Phi_- - W \Phi_+. \quad (5.27)$$

Soma-se as Eqs.(5.25) e (5.27) e obtém-se

$$\frac{1}{\nu} \Xi (\Phi_+ - \Phi_-) = (I - W) (\Phi_+ + \Phi_-) - W (\Phi_- + \Phi_+) \quad (5.28)$$

aqui, considera-se $U_{(k)} = \Phi_+ + \Phi_-$ e $V_{(k)} = \Phi_+ - \Phi_-$ e reescreve-se a Eq.(5.28) como

$$\frac{1}{\nu} \Xi V = (I - W) U - W U \quad (5.29)$$

multiplica-se a Eq.(5.29) por Ξ^{-1} e tem-se

$$V = \nu(I - 2W)\Xi^{-1}U. \quad (5.30)$$

De maneira análoga, subtrai-se as Eqs.(5.25) e (5.27) e obtém-se

$$\frac{1}{\nu}\Xi U = V. \quad (5.31)$$

Substitui-se a Eq.(5.30) na Eq.(5.31) e tem-se

$$\frac{1}{\nu}\Xi U = \nu(I - 2W)\Xi^{-1}U \quad (5.32)$$

multiplica-se a Eq.(5.30) por Ξ^{-1} e deduz-se um problema de autovalores e autovetores [2]

$$[D - 2\overline{W}]U = \lambda U \quad (5.33)$$

aqui

$$D = \Xi^{-2} = \text{diag} \left\{ \left(\frac{1}{\xi_1} \right)^2 I, \left(\frac{1}{\xi_2} \right)^2 I, \dots, \left(\frac{1}{\xi_N} \right)^2 I \right\}, \quad (5.34)$$

com I denotando uma matriz identidade de dimensão 2×2 e W uma matriz de dimensão $2N \times 2N$ na qual a cada $2 \times 2N$ linhas é dada por

$$\overline{W}_i = \left(\frac{1}{\xi_i} \right)^2 \left[w_1 \Psi(\xi_1), w_2 \Psi(\xi_2), \dots, w_N \Psi(\xi_N) \right], \quad (5.35)$$

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

$$\lambda = \frac{1}{\nu^2} \quad (5.36)$$

são os autovalores. A partir da Eq.(5.33) encontra-se o conjunto de autovalores e autovetores $\{\lambda_j, U_j\}$ para $j = 1, 2, \dots, 2N$.

Após definir os autovalores λ_j , encontra-se o valor das constantes de separação ν_j e as soluções elementares $\Phi(\nu, \xi)$ através das relações

$$\Phi_+(\nu_j) = \frac{1}{2\nu_j} \text{diag} \{ (\nu_j + \xi_1)\mathbf{I}, (\nu_j + \xi_2)\mathbf{I}, \dots, (\nu_j + \xi_N)\mathbf{I} \} U_j \quad (5.37)$$

e

$$\Phi_{-}(\nu_j) = \frac{1}{2\nu_j} \text{diag} \{ (\nu_j - \xi_1)\mathbf{I}, (\nu_j - \xi_2)\mathbf{I}, \dots, (\nu_j - \xi_N)\mathbf{I} \} U_j \quad (5.38)$$

onde ν_j é a raiz quadrada positiva de $1/\lambda_j$. Assim, escreve-se a solução homogênea em ordenadas discretas para a Eq.(5.9) expressa como

$$\mathbf{H}_{\pm}^h(\tau) = \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j \Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right]. \quad (5.39)$$

Por se tratar de um problema conservativo [4], tem-se que um dos autovalores λ tende para zero quando N tender ao infinito, logo uma constante de separação (ν) tende ao infinito. Assim, despreza-se a maior dessas constantes e reescreve-se a forma final da solução para o problema homogêneo, como

$$\mathbf{H}_{\pm}^h(\tau) = A_1 \Phi^1 + B_1 \Phi_{\pm}^2 + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j \Phi_{\pm}(\nu_j) e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi_{\mp}(\nu_j) e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] \quad (5.40)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$. Aqui são introduzidas soluções exatas Φ^1 , de dimensão $2N \times 1$, definido por N vetores da forma

$$\Phi^1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.41)$$

e Φ_{\pm}^2 vetor com N componentes

$$\Phi_{\pm}^2(\tau) = \begin{bmatrix} \tau \mp \xi \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (5.42)$$

Considerando que neste trabalho avalia-se gases rarefeitos confinados entre placas paralelas com constituições químicas diferentes, não utiliza-se a condição de simetria, $H(\tau, \xi) = H(-\tau, -\xi)$, como usado em Knackfuss [37], o que influencia no número de constantes arbitrárias presentes na solução do problema homogêneo, logo, obtém-se um sistema algébrico $4N \times 4N$, diferentemente do sistema $2N \times 2N$ obtido em [37].

5.2.2 Modelo S

Aplicando-se a versão analítica do método de Ordenadas Discretas à Eq.(5.10), de maneira análoga ao aplicado ao modelo **BGK**, encontra-se

$$\xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{G}^h(\tau, \xi_i) + \epsilon \mathbf{G}^h(\tau, \xi_i) = \epsilon \left(\int_{-\infty}^0 \Psi(\xi') \mathbf{G}^h(\tau, -\xi') d\xi' + \int_0^{\infty} \Psi(\xi') \mathbf{G}^h(\tau, \xi') d\xi' \right) \quad (5.43)$$

o termo integral da Eq.(5.43) é aproximado pela fórmula de quadratura e reescrito como somatório

$$\xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{G}^h(\tau, \xi_i) + \epsilon \mathbf{G}^h(\tau, \xi_i) = \epsilon \sum_{k=1}^N w(k) \Psi(\xi'_k) \left[\mathbf{G}^h(\tau, \xi'_k) + \mathbf{G}^h(\tau, -\xi'_k) d\xi' \right] \quad (5.44)$$

e

$$-\xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{G}^h(\tau, -\xi_i) + \epsilon \mathbf{G}^h(\tau, -\xi_i) = \epsilon \sum_{k=1}^N w(k) \Psi(\xi'_k) \left[\mathbf{G}^h(\tau, \xi'_k) + \mathbf{G}^h(\tau, -\xi'_k) d\xi' \right] \quad (5.45)$$

de forma acoplada tem-se

$$\pm \xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{G}^h(\tau, \pm \xi_i) + \epsilon \mathbf{G}^h(\tau, \pm \xi_i) = \epsilon \sum_{k=1}^N w(k) \Psi(\xi'_k) \left[\mathbf{G}^h(\tau, \xi'_k) + \mathbf{G}^h(\tau, -\xi'_k) d\xi' \right] \quad (5.46)$$

denota-se por $\{\xi_k\}$ e $\{\omega_k\}$, respectivamente, os conjuntos dos N pontos de quadratura e N pesos obtidos para o intervalo de $[0, \infty)$, para $i = 1, 2, \dots, N$ e $j = 1, 2, \dots, 2N$.

Conforme proposto por Scherer, Prolo e Barichello [54] busca-se soluções do tipo exponencial

$$\mathbf{G}^h(\tau, \pm \xi) = \Phi(\nu, \xi) \mathbf{e}^{-\epsilon \tau / \nu_j} \quad (5.47)$$

onde

$$\Phi(\nu, \xi) = \begin{bmatrix} \Phi_1(\tau, \xi) \\ \Phi_2(\tau, \xi) \end{bmatrix}. \quad (5.48)$$

Substituindo-se a solução proposta Eq.(5.47) na Eq.(5.44), encontra-se, para $i =$

$1, \dots, N$,

$$\begin{pmatrix} \xi_i \\ \nu \end{pmatrix} \Phi(\nu, \pm \xi_i) = \Phi(\nu, \pm \xi_i) - \sum_{k=1}^N w(k) \Psi(\xi'_k) [\Phi_{\pm}(\nu_j, \xi'_k) + \Phi_{\pm}(\nu_j, -\xi'_k)] \quad (5.49)$$

considerando $\Phi_+ = \Phi_{\pm}(\nu, \xi_i)$ e $\Phi_- = \Phi_{\pm}(\nu, -\xi_i)$ reescreve-se a Eq.(5.49) na forma matricial como

$$(\nu - \xi_i) \Phi_+ = \nu \sum_{k=1}^N \omega(k) \Psi(\xi'_k) [\Phi_+ + \Phi_-] \quad (5.50)$$

sendo Ξ uma matriz $2N \times 2N$ definida como

$$\Xi = \text{diag} \{ \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N \} \quad (5.51)$$

e W uma matriz de dimensão $2N \times 2N$ na qual a cada $2 \times 2N$ linhas é dada por

$$[W]_{i,j} = w_j \Psi(\xi_i) \quad (5.52)$$

para $i, j = 1, \dots, N$, pode-se reescrever a Eq.(5.50) como

$$(\nu - \Xi) \Phi_+ = \nu W [\Phi_+ + \Phi_-]. \quad (5.53)$$

Do mesmo modo, substitui-se a proposta de solução Eq.(5.47) na Eq.(5.45), tem-se, considerando as igualdades $\Phi_+ = \Phi_{\pm}(\nu, \xi_i)$ e $\Phi_- = \Phi_{\pm}(\nu, -\xi_i)$

$$(\nu + \xi_i) \Phi_- = \nu \sum_{k=1}^N \omega(k) \Psi(\xi'_k) [\Phi_+ + \Phi_-] \quad (5.54)$$

tomando as Eqs.(6.51) e (6.52) tem-se

$$(\nu - \Xi) \Phi_- = \nu W [\Phi_+ + \Phi_-] \quad (5.55)$$

$\Phi_{\pm}(\nu)$ é um vetor $2N \times 1$ definido como

$$\Phi_{\pm}(\nu) = \left[\Phi_1(\nu, \pm \xi_1), \dots, \Phi_1(\nu, \pm \xi_N) \quad \Phi_2(\nu, \pm \xi_1), \dots, \Phi_2(\nu, \pm \xi_N) \right]^T \quad (5.56)$$

onde T define a operação transposta.

Somando-se as Eqs.(6.53) e (6.55) obtém-se

$$\left(\nu - \Xi\right)\left(\Phi_+ - \Phi_-\right) = \nu W\left(\Phi_+ + \Phi_-\right) \quad (5.57)$$

considerando $U_{(k)} = \Phi_+ + \Phi_-$ e $V_{(k)} = \Phi_+ - \Phi_-$ tem-se

$$\frac{1}{\nu}\Xi V_{(k)} = \left(I - W\right)U_{(k)} - WU_{(k)} \quad (5.58)$$

multiplicando-se a Eq.(6.58) por Ξ^{-1} tem-se

$$V_{(k)} = \nu\left(I - 2W\right)\Xi^{-1}U_{(k)}. \quad (5.59)$$

De modo análogo, subtraindo-se as Eqs.(6.53) e (6.55), obtém-se

$$\frac{1}{\nu}\Xi U_{(k)} = V_{(k)}, \quad (5.60)$$

substitui-se a Eq.(6.59) na Eq.(6.60) e tem-se

$$\frac{1}{\nu}\Xi U_{(k)} = \nu\left(I - 2W\right)\Xi^{-1} U_{(k)}, \quad (5.61)$$

multiplica-se a equação obtida por Ξ^{-1} e obtém-se

$$\frac{1}{\nu^2}U = \left(\Xi^{-2} - 2\overline{W}\right)U \quad (5.62)$$

onde

$$\overline{W} = \Xi^{-1}\Xi^{-1}W. \quad (5.63)$$

A partir daí, deduz-se um problema de autovalores e autovetores [2] escrito como

$$[D - 2\overline{W}]U = \lambda U \quad (5.64)$$

onde W é a matriz de dimensão $2N \times 2N$ na qual a cada $2 \times 2N$ linhas é dada por

$$\bar{W}_i = \left(\frac{1}{\xi_i} \right)^2 \left[w_1 \Psi(\xi'_1), w_2 \Psi(\xi'_2), \dots, w_N \Psi(\xi'_N) \right] \quad (5.65)$$

e

$$D = \Xi^{-2} = \text{diag} \left\{ \left(\frac{1}{\xi_1} \right)^2 I, \left(\frac{1}{\xi_2} \right)^2 I, \dots, \left(\frac{1}{\xi_N} \right)^2 I \right\}, \quad (5.66)$$

onde I é a matriz identidade 2×2 e os valores definidos por

$$\lambda = \frac{1}{\nu^2} \quad (5.67)$$

são os autovalores e U os autovetores reais e distintos do problema.

Encontradas as constantes de separação (ν_j) e as soluções elementares $\Phi_{\pm}(\nu_j)$ escritas como

$$\Phi_+(\nu_j) = \frac{1}{2\nu_j} \text{diag} [(\nu_j + \xi_1)\mathbf{I}, (\nu_j + \xi_2)\mathbf{I}, \dots, (\nu_j + \xi_N)\mathbf{I}] \mathbf{U}_j \quad (5.68)$$

e

$$\Phi_-(\nu_j) = \frac{1}{2\nu_j} \text{diag} [(\nu_j - \xi_1)\mathbf{I}, (\nu_j - \xi_2)\mathbf{I}, \dots, (\nu_j - \xi_N)\mathbf{I}] \mathbf{U}_j \quad (5.69)$$

tem-se a solução homogênea em ordenadas discretas da Eq.(5.10) escrita como

$$\mathbf{G}^h(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right]. \quad (5.70)$$

Considerando que um dos autovalores definidos tende a zero quando $N \rightarrow \infty$ por se tratar de um problema conservativo [4], negligencia-se a maior constante de separação entre ν_j e reesceve-se a Eq.(5.70) como

$$\mathbf{G}^h(\tau, \xi) = A_1^* \phi^1 + B_1^* \phi^2(\tau, \pm\xi_i) + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] \quad (5.71)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$. Aqui são introduzidas soluções exatas Φ^1 , de dimensão $2N \times 1$,

definido por N vetores da forma

$$\phi^1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.72)$$

e Φ_{\pm}^2 vetor com N componentes

$$\phi^2(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} 0 \\ \epsilon\tau - \xi \end{bmatrix}. \quad (5.73)$$

Encontrada a solução homogênea do problema, pode-se escrever a solução geral como

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{G}^P(\tau, \xi) + A_1^* \phi^1 + B_1^* \phi^2(\tau, \pm\xi_i) + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] \quad (5.74)$$

As constantes arbitrárias A_j e B_j são determinadas substituindo-se a Eq.(5.74) nas condições de contorno, obtém-se um sistema algébrico linear de ordem $4N$. A partir daí, encontra-se as grandezas físicas desejadas.

Capítulo 6

Solução através das Condições de Contorno

Uma vez conhecida a solução geral do problema, ou seja, a solução particular e homogênea, a próxima etapa é determinar os $4N$ coeficientes A_1, B_1, A_j e B_j , $j = 1, \dots, 2N$ que observa-se nas Eqs.(5.40) e (5.74) para os modelos **BGK** e **S**, respectivamente. Como o trabalho consiste em apresentar resultados para as condições de contorno difuso-especular e Cercignani-Lampis, as mesmas serão tratadas nas próximas seções.

Com o objetivo de adequar as condições de contorno às Eqs.(3.10) e (3.27), as condições de contorno propostas por Maxwell Eqs.(1.40) e (1.41) deverão ser multiplicadas pelos momentos de integração $\Phi_1(c_x, c_z)$ e $\Phi_2(c_x, c_z)$, assim reescreve-se as condições difuso-especular como

$$\mathbf{H}(-a, \xi) - (1 - \alpha_1)\mathbf{H}(-a, -\xi) = 0 \quad (6.1)$$

e

$$\mathbf{H}(a, -\xi) - (1 - \alpha_2)\mathbf{H}(a, \xi) = 0 \quad (6.2)$$

para o modelo **BGK**.

Para o modelo **S** as condições de contorno de Maxwell ficam da forma

$$\mathbf{G}(-a, \xi) - (1 - \alpha_1)\mathbf{G}(-a, -\xi) = 0 \quad (6.3)$$

e

$$\mathbf{G}(a, -\xi) - (1 - \alpha_2)\mathbf{G}(a, \xi) = 0. \quad (6.4)$$

Da mesma forma, multiplica-se as condições de contorno de Cercignani-Lampis pelos momentos de integração e reescreve-se as Eqs.(1.47) e (1.48) como

$$\mathbf{H}(-a, \xi) = A_l \int_0^\infty \mathbf{H}(-a, -\xi') f(\xi', \xi) d\xi' \quad (6.5)$$

e

$$\mathbf{H}(a, -\xi) = A_l \int_0^\infty \mathbf{H}(a, \xi') f(\xi', \xi) d\xi' \quad (6.6)$$

para o modelo **BGK**, já para o modelo **S** as condições de contorno propostas por Cercignani-Lampis são escritas como

$$\mathbf{G}(-a, \xi) = \int_0^\infty T(\xi' : \xi) \mathbf{G}(-a, -\xi') d\xi' \quad (6.7)$$

e

$$\mathbf{G}(a, -\xi) = \int_0^\infty T(\xi' : \xi) \mathbf{G}(a, \xi') d\xi' \quad (6.8)$$

onde

$$\mathbf{T}(\xi' : \xi) = \mathbf{Q}(\xi)^{-1} \mathbf{A}_l \mathbf{Q}(\xi') k(\xi' : \xi), \quad (6.9)$$

aqui tem-se

$$\mathbf{A}_l = \begin{bmatrix} 1 - \alpha l & 0 \\ 0 & (1 - \alpha l)^3 \end{bmatrix}, \quad (6.10)$$

observa-se que l nas Eq.(6.5)-(6.10) assumem os valores 1 ou 2, que representam as paredes do canal e $k(\xi' : \xi)$ é da forma

$$k(\xi' : \xi) = e^{-\xi'^2} f(\xi' : \xi) \quad (6.11)$$

com

$$f(\xi', \xi) = \frac{2\xi'}{\alpha n} \exp \left[-\frac{[(1 - \alpha n)^{1/2} \xi - \xi']^2}{\alpha n} \right] \hat{I}_0 \left[\frac{2(1 - \alpha n)^{1/2} \xi' \xi}{\alpha n} \right] \quad (6.12)$$

para $\xi, \xi' \in (0, \infty)$.

6.1 Núcleo de Maxwell (Difuso-especular)

Quando substitui-se a solução geral Eqs.(5.7) e (5.8) dos modelos **BGK** e **S** respectivamente, nas condições de contorno propostas por Maxwell Eqs.(6.1)-(6.4) obtém-se o seguinte sistema algébrico:

Modelo **BGK**

$$\begin{aligned}
 & A_1\alpha_1\phi^1 + B_1\phi^2 + \sum_{j=2}^{2N} A_j \left[\Phi_+(\nu_j) + (\alpha_1 - 1)\Phi_-(\nu_j) \right] + \\
 & \sum_{j=2}^{2N} B_j \left[\Phi_-(\nu_j)e^{-2a/\nu_j} + (\alpha_1 - 1)\Phi_+(\nu_j)e^{-2a/\nu_j} \right] = R_l(\xi) \\
 & A_1\alpha_2\phi^1 + B_1\phi^2 + \sum_{j=2}^{2N} A_j \left[\Phi_-(\nu_j)e^{-2a/\nu_j} + (\alpha_2 - 1)\Phi_+(\nu_j)e^{-2a/\nu_j} \right] + \\
 & \sum_{j=2}^{2N} B_j \left[\Phi_+(\nu_j) + (\alpha_2 - 1)\Phi_-(\nu_j) \right] = R_l(\xi)
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

onde ϕ^1 e ϕ^2 são vetores $2N \times 1$ definidos por N componentes, respectivamente, da forma

$$\phi^1(\tau) = \begin{bmatrix} -2\xi + \alpha_1\tau + \alpha_1\xi \\ 0 \end{bmatrix} \tag{6.14}$$

e

$$\phi^2(\tau) = \begin{bmatrix} 2\xi + \alpha_2\tau - \alpha_2\xi \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{6.15}$$

o vetor $R_l(\xi)$, ($l = 1, 2$) é do tipo

$$R_l(\xi_i) = (1 - \alpha_l)\mathbf{H}^p(\mp a, \mp \xi_i) - \mathbf{H}^p(\mp a, \mp \xi_i) \tag{6.16}$$

Modelo S

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j \left[\Phi(\nu_j, \xi_i) - (1 - \alpha_1) \Phi(\nu_j, -\xi_i) \right] + B_j \left[\Phi(\nu_j, -\xi_i) - (1 - \alpha_1) \Phi(\nu_j, \xi_i) \right] e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right] + \\
& \quad A_1^* \alpha_1 \phi_1 - B_1^* \left[a\epsilon \alpha_1 \phi_1 + (\alpha_1 - 2) \phi_2(0, \xi_i) \right] = R_1(\xi_i) \\
& \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j \left[\Phi(\nu_j, -\xi_i) - (1 - \alpha_2) \Phi(\nu_j, \xi_i) \right] e^{-2a\epsilon/\nu_j} + B_j \left[\Phi(\nu_j, \xi_i) - (1 - \alpha_2) \Phi(\nu_j, -\xi_i) \right] \right] \\
& \quad + A_1^* \alpha_2 \phi_1 - B_1^* \left[a\epsilon \alpha_2 \phi_1 + (\alpha_2 - 2) \phi_2(0, \xi_i) \right] = R_2(\xi_i) \quad (6.17)
\end{aligned}$$

para o problema de Fluxo de Poiseuille encontra-se

$$R_1(\xi_i) = \begin{bmatrix} -\alpha_1 \sqrt{30}/20 \\ -2a \xi - \alpha_1 \left((1/2)a^2 - a\xi + \xi^2 \right) \end{bmatrix} \quad (6.18)$$

e

$$R_2(\xi_i) = \begin{bmatrix} -\alpha_2 \sqrt{30}/20 \\ -2a \xi - \alpha_2 \left((1/2)a^2 - a\xi + \xi^2 \right) \end{bmatrix} \quad (6.19)$$

e para o problema *Creep* Térmico tem-se,

$$R_1(\xi_i) = \begin{bmatrix} (3/8)\alpha_1 \sqrt{30} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.20)$$

e

$$R_2(\xi_i) = \begin{bmatrix} (3/8)\alpha_2 \sqrt{30} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.21)$$

Observe que R_1 e R_2 dependem das soluções particulares dos problemas.

6.2 Núcleo de Cercignani-Lampis

De forma análoga ao núcleo Difuso-Especular, substitui-se a solução geral Eqs.(5.7) e (5.8) nas condições de contorno Cercignani-Lampis Eqs.(6.7) e (6.8), obtém-se os seguintes sistemas algébricos:

Modelo BGK

$$\begin{aligned}
& A_1 \left\{ \phi^1 - \left[A_1^* \phi^1 \sum_{k=1}^N \omega_k f_1(\xi_k, \xi_i) \right] \right\} + B_1 \left\{ \phi_-^2 - \left[A_1^* \phi_+^2 \sum_{k=1}^N \omega_k f_1(\xi_k, \xi_i) \right] \right\} + \\
& \sum_{j=2}^{2N} A_j \left\{ \left[\Phi_-(\nu_j) e^{-2a\epsilon/\nu_j} - A_1^* \sum_{k=1}^N \omega_k f_1(\xi_k, \xi_i) \Phi_+(\nu_j) e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right] \right\} + \\
& \sum_{j=2}^{2N} B_j \left\{ \left[\Phi_+(\nu_j) - A_1^* \sum_{k=1}^N \omega_k f_1(\xi_k, \xi_i) \Phi_-(\nu_j) \right] \right\} = \mathbf{R}_1^*(\xi) \\
& A_1 \left\{ \phi^1 - \left[A_2^* \phi^1 \sum_{k=1}^N \omega_k f_2(\xi_k, \xi_i) \right] \right\} + B_1 \left\{ \phi_-^2 - \left[A_2^* \phi_+^2 \sum_{k=1}^N \omega_k f_2(\xi_k, \xi_i) \right] \right\} + \\
& \sum_{j=2}^{2N} A_j \left\{ \left[\Phi_+(\nu_j) - A_2^* \sum_{k=1}^N \omega_k f_2(\xi_k, \xi_i) \Phi_-(\nu_j) \right] \right\} + \\
& \sum_{j=2}^{2N} B_j \left\{ \left[\Phi_-(\nu_j) e^{-2a\epsilon/\nu_j} - A_2^* \sum_{k=1}^N \omega_k f_2(\xi_k, \xi_i) \Phi_+(\nu_j) e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right] \right\} = \mathbf{R}_2^*(\xi) \quad (6.22)
\end{aligned}$$

tem-se que cada duas linhas do vetor R_1^* e R_2^* são, respectivamente, do tipo

$$R_1^*(\xi_i) = A_1 \sum_{k=1}^N \omega_k f_1(\xi_k, \xi_i) \mathbf{H}^p(a, \xi_k) - \mathbf{H}^p(a, -\xi_i) \quad (6.23)$$

e

$$R_2^*(\xi_i) = A_2 \sum_{k=1}^N \omega_k f_2(\xi_k, \xi_i) \mathbf{H}^p(-a, -\xi_k) - \mathbf{H}^p(-a, \xi_i) \quad (6.24)$$

Modelo S

$$\begin{aligned}
& A_1 \left\{ \phi^1 - \left[\phi^1 \sum_{k=1}^N \omega_k T(\xi'_k, \xi_i) \right] \right\} + B_1 \left\{ \phi^2_{(-\tau, \xi)} - \left[\sum_{k=1}^N \omega_k T(\xi'_k, \xi_i) \phi^2_{(-\tau, -\xi_k)} \right] \right\} + \\
& \quad \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \left[\Phi_{(\nu, \xi)} - \sum_{k=1}^N \omega_k T(\xi'_k, \xi_i) \Phi_{(\nu, -\xi_k)} \right] + \\
& \quad \sum_{j=2}^{2N} B_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} \left[\Phi_{(\nu, -\xi)} - \sum_{k=1}^N \omega_k T(\xi'_k, \xi_i) \Phi_{(\nu, \xi_k)} \right] = R_1(\xi_i) \\
& A_1 \left\{ \phi^1 - \left[\phi^1 \sum_{k=1}^N \omega_k T(\xi'_k, \xi_i) \right] \right\} + B_1 \left\{ \phi^2_{(\tau, -\xi)} - \left[\sum_{k=1}^N \omega_k T(\xi'_k, \xi_i) \phi^2_{(\tau, \xi_k)} \right] \right\} + \\
& \quad \sum_{j=2}^{2N} A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} \left[\Phi_{(\nu, -\xi)} - \sum_{k=1}^N \omega_k T(\xi'_k, \xi_i) \Phi_{(\nu, \xi'_k)} \right] + \\
& \quad \sum_{j=2}^{2N} B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \left[\Phi_{(\nu, \xi)} - \sum_{k=1}^N \omega_k T(\xi'_k, \xi_i) \Phi_{(\nu, -\xi'_k)} \right] = R_2(\xi_i) \quad (6.25)
\end{aligned}$$

onde

$$R_1(\xi_i) = A \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k'^2} f(\xi'_k, \xi_i) \mathbf{G}^P(-a, -\xi'_k) - \mathbf{G}^P(-a, \xi) \quad (6.26)$$

$$R_2(\xi_i) = A^* \sum_{k=1}^N \omega_k e^{-\xi_k'^2} f(\xi'_k, \xi_i) \mathbf{G}^P(a, \xi'_k) - \mathbf{G}^P(a, -\xi) \quad (6.27)$$

Como $R_1(\xi_i)$ e $R_2(\xi_i)$ são dependentes da solução particular de cada problema proposto, tem-se para o problema de Fluxo de Poiseuille

$$R_1(\xi_i) = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^N w(k) e^{-\xi_k'^2} f(\xi'_k, \xi_i) (1 - \alpha t_1) \sqrt{30}/20 \\ \sum_{k=1}^N w(k) e^{-\xi_k'^2} f(\xi'_k, \xi_i) (1 - \alpha t_1) \Omega_1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -\sqrt{30}/20 \\ \epsilon \frac{a^2}{2} - a\xi - \xi^2 \end{bmatrix} \quad (6.28)$$

e

$$R_2(\xi_i) = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^N w(k)e^{-\xi'^2} f(\xi'_k, \xi_i)(1 - \alpha t_2)\sqrt{30}/20 \\ \sum_{k=1}^N w(k)e^{-\xi'^2} f(\xi'_k, \xi_i)(1 - \alpha t_2)\Omega_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -\sqrt{30}/20 \\ \epsilon \frac{a^2}{2} - a\xi - \xi^2 \end{bmatrix} \quad (6.29)$$

onde

$$\Omega_1 = (\sqrt{2/15}(\xi'^2 - 1/2)\sqrt{30}/20) - (\sqrt{2/15}(\xi^2 - 1/2)\sqrt{30}/20(1 - \alpha t_1)^2) + ((1/2)a^2 - a\xi' + \xi'^2) \quad (6.30)$$

e

$$\Omega_2 = (\sqrt{2/15}(\xi'^2 - 1/2)\sqrt{30}/20) - (\sqrt{2/15}(\xi^2 - 1/2)\sqrt{30}/20(1 - \alpha t_2)^2) + ((1/2)a^2 - a\xi' + \xi'^2) \quad (6.31)$$

Para o problema *Creep* Térmico tem-se os seguintes valores para $R_1(\xi_i)$ e $R_2(\xi_i)$

$$R_1(\xi_i) = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^N w(k)e^{-\xi'^2} f(\xi'_k, \xi_i)(1 - \alpha t_1)^3(-3/8\epsilon)\sqrt{30} \\ \sum_{k=1}^N (1 - \alpha t_1)e^{-\xi_k'^2} f(\xi'_k, \xi_i)(-3/4)\Lambda_1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} (-3/8\epsilon)\sqrt{30} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.32)$$

e

$$R_2(\xi_i) = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^N w(k)e^{-\xi'^2} f(\xi'_k, \xi_i)(1 - \alpha t_2)^3(-3/8\epsilon)\sqrt{30} \\ \sum_{k=1}^N (1 - \alpha t_2)e^{-\xi_k'^2} f(\xi'_k, \xi_i)(-3/4)\Lambda_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} (-3/8\epsilon)\sqrt{30} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.33)$$

onde

$$\Lambda_1 = (\xi'^2 - 1/2) - (\xi^2 - 1/2)(1 - \alpha t_1)^2 \quad (6.34)$$

e

$$\Lambda_2 = (\xi'^2 - 1/2) - (\xi^2 - 1/2)(1 - \alpha t_2)^2. \quad (6.35)$$

6.3 Quantidades de Interesse

Para determinar as grandezas físicas de interesse, substitui-se a solução geral do problema (solução homogênea e particular) nas Eqs.(4.3)-(4.8). Logo, tem-se para as seguintes quantidades de interesse:

6.3.1 Núcleo Difuso-Especular

Modelo BGK:

Problema de Fluxo de Poiseuille

- Perfil de velocidade:

$$u_p(\tau) = \left(\frac{1}{2}\right)\left(\tau^2 + 1\right) + A_1^* + B_1^* \epsilon \tau + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] V(\nu_j) \quad (6.36)$$

com

$$V(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi_{(\xi_k)} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \left[\Phi_{(\nu_j, \xi_k)} + \Phi_{(\nu_j, -\xi_k)} \right] \quad (6.37)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_p(\tau) = \frac{1}{2} + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] Y(\nu_j) \quad (6.38)$$

com

$$Y(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi_{(\xi_k)} \begin{bmatrix} \xi_k^2 - \frac{1}{2} \\ 2^{\frac{1}{2}} \end{bmatrix}^T \left[\Phi_{(\nu_j, \xi_k)} + \Phi_{(\nu_j, -\xi_k)} \right] \quad (6.39)$$

- Taxa de Fluxo de Partícula:

$$U_p = \frac{1}{2a^2} \left[a(a^2/3 + 1) + 2aA_1^* + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) (1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j}) V(\nu_j) \right] \quad (6.40)$$

- Taxa de Fluxo de Calor:

$$Q_p = \frac{1}{2a^2} \left[a + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) (1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j}) Y(\nu_j) \right] \quad (6.41)$$

Problema *Creep* Térmico

- Perfil de velocidade:

$$u_T(\tau) = A_1^* + B_1^* \tau + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] V(\nu_j) \quad (6.42)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_T(\tau) = -\frac{5}{4} + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] Y(\nu_j) \quad (6.43)$$

- Taxa de Fluxo de Partícula:

$$U_T = \frac{1}{2a^2} \left[2aA_1^* + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) V(\nu_j) \right] \quad (6.44)$$

- Taxa de Fluxo de Calor:

$$Q_T = \frac{1}{2a^2} \left[-\frac{5a}{2} + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) Y(\nu_j) \right] \quad (6.45)$$

Modelo S:

Problema de Fluxo de Poiseuille

- Perfil de velocidade:

$$u_p(\tau) = \left(\frac{1}{2} \right) \left(\tau^2 + 1 \right) + A_1^* + B_1^* \epsilon \tau + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] V(\nu_j) \quad (6.46)$$

com

$$V(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi_{(\xi_k)} \left[\begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right]^T \left[\Phi_{(\nu_j, \xi_k)} + \Phi_{(\nu_j, -\xi_k)} \right] \quad (6.47)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_p(\tau) = \frac{3}{4\epsilon} + \sqrt{\frac{15}{2}} \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] Y(\nu_j) \quad (6.48)$$

onde

$$Y(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k) \left[\begin{array}{c} \xi_k^2 - \frac{1}{2} \\ 2^{\frac{1}{2}} \end{array} \right]^T \left[\Phi_{(\nu_j, \xi_k)} + \Phi_{(\nu_j, -\xi_k)} \right] \quad (6.49)$$

- Taxa de Fluxo de Partícula:

$$U_p = \frac{1}{2a^2} \left[a(a^2/3 + 1) + 2aA_1^* + 2 \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) (1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j}) V(\nu_j) \right] \quad (6.50)$$

- Taxa de Fluxo de Calor:

$$Q_p = \frac{1}{2a^2} \left[\frac{3a}{2\epsilon} + \frac{2}{\epsilon} \sqrt{\frac{15}{2}} \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) (1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j}) Y(\nu_j) \right] \quad (6.51)$$

Problema *Creep* Térmico

- Perfil de velocidade:

$$u_T(\tau) = A_1^* + B_1^* \epsilon \tau + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] V(\nu_j) \quad (6.52)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_T(\tau) = -\frac{15}{8\epsilon} + \sqrt{\frac{15}{2}} \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] Y(\nu_j) \quad (6.53)$$

- Taxa de Fluxo de Partícula:

$$U_T = \frac{1}{2a^2} \left[2aA_1^* + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) V(\nu_j) \right] \quad (6.54)$$

- Taxa de Fluxo de Calor:

$$Q_T = \frac{1}{2a^2} \left[-\frac{15a}{4\epsilon} + \sqrt{\frac{15}{2}} \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) Y(\nu_j) \right] \quad (6.55)$$

6.3.2 Núcleo Cercignani-Lampis

Modelo BGK:

Problema de Fluxo de Poiseuille

- Perfil de velocidade:

$$u_p(\tau) = \left(\frac{1}{2}\right) \left(\tau^2 + 1\right) + A_1^* + B_1^* \epsilon \tau + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] V(\nu_j) \quad (6.56)$$

com

$$V(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi_{(\xi_k)} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \left[\Phi_{(\nu_j, \xi_k)} + \Phi_{(\nu_j, -\xi_k)} \right] \quad (6.57)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_p(\tau) = \frac{1}{2} + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] Y(\nu_j) \quad (6.58)$$

com

$$Y(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi_{(\xi_k)} \begin{bmatrix} \xi_k^2 - \frac{1}{2} \\ 2^{\frac{1}{2}} \end{bmatrix}^T \left[\Phi_{(\nu_j, \xi_k)} + \Phi_{(\nu_j, -\xi_k)} \right] \quad (6.59)$$

- Taxa de Fluxo de Partícula:

$$U_p = \frac{1}{2a^2} \left[a(a^2/3 + 1) + 2aA_1^* + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) (1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j}) V(\nu_j) \right] \quad (6.60)$$

- Taxa de Fluxo de Calor:

$$Q_p = \frac{1}{2a^2} \left[a + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) (1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j}) Y(\nu_j) \right] \quad (6.61)$$

Problema *Creep* Térmico

- Perfil de velocidade:

$$u_T(\tau) = A_1^* + B_1^* \epsilon \tau + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] V(\nu_j) \quad (6.62)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_T(\tau) = -\frac{5}{4\epsilon} + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] Y(\nu_j) \quad (6.63)$$

- Taxa de Fluxo de Partícula:

$$U_T = \frac{1}{2a^2} \left[2aA_1^* + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) V(\nu_j) \right] \quad (6.64)$$

- Taxa de Fluxo de Calor:

$$Q_T = \frac{1}{2a^2} \left[-\frac{5a}{2\epsilon} + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) Y(\nu_j) \right] \quad (6.65)$$

Modelo S:

Problema de Fluxo de Poiseuille

- Perfil de velocidade:

$$u_p(\tau) = \frac{1}{2}(\tau^2 + 1) + A_1^* + B_1^* \tau + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] V(\nu_j) \quad (6.66)$$

com

$$V(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi_{(\xi_k)} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \left[\Phi_{(\nu_j, \xi_k)} + \Phi_{(\nu_j, -\xi_k)} \right] \quad (6.67)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_p(\tau) = \frac{3}{4\epsilon} + \sqrt{\frac{15}{2}} \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] Y(\nu_j) \quad (6.68)$$

onde

$$Y(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi_{(\xi_k)} \begin{bmatrix} \xi_k^2 - \frac{1}{2} \\ 2^{\frac{1}{2}} \end{bmatrix}^T \left[\Phi_{(\nu_j, \xi_k)} + \Phi_{(\nu_j, -\xi_k)} \right] \quad (6.69)$$

- Taxa de Fluxo de Partícula:

$$U_p = \frac{1}{2a^2} \left[a(a^2/3 + 1) + 2aA_1^* + 2 \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) V(\nu_j) \right] \quad (6.70)$$

- Taxa de Fluxo de Calor:

$$Q_p = \frac{1}{2a^2} \left[(3a/2) + 2\sqrt{\frac{15}{2}} \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) Y(\nu_j) \right] \quad (6.71)$$

Problema Creep Térmico

- Perfil de velocidade:

$$u_T(\tau) = A_1^* + B_1^* \epsilon \tau + \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] V(\nu_j) \quad (6.72)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_T(\tau) = -\frac{15}{8\epsilon} + \sqrt{15/2} \sum_{j=2}^{2N} \left[A_j e^{-\epsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\epsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] Y(\nu_j) \quad (6.73)$$

- Taxa de Fluxo de Partícula:

$$U_T = \frac{1}{2a^2} \left[2aA_1^* + \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) V(\nu_j) \right] \quad (6.74)$$

- Taxa de Fluxo de Calor:

$$Q_T = \frac{1}{2a^2} \left[-\frac{15a}{4} + \sqrt{\frac{15}{2}} \sum_{j=2}^{2N} \nu_j (A_j + B_j) \left(1 - e^{-2a\epsilon/\nu_j} \right) Y(\nu_j) \right] \quad (6.75)$$

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

Capítulo 7

Resultados Numéricos

Para obter os resultados numéricos correspondentes as quantidades de interesse definidas pelas Eqs.(4.3)-(4.8), define-se primeiramente o esquema de quadratura a ser aplicado juntamente com a versão analítica do método de ordenadas discretas.

Deseja-se mapear os pontos ξ do intervalo $[0, \infty)$ para os pontos $u(\xi)$ do intervalo $[0, 1]$, para isso, costuma-se utilizar a transformação não linear

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

em seguida, utiliza-se o esquema de quadratura de Gauss-Legendre[9] mapeado linearmente no intervalo $[0, 1]$. Após definir o esquema de quadratura, determina-se os autovalores (constante de separação) e autovetores já definidos para problemas de fluxo e de calor, para os modelos **BGK** e **S**. Em seguida, determina-se as funções elementares definidas pelas Eqs.(5.37)-(5.38) e (5.68)-(5.69), a fim de resolver o sistema algébrico linear que define as constantes arbitrárias para a solução em ordenadas discretas. Para a implementação computacional utiliza-se a linguagem FORTRAN fazendo uso de subrotinas dos pacotes LINPACK [27] e EISPACK [71].

A seguir, apresenta-se resultados numéricos para as quantidades de interesse para cada problema proposto e, quando possível, comparações com trabalhos já existentes na literatura.

A fim de testar a consistência dos resultados apresentados neste trabalho, reproduziu-se analítico e computacionalmente o problema de Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico para o modelo **BGK** com as condições de contorno difuso-especular e Cercignani-Lampis com placas diferentes, obtendo-se os mesmos resultados do encontrado nas

referências [38, 39]. Desta forma possibilita-se a comparação de modelos cinéticos entre si e com resultados disponíveis na literatura.

Para os resultados apresentados, considera-se o parâmetro $\epsilon = \epsilon_p = 1$, a largura do canal $2a$, o coeficiente de acomodação α e a posição normalizada τ/a no canal em que ocorre o fenômeno. A convergência é obtida a partir de $N = 60$ na implementação do número de pontos de quadratura. As notações *DE* e *CL* representam, respectivamente, condições de contorno difuso-especular (Maxwell) e condições de contorno de Cercignani-Lampis. Nas tabelas, as notações (-1),(-2), (1) e (2) representam, respectivamente, 10^{-1} , 10^{-2} , 10^1 e 10^2 .

Os resultados encontrados para os problemas de Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico, modelo **S**, com condições de contorno propostas por Cercignani-Lampis e considerando a constituição química das placas diferentes, segundo nosso conhecimento ainda não estão disponíveis na literatura.

7.1 Fluxo de Poiseuille

Os resultados numéricos para as grandezas macroscópicas desejadas para o problema de Fluxo de Poiseuille são apresentados nas tabelas(7.1)-(7.4).

Na obtenção dos resultados numéricos, considera-se o gás Argônio (Ar), os valores para o coeficiente de acomodação tangencial para a placa 1 são formulados em termos dos valores experimentais dados por Lord [41]. Para a placa 2, o valor do coeficiente foi reproduzido por Sharipov [63] que segue o trabalho experimental de Porodnov *et al* [49]. Em relação ao coeficiente de acomodação normal, utiliza-se os valores baseados nos resultados experimentais apresentados no trabalho de Thomas[73].

Ar: $\alpha_{t1} = 0,916$, $\alpha_{n1} = 0,222$, $\alpha_{t2} = 0,67$ e $\alpha_{n2} = 0,440$.

Tabela 7.1: Fluxo de Poiseuille: perfil de velocidade $u(\tau)$, onde $2a = 1$.

τ/a	<i>BGK - CL</i> [38]	<i>BGK - DE</i> [38]	<i>S - DE</i>	<i>S - CL</i>
		$\alpha = \alpha_t$	$\alpha = \alpha_t$	
0,0	-1,10392	-1,15527	-7,00879(-1)	-1,11454
0,1	-1,10747	-1,14392	-6,91825(-1)	-1,11819
0,2	-1,10566	-1,12723	-6,78023(-1)	-1,11641
0,3	-1,09839	-1,10502	-6,59432(-1)	-1,10907
0,4	-1,08542	-1,07698	-6,35932(-1)	-1,09596
0,5	-1,06638	-1,04263	-6,07304(-1)	-1,07670
0,6	-1,04068	-1,00122	-5,73181(-1)	-1,05071
0,7	-1,00730	-9,51548(-1)	-5,32944(-1)	-1,01697
0,8	-9,64435(-1)	-8,91423(-1)	-4,85452(-1)	-9,73688(-1)
0,9	-9,08010(-1)	-8,15975(-1)	-4,28148(-1)	-9,16816(-1)
1,0	-8,17439(-1)	-7,00381(-1)	-3,47998(-1)	-8,25893(-1)

Na Tabela 7.1 apresenta-se resultados obtidos para o perfil de velocidade considerando as duas condições de contorno (Maxwell e Cercignani-Lampis). Utiliza-se, para as condições de contorno proposta por Maxwell (difuso-especular) $\alpha = \alpha_t$, ou seja, $\alpha_{t1} = 0,916$ e $\alpha_{t2} = 0,67$. Percebe-se na tabela 7.1 que os resultados encontrados para o modelo **S-CL** aproximam-se mais dos resultados obtidos por Knackfuss [38] para o modelo **BGK-CL** e **BGK -DE** diferentemente dos valores encontrados para o modelo **S-DE** que diferem de forma significativa.

Tabela 7.2: Fluxo de Poiseuille: perfil de fluxo de calor $q(\tau)$, onde $2a = 1$.

τ/a	<i>BGK - CL</i> [38]	<i>BGK - DE</i> [38]	<i>S - DE</i>	<i>S - CL</i>
		$\alpha = \alpha_t$	$\alpha = \alpha_t$	
0,0	1,84881(-1)	1,90650(-1)	3,06644(-1)	2,30200(-1)
0,1	1,85088(-1)	1,88461(-1)	3,08328(-1)	2,30465(-1)
0,2	1,83866(-1)	1,84853(-1)	3,08583(-1)	2,28948(-1)
0,3	1,81158(-1)	1,79734(-1)	3,07384(-1)	2,25590(-1)
0,4	1,76855(-1)	1,72948(-1)	3,04660(-1)	2,20272(-1)
0,5	1,70768(-1)	1,64257(-1)	3,00285(-1)	2,12794(-1)
0,6	1,62596(-1)	1,53289(-1)	2,94051(-1)	2,02839(-1)
0,7	1,51839(-1)	1,39439(-1)	2,85603(-1)	1,89880(-1)
0,8	1,37585(-1)	1,21612(-1)	2,74294(-1)	1,72960(-1)
0,9	1,17803(-1)	9,73735(-1)	2,58678(-1)	1,49955(-1)
1,0	8,21985(-2)	5,43121(-1)	2,31359(-1)	1,10079(-1)

Na tabela 7.2 apresenta-se os resultados para o perfil de fluxo de calor no problema de Fluxo de Poiseuille, considera-se os resultados já encontrados por Knackfuss [38] e verifica-se que os valores obtidos para o modelo **S-CL** são os que mais se aproximam dos mesmos.

Tabela 7.3: Fluxo de Poiseuille: Taxa de Fluxo de partícula, U .

a	$BGK - CL[38]$	$BGK - DE[38]$	$S - DE$	$S - CL$
0,05	-2,53284	-2,71110	-2,24297	-22,73398
0,1	-2,29651	-2,41074	-1,93712	-11,66117
0,15	-2,18361	-2,27541	-1,77871	-7,97718
0,2	-2,11733	-2,20068	-1,67493	-6,14525
0,25	-2,07501	-2,15646	-1,59871	-5,05509
0,3	-2,04704	-2,13023	-1,53862	-4,33593
0,35	-2,02848	-2,11567	-1,48883	-3,82865
0,4	-2,01650	-2,10919	-1,44600	-3,45365
0,45	-2,00933	-2,10858	-1,40804	-3,16665
0,5	-2,00581	-2,11239	-1,37353	-2,94112
1,0	-2,06507	-2,26434	-1,08168	-2,02419
3,0	-2,63360	-3,27839	-7,70357	-1,84104
5,0	-3,27332	-4,38621	-3,29714	-2,12050
7,0	-3,92635	-5,51221	-3,25624	-2,44078
9,0	-4,58469	-6,64522	-3,44312	-2,76937
10,0	-4,91496	-7,21316	-3,56470	-2,93468
50,0	-1,82240(1)	-3,00567(1)	-9,95985	-9,58965
100,0	-3,48874(1)	-5,86461(1)	-18,26312	-17,92062

Na tabela (7.3) são apresentados os resultados encontrados para a Taxa de Fluxo de partícula para o problema de Fluxo de Poiseuille. Observa-se que para a muito pequeno há uma diferença considerável comparado com os outros valores encontrados. Quando aumenta-se o canal percebe-se que há uma concordância em relação ao mesmo modelo S.

Tabela 7.4: Fluxo de Poiseuille: Taxa de Fluxo de calor, Q .

a	$BGK - CL[38]$	$BGK - DE[38]$	$S - DE$	$S - CL$
0,05	6,07628(-1)	8,67004(-1)	1,02291	29,23416
0,1	5,25595(-1)	6,75620(-1)	8,64808(-1)	14,21353
0,15	4,70038(-1)	5,74393(-1)	7,80705(-1)	9,19243
0,2	4,28602(-1)	5,07598(-1)	7,24589(-1)	6,67149
0,25	3,95904(-1)	4,58737(-1)	6,82966(-1)	5,15089
0,3	3,95904(-1)	4,20761(-1)	6,50123(-1)	4,13070
0,35	3,69121(-1)	3,90038(-1)	6,23134(-1)	3,39667
0,4	3,46593(-1)	3,64462(-1)	6,00318(-1)	2,84165
0,45	3,27263(-1)	3,42708(-1)	5,80612(-1)	2,40610
0,5	3,10416(-1)	3,23893(-1)	5,63326(-1)	2,05431
1,0	2,10961(-1)	2,15483(-1)	4,59247(-1)	3,88788(-1)
3,0	9,80331(-2)	9,77650(-2)	-8,81116(-3)	-1,10095
5,0	6,42630(-2)	6,36725(-2)	1,41682(-1)	-1,69982
7,0	4,77406(-2)	4,71694(-2)	1,19435(-1)	-2,16345
9,0	3,79460(-2)	3,74355(-2)	1,00545(-1)	-2,58541
10,0	3,44094(-2)	3,39290(-2)	9,29074(-2)	-2,78965
50,0	7,25414(-3)	7,12825(-3)	2,20327(-2)	-10,66534
100,0	3,65031(-3)	3,58554(-3)	1,12259(-2)	-20,48441

Na tabela (7.4) apresenta-se os resultados obtidos para a Taxa do fluxo de Calor para o caso de um gás confinado entre placas paralelas diferentes. Observa-se que com a muito pequeno ou muito grande, a taxa de fluxo de calor para o modelo **S** e condições de contorno de Cercignani-Lampis difere significativamente comparado com os outros modelos analisados

7.2 *Creep* Térmico

Para o problema *Creep* Térmico, os resultados numéricos para as grandezas desejadas são apresentados nas tabelas (7.5)-(7.8). Nas tabelas (7.5) e (7.6) apresenta-se os resultados do perfil de velocidade e perfil de fluxo de calor, respectivamente, ambos comparados com os resultados obtidos em [39]. Considera-se o gás Argônio (Ar), onde $\alpha_{t1} = 0,916$, $\alpha_{n1} = 0,222$, $\alpha_{t2} = 0,67$ e $\alpha_{n2} = 0,440$, baseado nas condições de Maxwell (difuso-especular) e Cercignani-Lampis sem condição de simetria entre as placas.

Tabela 7.5: *Creep* Térmico: perfil de velocidade $u(\tau)$, onde $2a = 1$.

τ/a	<i>BGK</i> – <i>CL</i> [39]	<i>BGK</i> – <i>DE</i> [39]	<i>S</i> – <i>DE</i>	<i>S</i> – <i>CL</i>
		$\alpha = \alpha_t$	$\alpha = \alpha_t$	
0,0	1,75957(-1)	1,78803(-1)	2,51162(-1)	2,20609(-1)
0,2	1,74686(-1)	1,75256(-1)	2,52469(-1)	2,18841(-1)
0,4	1,69138(-1)	1,69138(-1)	2,48390(-1)	2,11309(-1)
0,6	1,58442(-1)	1,58442(-1)	2,38076(-1)	1,97005(-1)
0,8	1,40219(-1)	1,40219(-1)	2,19106(-1)	1,73182(-1)
1,0	1,01487(-1)	1,01487(-1)	1,77778(-1)	1,24807(-1)

Percebe-se na Tabela (7.5) que o perfil de velocidade para o modelo **S** com as condições de contorno de Maxwell e Cercignani-Lampis, diferem de maneira significativa comparado com o modelo **BGK**[39] com as mesmas condições de contorno.

Para o modelo **S-DE**, considera-se $\alpha = \alpha_t$, como os resultados se referem a placas diferentes tem-se $\alpha_{t1} = 0,916$ e $\alpha_{t2} = 0,67$. Observa-se que há concordância entre os resultados obtidos para o modelo **S** e condições de contorno diferentes.

Tabela 7.6: *Creep* Térmico: perfil de fluxo de calor $q(\tau)$, onde $2a = 1$.

τ/a	<i>BGK</i> – <i>CL</i> [39]	<i>BGK</i> – <i>DE</i> [39]	<i>S</i> – <i>DE</i>	<i>S</i> – <i>CL</i>
0,0	-7,95456(-1)	-8,49444(-1)	-1,08082	-9,95036(-1)
0,2	-7,89891(-1)	-8,37501(-1)	-1,08198	-9,87375(-1)
0,4	-7,69944(-1)	-8,12911(-1)	-1,06672	-9,60007(-1)
0,6	-7,31978(-1)	-7,71888(-1)	-1,03218	-9,08679(-1)
0,8	-6,66169(-1)	-7,04812(-1)	-9,70140	-8,22009(-1)
1,0	-5,20247(-1)	-5,61409(-1)	-8,36026	-6,39701(-1)

Na tabela (7.6) apresenta-se resultados para o fluxo de calor para o problema *Creep* Térmico. Considera-se a largura do canal $2a = 1$, para o modelo **S-DE** tem-se $\alpha_{t1} = 0,916$ e $\alpha_{t2} = 0,67$, já que a condição de contorno difuso-especular utiliza apenas um coeficiente de acomodação para cada placa. Percebe-se que os resultados para o modelo **S-DE** diferem significativamente em alguns pontos quando comparados com os outros modelos analisados.

Tabela 7.7: *Creep* Térmico: Taxa de Fluxo de partícula, U .

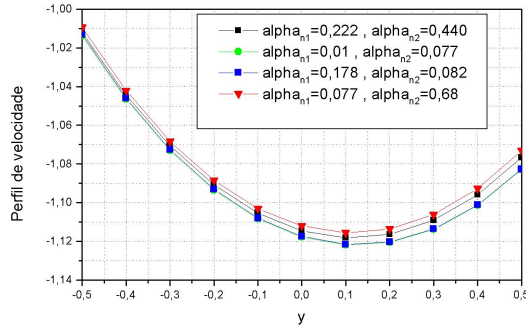
a	$BGK - CL[39]$	$BGK - DE[39]$	$S - DE$	$S - CL$
0,1	6,07628(-1)	6,74913(-1)	9,36990(-1)	7,99164(-1)
1,0	2,10961(-1)	2,08640(-1)	4,50184(-1)	3,86418(-1)
10,0	3,44094(-2)	2,38784(-2)	9,07108(-2)	9,56839(-2)

Tabela 7.8: *Creep* Térmico: Taxa de Fluxo de calor, Q .

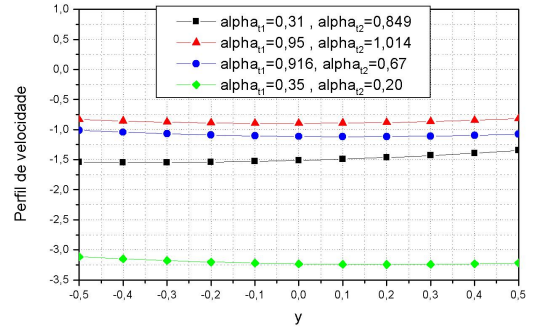
a	$BGK - CL[39]$	$BGK - DE[39]$	$S - DE$	$S - CL$
0,1	-3,13029	-3,72527	-5,19305	-4,17746
1,0	-9,13232(-1)	-9,62584(-1)	-1,99831	-1,79970
10,0	-1,21055(-1)	-1,21692(-1)	-3,47316(-1)	-3,42260(-1)

Nas tabelas (7.7) e (7.8) são apresentados os resultados obtidos para a taxa de fluxo de partículas e taxa de fluxo de calor, respectivamente. Observa-se que para a muito pequeno os valores possuem concordância, para a muito grande os valores não diferem significativamente quando compara-se os resultados obtidos para o mesmo modelo.

Os gráficos a seguir, foram gerados considerando as tabelas apresentadas como forma de auxiliar a análise do comportamento dos perfis frente à variação dos coeficientes de acomodação.



(a) Fluxo de Poiseuille- Modelo S- CL

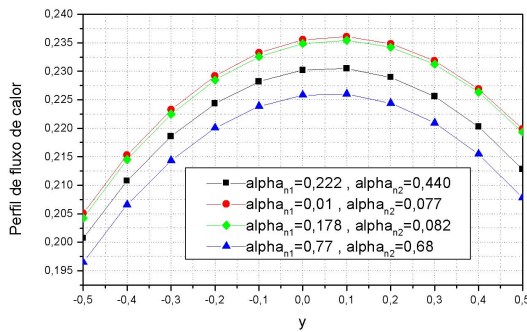


(b) Fluxo de Poiseuille- Modelo S- CL

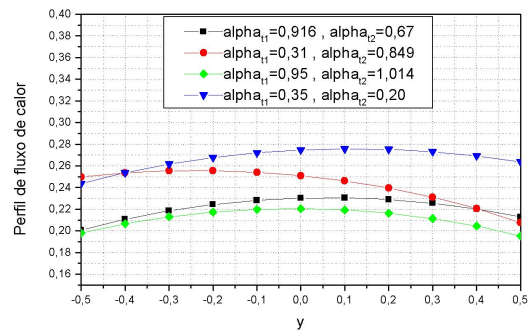
Nas figuras (a) e (b) observa-se graficamente o comportamento das soluções obtidas para o perfil de velocidade considerando as condições de contorno de Cercignani-Lampis.

No gráfico (a) utiliza-se a largura do canal $2a = 1$, $\alpha_{t1} = 0,916$ e $\alpha_{t2} = 0,67$, há uma variação significativa no coeficiente de acomodação normal (α_n), no entanto há pouca diferença no perfil de velocidade.

No gráfico (b) utiliza-se $2a = 1$, o coeficiente de acomodação normal permanece constante, $\alpha_{n1} = 0,222$ e $\alpha_{n2} = 0,440$, neste caso, há uma variação no coeficiente de acomodação tangencial (α_t). Percebe-se que para α_t pequeno a diferença no perfil de velocidade é significativa.



(c) Fluxo de Poiseuille- Modelo S- CL

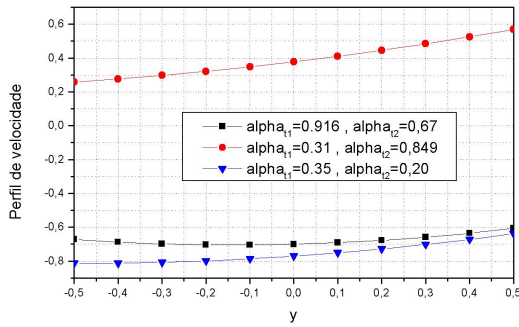


(d) Fluxo de Poiseuille- Modelo S- CL

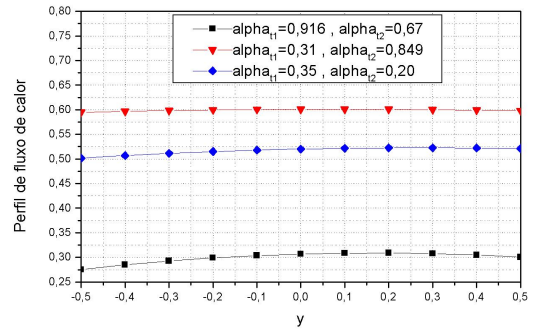
Nos gráficos (c) e (d) observa-se o comportamento do Perfil de Fluxo de Calor, considerando o modelo **S** e as condições de contorno de Cercignani-Lampis.

Na figura (c) utiliza-se $2a = 1$, o coeficiente de acomodação normal (α_n) varia e o coeficiente de acomodação tangencial permanece constante ($\alpha_{t1} = 0,916$ e $\alpha_{t2} = 0,67$). Observa-se que com a variação de α_n há pouca diferença no perfil de fluxo de calor.

Na figura (d) utiliza-se $2a = 1$, $\alpha_{n1} = 0,222$ e $\alpha_{n2} = 0,440$, observa-se que para α_{t1} e α_{t2} pequeno há um aumento no perfil de fluxo de calor.

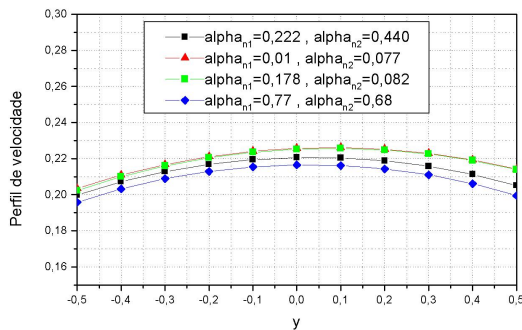


(e) Fluxo de Poiseuille- Modelo S- DE

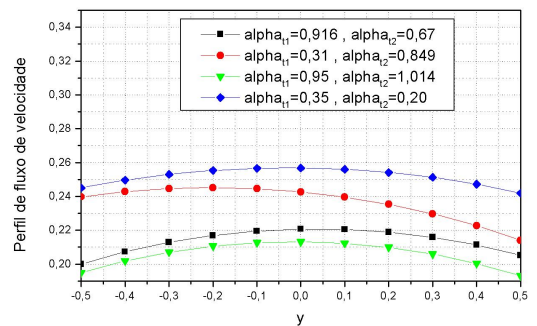


(f) Fluxo de Poiseuille- Modelo S- DE

Os gráficos (e) e (f) apresentam resultados para o problema de Fluxo de Poiseuille, considera-se o modelo **S** com as condições de contorno difuso-especular que apresenta somente um coeficiente de acomodação. No gráfico (e) observa-se resultados para o perfil de velocidade quando há variação no coeficiente, para os valores estipulados a diferença na velocidade é significativa quando $\alpha_{t1} = 0,31$ e $\alpha_{t2} = 0,849$. No gráfico (f) tem-se os resultados para o perfil de fluxo de calor, observa-se que quando o valor de α é pequeno, a temperatura tem pouca alteração.



(g) *Creep* Térmico- Modelo S -CL



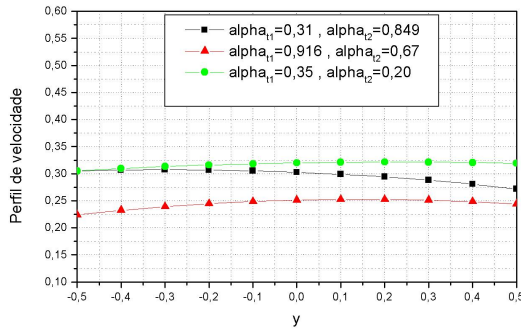
(h) *Creep* Térmico- Modelo S -CL

Nos gráficos (g) e (h) considera-se o problema *Creep* Térmico, a largura do canal $2a = 1$ e modelo **S** com a utilização das condições de contorno de Cercignani-Lampis.

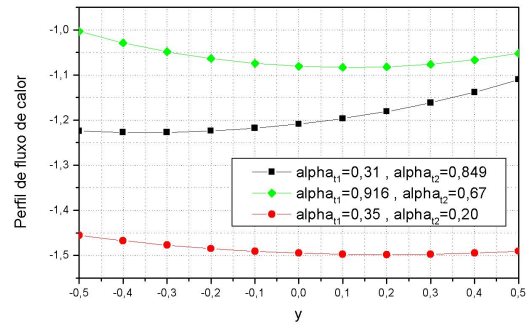
Observa-se no gráfico (g) simulações realizadas para o perfil de velocidade onde o coeficiente de acomodação tangencial permanece fixo ($\alpha_{t1} = 0,916$ e $\alpha_{t2} = 0,67$)

e o coeficiente de acomodação normal (α_n) varia, neste caso a velocidade cresce ou decresce de maneira uniforme. Percebe-se uma similaridade entre as curvas que representam as grandezas obtidas através das soluções dos dois problemas.

No gráfico (h) constata-se que há uma variação mais acentuada na velocidade quando o α_t varia e α_n passa a ser fixado ($\alpha_{n1} = 0,222$ e $\alpha_{t2} = 0,440$).



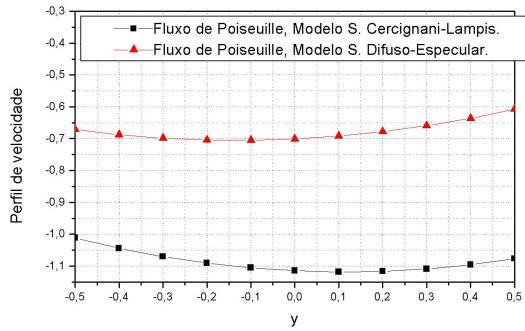
(i) *Creep* Térmico- Modelo S -DE



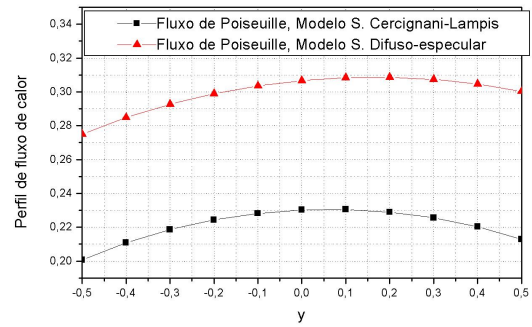
(j) *Creep* Térmico- Modelo S -DE

Simulações para o problema *Creep* Térmico, modelo **S** considerando as condições de contorno de Maxwell (difuso-especular) são apresentadas nas figuras (i) e (j), considera-se a largura do canal $2a = 1$ e apenas um coeficiente de acomodação para cada placa.

Observa-se no gráfico (i) que há pouca variação no perfil de velocidade quando são atribuídos diversos valores para α_t . No gráfico (j) obtém-se simulações para o perfil de fluxo de calor e verifica-se que para valores pequenos ($\alpha_{t1} = 0,35, \alpha_{t2} = 0,20$) do coeficiente de acomodação tem-se um decréscimo de calor. Quando utiliza-se valores maiores para os coeficientes tem-se um crescimento de fluxo de calor. Para estes valores atribuídos constata-se uma diferença significativa no fluxo de calor.

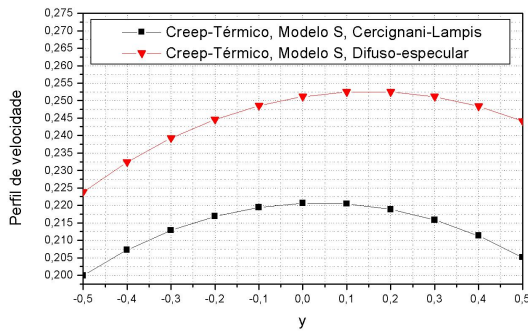


(k) Poiseuille- Modelo S- Perfil de Velocidade

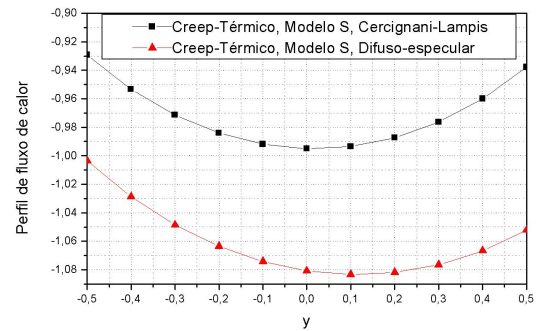


(l) Poiseuille- Modelo S -Perfil de Fluxo de calor

Nos gráficos (k) e (l) observa-se simulações quanto a diferença entre as duas condições de contorno tratadas neste trabalho (Maxwell e Cercignani-Lampis) para o modelo **S**. Tem-se o perfil de velocidade e o perfil do fluxo de calor, respectivamente, nas figuras (k) e (l), percebe-se que a diferença entre os resultados obtidos para as duas condições de contorno permanece quase constante, havendo pequenas oscilações na velocidade e no calor.



(m) *Creep* Térmico- Modelo S



(n) *Creep* Térmico- Modelo S

Os gráficos (m) e (n) apresentam simulações quanto a diferença entre as duas condições de contorno (Cercignani-Lampis e Maxwell) para o modelo **S** e problema *Creep* Térmico. Considera-se a largura do canal $2a = 1$, $\alpha_{t1} = 0,916$, $\alpha_{t2} = 0,67$, $\alpha_{n1} = 0,222$ e $\alpha_{n2} = 0,440$, valores considerados para o gás Argônio (Ar). Observa-se que os gráficos encontrados apresentam uma similaridade entre as curvas que

representam as grandezas obtidas através da solução do problema.

Conclusão

No presente trabalho, os problemas de Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico foram investigados, assumiu-se as condições de contorno de Maxwell e as condições de contorno de Cercignani-Lampis para o modelo **BGK** e modelo **S**. O perfil de velocidade e fluxo de calor, assim como as taxas de fluxo de partícula e fluxo de calor foram calculadas numericamente para o gás Argônio (Ar) no regime de escoamento de transição. Considerou-se esse gás confinado entre duas placas paralelas infinitas com constituições químicas diferentes.

Os resultados numéricos, obtidos pelo método ADO em problemas de dinâmica de gases rarefeitos com condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis) através do modelo **S**, estão em conformidade com os resultados disponíveis na literatura [38, 39, 68]. Através da implementação computacional, observou-se que quando atribuídos valores iguais para os coeficientes de acomodação, considerando a condição de simetria entre as placas, os mesmos valores eram gerados, possibilitando validar os resultados obtidos analiticamente e computacionalmente.

Cabe salientar, com base nos resultados, a dependência em relação ao coeficiente de acomodação do momento tangencial (α_t) e ao coeficiente de acomodação da energia cinética correspondendo a velocidade normal do gás (α_n).

Considera-se que o objetivo deste trabalho foi alcançado, pois:

- desenvolveu-se uma formulação matemática comum para os problemas básicos da dinâmica de gases rarefeitos (Fluxo de Poiseuille e *Creep* Térmico) para o caso de um gás, utilizando-se os modelos **BGK** e **S** com as condições de Cercignani-Lampis e Difuso Especular, através do método ADO;
- foram gerados resultados numéricos, segundo nosso conhecimento, ainda não disponíveis na literatura, baseados no modelo **S**, para o caso de um gás confinado entre placas paralelas com constituições químicas diferentes e condições

de contorno de Cercignani-Lampis;

Os resultados gerados servirão de comparação entre outros modelos e métodos computacionais.

Como continuidade do trabalho realizado até agora, pretende-se desenvolver soluções para o problema de Fluxo de Poiseuille, *Creep* Térmico e Couette utilizando, de maneira unificada, os modelos **BGK**, **S**, Gross-Jackson e **MRS**, através das condições de contorno de Cercignani-Lampis para placas com constituições químicas diferentes.

Referências Bibliográficas

- [1] Arkilic, E.B. Breuer, K.S. and Schmidt, M.A. **Mass flow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels**. Journal of Fluid Mechanics 437(2001), 29-43.
- [2] Barichello, L.B.; Siewert, C.E., **A discrete-ordinates solution for nongrey model with complete frequency redistribution**, JQSRT, vol.62, pp.665-675, 1999.
- [3] Barichello, L. B. and Siewert, C. E.; **The Temperatura-Jump Problem in Rarefied-Gas Dynamics**, European Journal of Applied Mathematics, vol. 11, pp.353, 2000.
- [4] Barichello, L. B., Camargo, M., Rodrigues, P., and Siewert, C. E.; **Unified Solutions to Classical Flow Problems Based on the BGK Model**, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik, vol. 52, pp. 517, 2001.
- [5] Barichello, L.B. and Siewert, C.E., **Some comments on modeling the linearized Boltzmann equation**, J.Quant.Spect.Radiat.Transfer, 77(2003), 43.
- [6] 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.
- [7] Bird, G.A., **Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows**. Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [8] Boltzmann L., **Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter gasmolekülen**, Setzungsberichte Akademie der Wissenschaften 66, 275-370 (1872).

- [9] Burden,R.L.,Faires,J.D.,**Numerical analysis**, Brooks/Cole Publishing Company, Boston, 1997.
- [10] Cabrera, L. C., 2003. **Derivação e Solução de Equações Modelo da Dinâmica de Gases Rarefeitos**, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada - UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.
- [11] Cabrera,L.C., Barichello, L.B. ; **Unified solutions to some classical problems in rarefied gas dynamic based on the one-dimension linearized S-model equations**. Z.Angew. Math. Phys., in press.
- [12] Camargo, M.; **Soluções Unificadas para Modelos com Frequência de Colisão Variável da Dinâmica de Gases Rarefeitos**, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS, Porto Alegre, RS,2003, Brasil.
- [13] Case,K.M., **Elementary solutions of the transport equation and their applications**. Annuals of Physics, vol.9,pp 1-23,1960.
- [14] Cercignani, C.; **Plane Couette Flow According to the Method of Elementary Solutions**, Journal of Mathematical Analysis and Applications, vol. 11, pp. 93, 1965.
- [15] Cercignani, C., **Plane Poiseuille Flow According to the Method of Elementary Solutions**, Journal of Mathematical Analysis and Applications, vol. 12, pp.254, 1965.
- [16] Cerciganani, C., **The method of elementary solutions for kinetic models with velocity-dependent collision frequency**,Annuals of Physics, vol.40,pp.469-481,1966.
- [17] Cercignani, C. and Lampis, M., 1971. **Kinetic Model for Gas-Surface Interaction**, Transport Theory and Statistical Physics, vol. 1, pp. 101.
- [18] Cercignani, C., **Theory and Application of the Boltzmann Equation**. Scottish Academic Press, Edinburgh, 1975.
- [19] Cercignani, C., **The Boltzmann Equation and its Application**. Springer, New York, 1988.

- [20] Cercignani,C., **Mathematical methods in kinetic theory**.Plenum Press, New York,1990.
- [21] Cercignani,C.; **Ludwing Boltzmann, the man who trusted atoms**. University of Milan, Italy,1998.
- [22] Cercignani, C., **Rarefied Gas Dynamics**. From Basic Concepts to Actual Calculations. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [23] Chandrasekhar,S., **Radiative transfer**, Oxford University Press,London, 1950.
- [24] Chapman, S. and Cowing, T.G., **The mathematical theory of non-uniform gases**. University Press, Cambridge, 1952.
- [25] Chen,S.,Chen,H.,Martínez,D.,Matthaeus,W.H., **Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics**, Phys.Rev.Lett.,vol.67,pp3776-3779,1991.
- [26] Davis,P.J.,and Polonsky,I. **Numerical Interpolation, Differentiation and Integration**, Handbook os Mathematical Function,M. Abramowitz and I. A. Stegun, Eds.,National Bureau os Standards, Washington,1964.
- [27] Dongarra,J.J., Bunch,J.R., Moler,C.B.,Stewart,G.W. **LINPACK user's guide**, SIAM, Philadelphia, 1979.
- [28] Fan, J.,Boyd, I.D., Cai, C. P. Hennighausen, K., and Candler,G.V. **Computation of rarefied gas flows around a NACA 0012 airfoil**. AIAA Journal 39 (2001), 618-625.
- [29] Ferziger,J.H. and Kaper, H.G., **Mathematical Theory of Transport Processes in gases North-Holland Publishing Company**, Amsterdam, 1972.
- [30] Garcia, R. D. M., 2002. **Métodos para Solução da Equação de Transporte de Partículas Integro-Diferencial**, Em: Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras. PUC-Porto Alegre- RS.
- [31] Garcia, R.D.M. an Siewert, C.E., **The linearized Boltzmann equation: sound-wave propagation in a rarefied gas**, Z. Angew. Math.Phys., vol.57,pp.94-122,2006.

- [32] Gross,E.P. and Jackson, E.A., **Kinetic models and the linearized Boltzmann equation**. The Phys. of Fluids, vol.2,pp.432-441,(1959).
- [33] Ho,C.M. and Tai, Y.C., **Micro-electro-mechanical systems (MEMS)**, Annu.Rev.Fluid Mech, vol.30,pp.579,1998.
- [34] Jeans, J.H., **The equations of radioactive transfer of energy**, Mon.Not.Royal Astron. Soc.,vol.78,pp.28-36,1971.
- [35] Kennard, E. H.,**Kinetic Theory of Gases**, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1938.
- [36] Knackfuss, R. F. and Barichello, L. B., 2003. **A Discrete-Ordinates Solution to the Poiseuille Flow Problem in the Rarefied Gas Dynamics Based on the BGK Model with Generalized Boundary Conditions**, Proceedings of the XXIV Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CD-Rom. UFOP-Ouro Preto-MG-Brazil.
- [37] Knackfuss,R.F. and Barichello,L.B.; **Surface effects in rarefied gas dynamics: an analysis based on the Cercignani-Lampis boundary condition**,European Journal of Mechanics B.Fluids 25,(2006),pp.113-129.
- [38] Knackfuss,R.F. e Aseka, I.B.; **Fluxo de Poiseuille na Dinâmica de Gases Rarefeitos Baseado no Núcleo BGK**,CMNE/CILAMCE 2007, Porto, 13 a 15 de Junho, 2007, APMTAC, Portugal 2007
- [39] Knackfuss,R.F. e Aseka, I.B.; **Surface Effects in Rarefied Gas Dynamics**,XXIX CILAMCE - Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, Maceió - Al, 2008
- [40] Kogan,M.N., **Rarefied Gas Dynamics**. Plenum, New York, 1969.
- [41] Lord, R. G. **Tangential Momentum Accommodation Coefficients of Rare Gases on Polycrystalline Metal Surfaces**, Program Astronautics and Aeronautics, Part I, J. L. Potter, ed., AIAA, New York, Vol. 51, pp. 531538,(1977).
- [42] Loyalka, S. K. and Ferziger, J. H., 1968. **Model Dependence of the Temperature Slip Coefficient**, Physics of Fluids, vol. 11, pp. 1668.

- [43] Loyalka, S. K., 1971. **Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect I**, J. Chem. Phys., vol. 55, pp. 4497.
- [44] Loyalka,S.K.and Hickey,K.A.,1989. **Plane Poiseuille Flow: Near Continuum Results for a Rigid Sphere Gas**,Physics A,vol.160,pp.395.
- [45] Pekeris,C.L. and Alterman,Z., 1957. **Solutions of the Boltzmann-Hilbert Integral Equation II.The Coefficients of Viscosity and Heat Conduction**. Proceedings of the National Academy os Sciences of the United States of America,vol.43,pp.998.
- [46] Pfahler,J.;Harley,J.C.;Bau,H.; and Zemel,J.N.; **Liquid and gas transport in Small channels**, ASME,DSC,vol.19,pp.149,1990.
- [47] Pfahler,J.;Harley,J.C.;Bau,H.; and Zemel,J.N.; **Gas and liquid flow in small channels**, ASME DSC, vol.32,pp.49,1991.
- [48] Prolo,J.F.F., **A equação de Boltzmann e a Modelagem de Fluidos em Micro e Macroescalas**, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre,RS,Brasil.
- [49] Porodnov,B. T. Suetin,P. E. Borisov, S. F. and Akinshin,V. D., **Experimental Investigation of Rarefied Gas Flow in Different Channels**, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 64, pp. 417437, (1974).
- [50] Rostami,A.A.;Mujumndai,A.S.,and Sanieli,N., **Flow and heat transfer for gas flowing in microchannels: a review**,Heat and Mass Transfer, vol.38,pp.359,2002.
- [51] Sanchez, R. and McCormick, N. J., 1982. **A Review of Neutron Transport Approximations**, Nucl. Sci. Eng., vol. 80, pp. 481.
- [52] Schaaf, S.A. and Chambre,P.L., 1961. **Flow of Rarefied Gases**. Princeton University Press.
- [53] Schuster,A., **Radiation through a foggy atmosphere**,Astrophysics,vol.21,pp.1,1905.

- [54] Scherer, C.S. Prolo Filho, J.F. and Brichello., **An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics.** *Z. Angew. Math. Phys.* 60(2009) 70-115.
- [55] Scherer, C.S., **Modelos cinéticos da equação linearizada de Boltzmann em um problema de transferência de calor em microescala**, Dissertação de mestrado do Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2005.
- [56] Schwarzschild, K., **Über das gleichgewicht der sonnenatmosphäre**, *Göttinger Nachrichten Math.-Phys. Klasse*, vol. 1, pp. 41-53, 1906.
- [57] Shakhov, E. M. **Method of investigation of rarefied gas flows**. Nauka, Moscow, 1974.
- [58] Sharipov, F., 1994a. **Onsanger-Casimir reciprocity relations for open-gaseous systems at arbitrary rarefaction. I. General theory for single gas**, *Physica A*, vol. 203, pp. 437. 209
- [59] Sharipov, F., 1994b. **Onsanger-Casimir reciprocity relations for open-gaseous systems at arbitrary rarefaction. II. Application of the theory for single gas**, *Physica A*, vol. 203, pp. 457.
- [60] Sharipov, F. and Seleznev, V., 1998. **Data on Internal Rarefied Gas Flows**, *Journal Physical and Chemical Reference Data*, vol. 27, pp. 657.
- [61] Sharipov, F., **Rarefied gas flow through a long rectangular channel**, *Journal of Vacuum Science and Technology A*, vol. 17, pp. 3062-3066, 1999.
- [62] Sharipov, F., 2002. **Application of Cercignani-Lampis Scattering Kernel to Calculations of Rarefied Gas Flows. I. Plane Flow Between two Parallel Plates**, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, vol. 21, pp. 113.
- [63] Sharipov, F. **Data on the Velocity Slip and Temperature Jump Coefficients**, in *Proceeding of the 5th Annual International Conference on Thermal and Mechanical Simulation Experiments in Micro-Electronics and Micro-Systems*, Brussels, Belgium, pp. 243249, (2004).

- [64] Siewert, C. E., 2000. **A Concise and Accurate Solution to Chandrasekhars Basic Problem in Radiative Transfer**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, vol. 64, pp. 109.
- [65] Siewert, C. E.; **Kramers Problem for a Variable Collision Frequency Model**, European Journal of Applied Mathematics, vol. 12, pp. 179,2001.
- [66] Siewert,C.E.,Sharipov,F. **Model equations in rarefied gas dynamics: viscous-slip and thermal-slip coefficients**.Physics of Fluids 14(2002),4123-4129.
- [67] Siewert, C. E., **Kramers problem for a variable collision frequency model**.European Journal of Applied Mathematics, vol.12,pp.179-191.
- [68] Siewert, C. E., 2002a. **Generalized Bondary Conditions for the S-Model Kinetic Equations Basic to Flow in a Plane Channel**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, vol. 72, pp. 75.
- [69] Siewert, C. E., 2002. **Poiseuille, Thermal Creep and Couette Flow: Results Based on the CES Model of the Linearized Boltzmann Equation**, European Journal of Mechanics B/Fluids, vol. 21, pp. 579.
- [70] Siewert, C. E., 2002d. **The Temperature-Jump Problem based on the CES Model of the Linearized Boltzmann Equation**, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik. in press.
- [71] Smith,B.T.,Boyle,J.M.,Dongarra,J.J.,Garbow,B.S.,Ikebe,Y.,Klema,V.C., and Moler,C.B., **Matrix Eigensystem Routines EISPACK Guide**.Springer Verlag,Berlin, 1976.
- [72] Takata,S. ,Yasuda, S. , Kosuge,S. , and AOKI,K.; **Numerical analysis of thermal-slip an diffusion-slip flows of a binary mixture of hard-sphere molecular gases**. Phys. Fluids, 15:3745- 3766, 2003.
- [73] Thomas,L. B. **A collection of Some Controlled Surface Thermal Accommodation Coefficient Measurements, in Rarefied Gas Dynamics**, C. L. Brundin, ed., Academic Press, New York, pp. 155162,(1967).

- [74] Vasedevaiah, M. and Balamurugan, K. **Heat transfer of rarefied gases in a corrugated microchannel.** International Journal of Thermal Sciences 40 (2001), 454-468.
- [75] Willet, L., Hashimi,S., Tompson, R. V., and Loyalka,S.K. **Effect of surface heterogeneities on dendensation on an aerosol particle.** Journal of Aerosol Sciences 30 (1999), 669-675.
- [76] Williams, M.M.R. **A review of the rarefied gas dynamics theory associated with some classical problems on flow and heat transfer.** Z. Angew. Math.Phys. 52 (2001), 500-516.
- [77] Williams, M.M.R., **Mathematical methods in particle transport theory,** Butterworth, London, 1971.
- [78] Williams, M.M.R. and Loyalka,S.K. **Aerosol Science: Teory and Practice, with Special Applications to the Nuclear Industry.** Pergamon Press, Oxford, 1992.
- [79] Onishi,Y. **Kinetic theory analysis for temperature and density fields of a slightly rarefied binary gas mixture over a solid wall.** Phys. Fluids, 9(1):226-238, 1997.
- [80] Wick,G.C., **Über ebene diffusions problem,** Zeitschrift fur Physik, vol.120,pp.702-718,1943.
- [81] Yonishi. **On the behaviour of a slightly rarefied gas mixture over plane boundaries.** Z. Angew. Math.Phys. (ZAMP), 37:573:596, 1986.