



Dissertação de Mestrado

# O MODELO DE McCORMACK NO ESCOAMENTO DE GASES RAREFEITOS

Anderson Tres

PPGMat

Santa Maria, RS, Brasil

2011

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA

Programa de Pós-Graduação em Matemática

# O MODELO DE McCORMACK NO ESCOAMENTO DE GASES RAREFEITOS

‡

**Anderson Tres**

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

Santa Maria, RS, Brasil  
2011

---

‡Trabalho financiado pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

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:

**O MODELO DE McCORMACK NO  
ESCOAMENTO DE GASES RAREFEITOS**

elaborada por

**Anderson Tres**

Como requisito parcial para a obtenção do título de

**MESTRE EM MATEMÁTICA**

**COMISSÃO EXAMINADORA:**

---

*Prof. Dr.* Rosenei Felipe Knackfuss - Orientador, UFSM

---

*Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>.* Janice Terezinha Reichert, UFTPR

---

*Prof. Dr.* José Vanderlei Prestes de Oliveira, UFSM

Santa Maria, 24 de fevereiro de 2011.

# Dedicatória

*À minha família, por terem me ensinado a lutar  
e a ter confiança de que os resultados viriam;*

*À minha avó Tres, pela confiança e apoio sempre demonstrado;*

*À memória de meu pai...  
jamais te esquecerei.*

# Agradecimentos

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

Aos meus pais por me concederem o direito à vida e que, com muito esforço garantiram que eu e meus irmãos tivéssemos uma boa formação acadêmica.

Ao PPGMat e aos professores do programa que ministraram as aulas durante o curso, emprestando seus saberes. Agradeço em especial, o meu orientador Rosenei Felipe Knackfuss e a *Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Rosemaira Dalcin Copetti*, suas ações docentes, suas lições de vida e parceria ficarão eternizadas no rol das boas lembranças de minha vida.

Agradeço aos meus colegas de mestrado, aos amigos Físicos (Diogo, Josué e Márcio) e aos colegas de pensão, pela convivência agradável durante a minha estada em Santa Maria. Em especial, ao meu amigo Nicásio, vindo da África se tornaste um irmão para mim.

À CAPES pelo auxílio financeiro concedido nesses dois anos de curso.

À Universidade Federal de Santa Maria e a todas as pessoas que, de alguma forma, contribuíram para o meu sucesso.

# Epígrafe

*“O que vamos fazer essa noite, Cérebro?  
A mesma coisa que fazemos todas as noites, Pinky.  
Tentar dominar o mundo!”*

# Resumo

Neste trabalho, apresenta-se resultados numéricos para grandezas macroscópicas de interesse (perfil de velocidade, perfil do fluxo de calor e tensão de cisalhamento) relativas ao fluxo de uma mistura binária de gases de rarefação arbitrária em microcanais planos, definidos por duas placas paralelas infinitas sem condição de simetria. O fluxo da mistura gasosa ocorre devido a um gradiente constante de pressão (Problema de Poiseuille), um gradiente de temperatura (Problema Creep-Térmico) e um gradiente de densidade (Problema Difuso), na direção paralela a superfície que cerca os gases. A teoria cinética para o fluxo da mistura gasosa é descrita por um modelo linearizado da equação de Boltzmann, o modelo de McCormack. Para melhor descrever o processo de interação entre o gás e a parede utiliza-se o núcleo de Maxwell em termos de 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 correspondendo a velocidade normal, que segundo a literatura é um modelo mais apropriado do que o usual modelo que envolve reflexão especular e difusa. Na busca de soluções do problema proposto, usa-se uma versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO), baseada num esquema de quadratura arbitrário, segundo a qual determina-se um problema de autovalores e respectivas constantes de separação. Os cálculos numéricos são realizados para três misturas de gases nobres: Neônio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio, e implementados computacionalmente através do programa computacional FORTRAN.

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

# Abstract

In this paper, we present numerical results for macroscopic quantities of interest (velocity profile, the heat flow profile and shear stress) for the flow of a binary mixture of rarefied gases in microchannels of arbitrary planes, defined by two infinite parallel plates without symmetry condition. The flow of gas mixture is due to a constant pressure gradient (Poiseuille's Problem), a temperature gradient (Problem Thermal-Creep) and a density gradient (Fuzzy Problem) in the direction parallel to the surface surrounding gases. The kinetic theory for the flow of gas mixture is described by a linearized model of the Boltzmann equation, the McCormack model. To better describe the interaction between gas and wall is used by Maxwell kernel in the terms of a single accommodation coefficient and the Cercignani-Lampis kernel defined in terms of the coefficients of accommodation of tangential momentum accommodation coefficient and the kinetic energy corresponding to normal velocity, which according to literature is a more appropriate model than the usual model that involves specular and diffuse. In seeking solutions to the problem proposed, it uses an analytical version of the discrete ordinates method (ADO), based on an arbitrary quadrature scheme, whereby it is determined a problem of eigenvalues and their constant separation. The numerical calculations are performed for three mixtures of noble gases: Neon-Argon, Helium-Argon and Helium-Xenon, and computationally implemented using the FORTRAN computer program.

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



# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>Alguns conceitos em Dinâmica dos Gases Rarefeitos</b>	<b>18</b>
2.1.	Número de Knudsen . . . . .	18
2.2.	Função de distribuição . . . . .	19
2.3.	A equação de Boltzmann . . . . .	21
2.3.1	Equação de Boltzmann Linearizada . . . . .	23
2.4.	Interação gás-superfície . . . . .	25
2.4.1	Condições de contorno linearizadas . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Exposição do problema e objetivos</b>	<b>29</b>
<b>4</b>	<b>O modelo de McCormack para misturas de gases</b>	<b>32</b>
4.1.	Resolução da equação modelo de McCormack . . . . .	36
4.1.1	Solução particular . . . . .	39
4.1.2	Solução homogênea . . . . .	40
<b>5</b>	<b>Resolução através das condições de contorno</b>	<b>44</b>
5.1.	Condições de contorno difuso-especular . . . . .	44
5.2.	Condições de contorno de Cercignani-Lampis . . . . .	48
<b>6</b>	<b>Grandezas macroscópicas da mistura binária gasosa</b>	<b>54</b>
<b>7</b>	<b>Resultados Numéricos</b>	<b>59</b>
7.1	Fluxo de Poiseuille . . . . .	61
7.2	Creep-Térmico . . . . .	69
7.3	Problema Difuso . . . . .	75
<b>8</b>	<b>Conclusão</b>	<b>83</b>

# Lista de Símbolos

$a_*$	Comprimento característico do escoamento
$\mathbf{c}$	Vetor velocidade adimensional
$C$	Concentração molar
$d_\alpha$	Diâmetro molecular do gás $\alpha$
$f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$	Função de distribuição de partículas
$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$	Maxwelliana local
$h(\mathbf{r}, \mathbf{v})$	Perturbação causada à distribuição Maxwelliana local
$\mathcal{J}_0$	Função de Bessel modificada
$k$	Constante de Boltzmann
$K$	Gradiente de velocidade
$K_i$	Gradiente de temperatura na direção $i$
$K_n$	Número de Knudsen
$K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$	Núcleo de espalhamento
$l_0$	Livre caminho médio
$\mathcal{L}$	Operador de colisão linearizado da equação linearizada de Boltzmann
$m$	Massa molecular
$N$	Ordem de quadratura de Gauss
$n_\alpha$	Densidade do gás $\alpha$
$n_0$	Densidade de equilíbrio
$n(\mathbf{r})$	Densidade de partículas
$p(\tau)$	Perfil tensão de cisalhamento
$P$	Pressão
$Q$	Taxa de fluxo de calor
$Q(f_\alpha, f_\beta)$	Operador de colisão
$q(\tau)$	Perfil de fluxo de calor
$q(\mathbf{r})$	Vetor fluxo de calor
$\mathbf{r}$	Vetor Posição
$R_i$	Gradiente de densidade na direção $i$
$R_{de}(\mathbf{v}':\mathbf{v})$	Núcleo de espalhamento de Maxwell
$R_{cl}(\mathbf{v}':\mathbf{v})$	Núcleo de espalhamento de Cerciganani-Lampis
$S(\mathbf{c})$	Termo fonte
$T$	Temperatura
$T_0$	Temperatura de referência
$U$	Taxa do fluxo de partículas
$u(\tau)$	Perfil de velocidade
$u(\mathbf{r})$	Velocidade hidrodinâmica
$\mathbf{v}$	Vetor velocidade de partículas
$x_P$	Gradiente de pressão
$x_T$	Gradiente de temperatura
$x_C$	Gradiente de densidade
$w_k$	Pesos da quadratura

$\alpha$	Espécie de gás constituinte da mistura
$\mu$	Viscosidade
$\gamma$	Frequência de colisão molecular
$\nu$	Constantes de separação
$\xi_k$	Pontos de quadratura
$\sigma_0$	Diâmetro de colisão das partículas de gás
$\tau$	Variável espacial adimensional
$\zeta_n$	Coefficiente de acomodação normal
$\zeta_n$	Coefficiente de acomodação tangencial
$\Pi(\mathbf{r})$	Tensor tensão

# Lista de Figuras

3.1	Escoamento da mistura gasosa em um canal plano . . . . .	29
7.1	Perfil de velocidade - Mistura Ne-Ar - $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ , $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$ e $C = 0,5$ . . . . .	62
7.2	Perfil do fluxo de calor - Mistura Ne-Ar - $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ , $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$ e $C = 0,5$ . . . . .	64
7.3	Perfil tensão de cisalhamento - Mistura Ne-Ar - $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ , $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$ e $C = 0,5$ . . . . .	65
7.4	Perfil de velocidade - Mistura He-Xe - $\zeta_{11} = 0,2$ , $\zeta_{12} = 0,6$ , $\zeta_{21} = 0,4$ , $\zeta_{22} = 0,8$ e $C = 0,4$ . . . . .	66
7.5	Taxa do fluxo de partículas - Mistura Ne-Ar - $\zeta_{11} = 0,2$ , $\zeta_{12} = 0,6$ , $\zeta_{21} = 0,4$ , $\zeta_{22} = 0,8$ e $C = 0,4$ . . . . .	68
7.6	Taxa do fluxo de calor - Mistura Ne-Ar - $\zeta_{11} = 0,2$ , $\zeta_{12} = 0,6$ , $\zeta_{21} = 0,4$ , $\zeta_{22} = 0,8$ e $C = 0,4$ . . . . .	68
7.7	Perfil de velocidade - Mistura Ne-Ar - Condições de contorno de Maxwell - $\zeta_{11} = 0,2$ , $\zeta_{12} = 0,6$ , $\zeta_{21} = 0,4$ , $\zeta_{22} = 0,8$ . . . . .	70
7.8	Perfil de velocidade - Mistura Ne-Ar - Condições de contorno de Cercignani-Lampis - $\zeta_{11} = 0,2$ , $\zeta_{12} = 0,6$ , $\zeta_{21} = 0,4$ , $\zeta_{22} = 0,8$ . . . . .	70
7.9	Perfil do fluxo de calor - Mistura He-Xe - $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ , $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$ e $C = 0,5$ . . . . .	72
7.10	Perfil tensão de cisalhamento - Mistura He-Ar - $\zeta_{11} = 1,0$ , $\zeta_{12} = 0,8$ , $\zeta_{21} = 0,6$ , $\zeta_{22} = 0,4$ e $C = 0,6$ . . . . .	73
7.11	Taxa do fluxo de partículas - Mistura He-Xe - $\zeta_{11} = 0,2$ , $\zeta_{12} = 0,6$ , $\zeta_{21} = 0,4$ , $\zeta_{22} = 0,8$ e $C = 0,4$ . . . . .	75
7.12	Taxa do fluxo de calor - Mistura He-Xe - $\zeta_{11} = 0,2$ , $\zeta_{12} = 0,6$ , $\zeta_{21} = 0,4$ , $\zeta_{22} = 0,8$ e $C = 0,4$ . . . . .	75
7.13	Perfil de velocidade - Mistura Ne-Ar - $\zeta_{11} = 0,2$ , $\zeta_{12} = 0,6$ , $\zeta_{21} = 0,4$ , $\zeta_{22} = 0,8$ . . . . .	77
7.14	Perfil de velocidade - Mistura He-Ar - $\zeta_{11} = 0,2$ , $\zeta_{12} = 0,6$ , $\zeta_{21} = 0,4$ , $\zeta_{22} = 0,8$ . . . . .	78

- 7.15 Perfil de velocidade - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  
 $\zeta_{22} = 0,8$ . . . . . 78
- 7.16 Perfil fluxo de calor - Mistura Ne-Ar, He-Ar e He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  
 $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,5$ . . . . . 79
- 7.17 Perfil tensão de cisalhamento - Mistura Ne-Ar -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  
 $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ . . . . . 80
- 7.18 Taxa do fluxo de partículas - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} =$   
 $0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ . . . . . 82
- 7.19 Taxa do fluxo de calor - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  
 $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ . . . . . 82

# Lista de Tabelas

7.1	Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = \zeta_{12} = \zeta_{21} = \zeta_{22} = 1, 0$ e $C = 0, 5$ . . . . .	61
7.2	Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1, 0$ , $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0, 5$ e $C = 0, 5$ . . . . .	62
7.3	Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = \zeta_{12} = \zeta_{21} = \zeta_{22} = 1, 0$ e $C = 0, 5$ . . . . .	63
7.4	Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1, 0$ , $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0, 5$ e $C = 0, 5$ . . . . .	63
7.5	Perfil tensão de cisalhamento de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1, 0$ , $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0, 5$ e $C = 0, 5$ . . . . .	64
7.6	Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde $2a = 0, 1$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ e $C = 0, 4$ . . . . .	65
7.7	Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde $2a = 0, 1$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ e $C = 0, 4$ . . . . .	66
7.8	Perfil tensão de cisalhamento de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde $2a = 0, 1$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ e $C = 0, 4$ . . . . .	67
7.9	Taxa do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor para a mistura de gases Ne-Ar, onde $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ e $C = 0, 4$ . . . . .	67
7.10	Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ . . . . .	69
7.11	Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ . . . . .	69
7.12	Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde $2a = 10, 0$ , $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1, 0$ , $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0, 5$ e $C = 0, 5$ . . . . .	71
7.13	Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde $2a = 10, 0$ , $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1, 0$ , $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0, 5$ e $C = 0, 5$ . . . . .	72
7.14	Perfil de tensão de cisalhamento de cada espécie constituinte da mistura He-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = 1, 0$ , $\zeta_{12} = 0, 8$ , $\zeta_{21} = 0, 6$ , $\zeta_{22} = 0, 4$ e $C = 0, 6$ . . . . .	73
7.15	Taxa do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor para a mistura de gases He-Xe, onde $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ e $C = 0, 4$ . . . . .	74

7.16	Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ . . . . .	76
7.17	Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura He-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ . . . . .	76
7.18	Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ . . . . .	77
7.19	Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe. Considera-se $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ e $C = 0, 5$ . . . . .	79
7.20	Perfil tensão de cisalhamento de cada espécie constituinte das misturas Ne-Ar, onde $2a = 1, 0$ , $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ e $C = 0, 4$ . . . . .	80
7.21	Taxa do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor para a mistura de gases He-Xe, onde $\zeta_{11} = 0, 2$ , $\zeta_{12} = 0, 6$ , $\zeta_{21} = 0, 4$ , $\zeta_{22} = 0, 8$ e $C = 0, 4$ . . . . .	81

# Capítulo 1

## Introdução

A equação de transporte de partículas integro-diferencial foi introduzida no final do século XIX por Ludwig Boltzmann, em seus estudos pioneiros da teoria cinética dos gases [10]. Esta equação é modelo fundamental na descrição de fenômenos que envolvem transporte de partículas, destaca-se o cálculo de doses em tratamentos de radioterapia [60, 95], a descrição do fluxo de nêutrons em um reator nuclear [21], o sensoriamento remoto, a secagem de cerâmicas [31] e outros fenômenos associados à radiação térmica [32, 41, 61, 90] e a descrição do comportamento de gases rarefeitos [16, 34, 69, 63].

Estudos sobre a Dinâmica de Gases Rarefeitos (DGR), começaram a ser desenvolvidos no século XIX, mas sua importância foi reconhecida somente em meados de 1957, com o início da corrida espacial. A base da DGR é a teoria cinética dos gases [14, 15, 17, 22, 34, 39, 36], que tem por objetivo descrever as propriedades macroscópicas de um gás através de grandezas microscópicas utilizando a equação de Boltzmann [10], a qual descreve a evolução temporal da função de distribuição das velocidades das partículas gasosas. Conhecendo a função de distribuição das velocidades das partículas gasosas, qualquer grandeza macroscópica do gás (velocidade, temperatura, pressão, tensor tensão, densidade) é determinada utilizando conceitos estatísticos.

O interesse de pesquisadores por temas que envolvem a DGR tem aumentado nos últimos anos, principalmente no fluxo de gases em microcanais, isso se deve ao fato de que muitas inovações tecnológicas, tais como os microsistemas eletrônicos e mecânicos (MEMS)[24, 42], exigem a compreensão de fenômenos físicos que não podem ser expressos através das equações clássicas da Mecânica dos Meios Contínuos, pois os MEMS são dispositivos com escala micrométrica e portanto uma análise a nível microscópico é necessário. Devido a isso, a DGR é a ferramenta viável capaz de descrever com maior precisão os fenômenos físicos que ocorrem em microsistemas gasosos.

Os microsistemas são, atualmente, usados em diversas áreas [1, 3, 40, 43, 51, 91], onde a maioria operam com fluidos. As áreas de aplicação incluem medicina, biotecnologia, aviação, telecomunicação, metrologia, utensílios domésticos, tecnologia de computadores, tecnologia de segurança, robótica, engenharia automotiva e preservação ambiental. Dis-



positivos como *drive heads*, cabeçotes de impressoras, marcapassos do coração, sensores de pressão e químico, sistema de distribuição de remédios, imagem de infravermelho, micro-motores, microcanal de reatores, microbombas e turbinas são alguns dos microdispositivos comercialmente usados ou que serão usados num futuro próximo.

Outro exemplo da importância e aplicabilidade da DGR, é o programa KATRIN (Karlsruhe Tritium Neutrino experiment) que está sendo realizado na Alemanha desde 2003, cujo objetivo é determinar a massa do Neutrino. A parte principal do arranjo experimental é a fonte de gás Trítio, e portanto, a DGR têm sido amplamente utilizada para simular e prever os fenômenos que ocorrem nos gases utilizados no experimento [46, 47].

Em escoamentos de gases rarefeitos costuma-se caracterizar o regime de escoamento pelo chamado número de Knudsen ( $K_n$ ), que é um parâmetro definido pela razão entre o livre caminho médio molecular  $l$  (média da distância percorrida por uma molécula entre as colisões) e o comprimento característico do escoamento  $a_*$  (por exemplo, a largura de um canal)[62].

As principais ferramentas de DGR baseiam-se na solução da equação de Boltzmann [14, 15, 34, 39] ou no método de simulação direta de Monte Carlo [8], os quais abrangem todo o intervalo do número de Knudsen [72, 93].

A equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial-parcial não-linear capaz de descrever, estatisticamente, a evolução temporal do estado de um gás fora do equilíbrio. Porém, resolver a equação de Boltzmann na sua forma original requer muito esforço computacional, mesmo com o grande avanço tecnológico.

Assim, em meados do século XX, Hilbert, Chapman e Enskog [22], desenvolveram métodos de sucessivas aproximações para resolver a equação de Boltzmann. A aproximação de primeira ordem do método de Chapman-Enskog fornecia as equações da hidrodinâmica e estabelecia uma relação entre a Teoria Cinética dos Gases e os coeficientes de transporte (coeficiente de viscosidade, de condutividade térmica e de difusão). Mesmo que os métodos de Hilbert, Chapman e Enskog pudessem fornecer a solução da equação de Boltzmann, para alguns problemas, o número de aproximações necessárias era grande, suficiente para tornar suas aplicações inexecutáveis. Como o grande entrave a resolução da equação de Boltzmann é a presença da integral de colisões, alguns modelos cinéticos foram desenvolvidos com a intenção de simplificar a equação de Boltzmann mantendo suas propriedades fundamentais (conservação de massa, momento e energia e o teorema H de Boltzmann). Devido a sua simplicidade em relação à equação de Boltzmann, os modelos tornaram-se amplamente utilizados.

Com o objetivo de resolver problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos e mais recentemente, devido às aplicações em MEMS, as equações modelos vem sendo muito utilizadas para analisar os diferentes efeitos em escoamento de gases rarefeitos, como os provocados por gradientes de pressão (Poiseuille), densidade (Difuso), temperatura (Creep-Térmico), velocidade (Kramers), ou então os causados por diferenças de tempera-

tura (Transferência de Calor), concentração, ou movimentos nas paredes de canais (Couette). Em alguns dos problemas citados, consegue-se determinar coeficientes de deslizamento e de salto de temperatura usados nas condições de contorno do regime *slip-flow* ( $10^{-2} < K_n < 10^{-1}$ ). Muitos trabalhos foram desenvolvidos ao longo dos anos para o tratamento destes problemas da dinâmica de gases rarefeitos, onde foram utilizados vários métodos numéricos. Pode-se citar alguns dos trabalhos encontrados na literatura onde foram utilizados métodos numéricos tais como esquema de diferenças finitas [2, 82], método de velocidades discretas [67, 71], método das soluções elementares [85], expansões em séries [23], método  $S_N$  [44, 45] e  $F_N$  [86, 89].

Dentre os métodos utilizados para encontrar a solução de problemas baseados em modelos derivados da equação de Boltzmann, destaca-se a versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) [4], que é uma nova versão do método de ordenadas discretas proposto por Wick [92] e Chandrasekhar [18] para soluções de problemas de transferência radiativa. Esta nova formulação do método, difere do original pelo uso de um esquema de quadratura arbitrário, do tipo *half-range*, e pela determinação das constantes de separação através da resolução de um problema simplificado de autovalores, enquanto que o método de ordenadas discretas tem como base a aproximação da integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma fórmula de quadratura numérica, e em resolver, analiticamente, o sistema de equações diferenciais ordinárias resultantes para a função de distribuição de partículas nos pontos de quadratura.

O método ADO tem se mostrado eficiente tanto para problemas de DGR [5, 25, 75, 37, 63, 64] como para problemas relacionados à transferência radiativa [61] e transporte de nêutrons [11]. No caso em que a equação linearizada de Boltzmann, propriamente dita, é utilizada, propõem-se uma expansão da solução em termos de polinômios de Legendre e utiliza-se o método ADO para determinar os coeficientes desta expansão [27, 28, 76, 77, 78].

Muitos trabalhos foram feitos com o método ADO utilizando diferentes modelos cinéticos, e condições de contorno para resolver os problemas de dinâmica de gases rarefeitos. Em alguns problemas considera-se a condição de simetria, ou anti-simetria nas condições de contorno, pode-se citar algumas referências como:

- Siewert [75], onde foram resolvidos os problemas de Poiseuille e do Creep-Térmico definidos em termos do modelo cinético S, com o uso de condições de contorno generalizadas.
- Knackfuss e Barichello [37], onde foram resolvidos os problemas de Poiseuille, Creep-Térmico e Couette, definidos em termos do modelo cinético BGK, com o uso de condições de contorno generalizadas.
- Siewert e Valougeorgis [79], onde foram resolvidos os problemas de Poiseuille, Creep-Térmico e Difuso, definidos em termos do modelo cinético de McCormack, com o uso de condições de contorno difuso-especular.

Devido a eficiência do método ADO, evidenciada na solução dos problemas citados anteriormente, onde foram obtidas soluções precisas, de fácil implementação computacional e de rápida obtenção de resultados numéricos, neste trabalho, dá-se ênfase ao método ADO e o uso de condições de contorno sem considerar simetria ou anti-simetria.

Toda a metodologia utilizada para resolver os problemas propostos juntamente com os resultados e discussões são apresentados nos capítulos posteriores, os quais estão estruturados da seguinte maneira:

Capítulo 2: os conceitos básicos em Dinâmica dos Gases Rarefeitos com a respectiva indicação de referências bibliográficas relevantes para um maior detalhamento de cada tópico apresentado e para um melhor entendimento do presente trabalho são evidenciados.

Capítulo 3: uma análise termodinâmica dos problemas, e os objetivos são apresentados com o intuito de facilitar o entendimento do leitor sobre a relevante importância do presente trabalho.

Capítulo 4: encontra-se a resolução da equação cinética de McCormack para uma mistura binária de gases através da versão analítica do método de ordenadas discretas.

Capítulo 5: faz-se a resolução do problema em torno das condições de contorno generalizadas e difuso-especular, os sistemas de equações são apresentados com o intuito de encontrar as constantes arbitrárias computacionalmente.

Capítulo 6: apresenta-se as grandezas macroscópicas dos gases, bem como sua formulação em ordenadas discretas.

Capítulo 7: os resultados numéricos para as grandezas macroscópicas dos problemas de fluxo de calor (Poiseuille, Creep Térmico e Difuso) são apresentados e comparados com outros resultados disponíveis na literatura.

Capítulo 8: apresenta-se uma conclusão do presente trabalho de dissertação de mestrado e perspectivas de trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Alguns conceitos em Dinâmica dos Gases Rarefeitos

### 2.1 Número de Knudsen

Na Dinâmica de Gases Rarefeitos, o número de Knudsen  $K_n$  é um parâmetro que caracteriza a rarefação de um gás, sendo representado pela razão entre o livre caminho médio molecular  $l_0$ , e um comprimento característico do escoamento  $a_*$ , ou seja,

$$K_n = \frac{l_0}{a_*}. \quad (2.1)$$

Como o livre caminho médio molecular depende do tamanho da dimensão da velocidade das partículas gasosas que são quantidades imensuráveis, utiliza-se os conceitos da teoria cinética dos gases [22] para expressar o livre caminho médio molecular como:

$$l_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\mu}{P} \left( \frac{2kT}{m} \right)^{1/2}, \quad (2.2)$$

onde  $P, T, \mu$  são, respectivamente, a pressão, a temperatura e a viscosidade do gás,  $k$  é a constante de Boltzmann e  $m$  é a massa das partículas gasosas.

Assume-se a massa  $m$  como a massa média da mistura, ou seja,

$$m = \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 + n_2}, \quad (2.3)$$

onde  $m_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2$ ) denota a massa atômica ou molecular da espécie  $\alpha$  e  $n_\alpha$  denota a densidade numérica das partículas tipo  $\alpha$ .

De acordo com o valor que o parâmetro  $K_n$  assume pode-se dividir o regime de escoamento de um gás em três tipos:

Regime de moléculas livres ( $K_n \geq 10$ ): o livre caminho médio molecular é muito maior que o comprimento característico do escoamento, logo ocorre-se menos colisões entre as

partículas gasosas que as colisões das partículas com a superfície sólida que delimita o fluxo gasoso. Portanto, considera-se que as partículas gasosas se movimentam independentes entre si e conseqüentemente despreza-se a interação entre as partículas. Nesse regime a equação de Boltzmann deve ser resolvida.

Regime hidrodinâmico ( $K_n \leq 10^{-2}$ ): o livre caminho médio molecular é muito menor que o comprimento característico do escoamento, logo o meio gasoso pode ser considerado como um meio contínuo. Utiliza-se a equação de Navier-Stokes para encontrar a solução da equação cinética, pois resolver a equação de Boltzmann se torna muito trabalhoso.

Regime de transição ( $10^{-2} < K_n < 10$ ): o livre caminho médio molecular e o tamanho característico do escoamento possuem a mesma ordem de grandeza. Não podemos desprezar a interação entre as partículas gasosas como no regime de moléculas livres e também não podemos considerar o meio como um contínuo como no regime hidrodinâmico. Esse regime apresenta grande dificuldade no estudo dos fenômenos que ocorrem em fluxos gasosos pois deve-se resolver a equação de Boltzmann.

Alguns autores, como por exemplo Bird na Ref.[8], 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  $10^{-2} \leq K_n \leq 10^{-1}$ .

## 2.2 Função de distribuição

Sabe-se que o estado de um sistema de partículas é determinado em qualquer instante de tempo  $t$  conhecendo-se a posição  $\mathbf{r}$  e a velocidade  $\mathbf{v}$  de cada partícula neste instante. Através de equações de movimento obtem-se a evolução temporal através do estado inicial. Porém, o número de partículas que compõem um gás é muito grande, logo considera-se que o estado do sistema de partículas é descrito em termos de uma função de distribuição  $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$  que contém informação sobre a distribuição espacial e de velocidades das partículas gasosas num determinado instante de tempo.

As expressões para todas as macrocaracterísticas de um gás podem ser encontradas nas [22, 72]. Para o caso de uma mistura de  $N$  gases monoatômicos, as propriedades macroscópicas da mistura segundo [93] são expressas da seguinte forma:

- Densidade numérica (número de partículas gasosas por unidade de volume que, num instante de tempo  $t$ , estão localizadas em  $\mathbf{r}'$ )

$$n(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N n_{\alpha}(t, \mathbf{r}') \quad (2.4)$$

onde

$$n_\alpha(t, \mathbf{r}') = \int f_\alpha(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha. \quad (2.5)$$

- Velocidade hidrodinâmica:

$$\mathbf{u}'(t, \mathbf{r}') = \frac{1}{\varrho} \sum_{\alpha=1}^N \varrho_\alpha \mathbf{u}'_\alpha(t, \mathbf{r}') \quad (2.6)$$

onde

$$\varrho = \sum_{\alpha=1}^N \varrho_\alpha \quad , \quad \varrho_\alpha = n_\alpha m_\alpha, \quad (2.7)$$

é a densidade de massa da mistura ( $\varrho_\alpha$  denota a densidade de massa do constituinte  $\alpha$  da mistura) e

$$\mathbf{u}'_\alpha(t, \mathbf{r}') = \frac{1}{n_\alpha} \int \mathbf{v}_\alpha f_\alpha(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha, \quad (2.8)$$

é a velocidade hidrodinâmica do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura.

- Tensor tensão

$$\Pi_{ij}(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N \Pi_{\alpha ij}(t, \mathbf{r}'), \quad (2.9)$$

onde

$$\Pi_{\alpha ij}(t, \mathbf{r}') = m_\alpha \int V_{\alpha i} V_{\alpha j} f_\alpha(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha, \quad (2.10)$$

é o tensor tensão do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura e

$$\mathbf{V}_\alpha = \mathbf{v}_\alpha - \mathbf{u}', \quad (2.11)$$

é a velocidade peculiar do constituinte  $\alpha$ , sendo que  $V_{\alpha i}$  e  $V_{\alpha j}$  denotam, respectivamente, as componentes da velocidade peculiar do constituinte  $\alpha$  nas direções  $i$  e  $j$ .

- Vetor fluxo de calor

$$\mathbf{q}'(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{q}'_\alpha(t, \mathbf{r}'), \quad (2.12)$$

onde

$$\mathbf{q}'_\alpha(t, \mathbf{r}') = \frac{m_\alpha}{2} \int V_\alpha^2 \mathbf{V}_\alpha f_\alpha(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha, \quad (2.13)$$

é o vetor fluxo de calor do  $\alpha$ -ésimo consituinte da mistura.

- Pressão

$$P(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N P_\alpha(t, \mathbf{r}'), \quad (2.14)$$

onde

$$P_\alpha(t, \mathbf{r}') = \frac{m_\alpha}{3} \int V_\alpha^2 f_\alpha(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha, \quad (2.15)$$

denota a pressão de cada constituinte da mistura.

- Temperatura

$$T(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N T_{\alpha}(t, \mathbf{r}'), \quad (2.16)$$

onde

$$T_{\alpha}(t, \mathbf{r}') = \frac{m_{\alpha}}{3nk} \int V_{\alpha}^2 f_{\alpha}(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_{\alpha}) \mathbf{d}\mathbf{v}_{\alpha}, \quad (2.17)$$

denota a temperatura dos constituintes da mistura.

## 2.3 A equação de Boltzmann

A função de distribuição  $f(t, \mathbf{r}', \mathbf{v})$  de um gás satisfaz a equação de Boltzmann [14, 15, 16, 17, 22, 36]. Ludwig Boltzmann [10], em 1872, derivou uma equação para a evolução temporal de  $f$ , a partir da qual a função de distribuição pode ser determinada. A equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial-parcial não-linear, que é a base da teoria cinética dos gases.

Para uma mistura de  $N$  gases cada função de distribuição  $f_{\alpha}(t, \mathbf{r}', \mathbf{v})$  ( $\alpha = 1, \dots, N$ ) das velocidades moleculares de cada espécie satisfaz a equação de Boltzmann, que na ausência de forças externas, pode ser escrita como:

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \mathbf{r}} = \sum_{\beta=1}^N Q(f_{\alpha}, f_{\beta}) \quad , \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (2.18)$$

onde

$$Q(f_{\alpha}, f_{\beta}) = \int \int \int w(\mathbf{v}_{\alpha}, \mathbf{v}_{\beta}; \mathbf{v}'_{\alpha}, \mathbf{v}'_{\beta}) (f'_{\alpha} f'_{\beta} - f_{\alpha} f_{\beta}) \mathbf{d}\mathbf{v}'_{\alpha} \mathbf{d}\mathbf{v}'_{\beta} \mathbf{d}\mathbf{v}_{\beta}, \quad (2.19)$$

é a integral de colisões moleculares, que é uma função das frequências de colisões entre os constituintes e uma função de referência. A integral de colisão expressa a taxa de variação temporal da função de distribuição devido as colisões moleculares.

Aqui,  $(\mathbf{v}'_{\alpha}, \mathbf{v}'_{\beta})$  denota as velocidades pré-colisionais de duas partículas, ambas iguais ( $\alpha = \beta$ ) ou diferentes ( $\alpha \neq \beta$ ). A quantidade  $w(\mathbf{v}_{\alpha}, \mathbf{v}_{\beta}; \mathbf{v}'_{\alpha}, \mathbf{v}'_{\beta})$  é a densidade de probabilidade de duas partículas com velocidades pré-colisionais  $\mathbf{v}'_{\alpha}$  e  $\mathbf{v}'_{\beta}$  terem velocidades pós-colisionais  $\mathbf{v}_{\alpha}$  e  $\mathbf{v}_{\beta}$  após uma colisão binária entre duas partículas.

Segundo [93] a densidade de probabilidade depende do potencial de interação intermolecular e deve satisfazer duas condições:

- Condição de normalização:

$$\int \int w(\mathbf{v}_{\alpha}, \mathbf{v}_{\beta}; \mathbf{v}'_{\alpha}, \mathbf{v}'_{\beta}) \mathbf{d}\mathbf{v}_{\alpha} \mathbf{d}\mathbf{v}_{\beta} = 1. \quad (2.20)$$

- Condição de reversibilidade no processo de colisão:

$$w(\mathbf{v}_\alpha, \mathbf{v}_\beta; \mathbf{v}'_\alpha, \mathbf{v}'_\beta) = w(-\mathbf{v}'_\alpha, -\mathbf{v}'_\beta; -\mathbf{v}_\alpha, -\mathbf{v}_\beta). \quad (2.21)$$

A integral das colisões moleculares  $Q(f_\alpha, f_\beta)$ , também satisfaz duas condições:

- Condição associada as leis de conservação de massa, momento e energia nas colisões entre as partículas

$$\sum_{\beta=1}^N \int \psi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) Q(f_\alpha, f_\beta) \mathbf{d}\mathbf{v}_\alpha = 0, \quad (2.22)$$

onde  $\psi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha)$  é um invariante de colisão que pode assumir alguns valores:

$$\psi_\alpha = m_\alpha \quad , \quad \psi_\alpha = m_\alpha \mathbf{v}_\alpha \quad , \quad \psi_\alpha = \frac{1}{2} m_\alpha \mathbf{v}_\alpha^2. \quad (2.23)$$

- Condição para validação da segunda lei da termodinâmica, o Teorema H de Boltzmann

$$\sum_{\alpha, \beta} \int \ln f_\alpha Q(f_\alpha, f_\beta) \mathbf{d}\mathbf{v}_\alpha \leq 0. \quad (2.24)$$

Como mencionado anteriormente, a equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial não linear, o que dificulta sua resolução até mesmo hoje com o grande avanço computacional. A dificuldade está na presença da integral de colisões moleculares  $Q(f_\alpha, f_\beta)$ , pois é ali que se encontra a não-linearidade da equação. Com o intuito de facilitar sua resolução, surgiu a idéia de simplificar o termo integral por uma expressão que conserve suas propriedades originais (teorema H de Boltzmann e conservação de massa, momento e energia) forneça corretamente todos os coeficientes de transporte como viscosidade, condutividade térmica. Dessa forma, uma equação modelo que teve seu núcleo de colisão substituído por um núcleo aproximado, é chamada de modelo cinético ou equação modelo [15].

Foram desenvolvidos vários modelos cinéticos para descrever o processo de colisão entre as partículas de um gás. Entre eles, no caso de uma espécie de gás, destacam-se os modelos com frequência de colisão constante (que independe da velocidade das partículas do gás) como, o modelo BGK [7], modelo Gross-Jackson [29], modelo S de Shakhov [65] e modelo MRS [26], e os modelos com frequência de colisão variável (que depende da velocidade das partículas do gás) como, modelo CLF [12, 45], modelo CES e CEBS [6]. Para misturas gasosas, entre os modelos propostos [30, 50, 48, 80], o modelo de McCormack [49] é considerado como uma alternativa válida para a equação de Boltzmann linear para mistura de gases, pois o mesmo fornece com maior precisão todos os coeficientes de transporte.

Alguns trabalhos presentes na literatura, como por exemplo [52, 53, 83, 84], a equação de Boltzmann é resolvida com a integral de colisões original utilizando o modelo de esferas-



rígidas como modelo de interação intermolecular, porém em algumas situações, os resultados obtidos não têm sentido físico. A utilização de modelos cinéticos tem sido uma boa alternativa, pois além de exigir pouco esforço computacional, fornecem resultados muito próximos dos obtidos experimentalmente e via solução exata da equação de Boltzmann.

### 2.3.1 Equação de Boltzmann Linearizada

Neste trabalho, utiliza-se a equação linearizada de Boltzmann unidimensional e no estado estacionário.

Para o caso de um único gás, de acordo com Williams [94], para situações em que o estado do gás é fracamente removido do seu estado de equilíbrio  $f_0$ , escreve-se a função de distribuição relativa a pequenas perturbações ( $|h| \ll 1$ ) como:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})[1 + h(\mathbf{r}, \mathbf{v})], \quad (2.25)$$

onde  $h$  é a perturbação causada a Maxwelliana local  $f_0(r, v)$ . Segundo Williams [94], a Maxwelliana local  $f_0(r, v)$  é escrita como

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = n_\infty(x, z) \left[ \frac{m}{2\pi k T_\infty(x, z)} \right]^{3/2} \exp \left[ -\frac{m}{2k T_\infty(x, z)} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right], \quad (2.26)$$

onde  $x, z$  são coordenadas espaciais,  $m$  é a massa molecular,  $k$  é a constante de Boltzmann,  $n_\infty$  refere-se a densidade e  $T_\infty$  a temperatura.

Aqui,  $n_\infty, T_\infty$  e  $\mathbf{u}$  são funções lineares de  $x$  e  $z$  como segue

$$n_\infty(x, z) = n_0(1 + R_x x + R_z z), \quad (2.27)$$

$$T_\infty(x, z) = T_0(1 + K_x x + K_z z) \quad (2.28)$$

e

$$u(x) = Kx, \quad (2.29)$$

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

Segundo Williams [94] substitui-se a Eq.(2.25) na Eq.(2.18), negligencia-se os termos da ordem de  $O(h^2)$ , considera-se as propriedades de simetria da função frequência de colisões entre átomos, utiliza-se a condição de equilíbrio local  $f'_{01} f'_{02} = f_{01} f_{02}$  que decorre da conservação de energia e momento, e por fim, faz-se uma adimensionalização da forma

$$c = v \left[ \frac{m}{2kT_0} \right]^{1/2} \quad (2.30)$$

e

$$K_0 = K \left[ \frac{m}{2kT_0} \right]^{1/2}, \quad (2.31)$$

onde  $v$  é a magnitude da velocidade da partícula. Logo obtém-se a equação de balanço

$$S(\mathbf{c}) + c_x \frac{\partial}{\partial x^*} h(x^*, \mathbf{c}) = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} \mathfrak{L}\{h\}(x^*, \mathbf{c}). \quad (2.32)$$

Aqui,  $\sigma_0$  é o diâmetro de colisão das partículas gasosas,  $S(\mathbf{c})$  é um termo de fonte e  $\mathfrak{L}$  corresponde ao operador de colisões, o qual é escrito por

$$\mathfrak{L}\{h\}(x^*, \mathbf{c}) = -\vartheta(c)h(x^*, \mathbf{c}) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} \mathbf{K}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) h(x^*, \mathbf{c}') dc_z dc_y dc_x, \quad (2.33)$$

onde  $x^*$  é a variável espacial,  $\mathbf{K}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  é o núcleo de espalhamento e  $\vartheta(c)$  é a frequência de colisões das partículas gasosas, dada pela expressão

$$\vartheta(c) = \frac{2c^2 + 1}{c} \int_0^c e^{-y^2} dy + e^{-c^2}. \quad (2.34)$$

No caso de uma mistura de gases, de acordo com as Ref.[66, 72, 73, 74] as forças termodinâmicas como gradientes longitudinais de pressão, temperatura e concentração que proporcionam o fluxo da mistura gasosa através de um longo capilar são muito pequenas. Logo seguindo a Ref.[14] pode-se linearizar a equação de Boltzmann para fluxos unidimensionais de um modo fixo no qual a função de distribuição relativa a pequenas perturbações ( $|h| \ll 1$ ) causada à distribuição Maxwelliana local  $f_\alpha^0(v)$  é representada do seguinte modo:

$$f_\alpha(x, z, v) = f_{\alpha,0}(v)[1 + h_\alpha(x, z, v)], \quad (2.35)$$

onde

$$f_{\alpha,0}(v) = n_\alpha \left[ \frac{m_\alpha}{2\pi kT_0} \right]^{3/2} \exp \left[ -\frac{m_\alpha v^2}{2kT_0} \right]. \quad (2.36)$$

Aqui,  $k$  é a constante de Boltzmann,  $m_\alpha$  e  $n_\alpha$  são, respectivamente, a massa molecular e a densidade de equilíbrio para as  $\alpha$  espécies de gases,  $x$  é a variável espacial na transversal, ou em vários canais,  $z$  é a variável espacial na direção longitudinal,  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$  com magnitude  $v$ , é a velocidade da partícula e  $T_0$  é a temperatura de referência.

A função perturbação  $h_\alpha$ , segundo McCormack [49], obedece duas equações de Boltzmann acopladas, e escreve-se como

$$c_x \frac{\partial}{\partial x^*} h_\alpha(x^*, \mathbf{c}) + \omega_\alpha \gamma_\alpha h_\alpha(x^*, \mathbf{c}) = \omega_\alpha \gamma_\alpha \mathfrak{L}_\alpha\{h_1, h_2\}(x^*, \mathbf{c}). \quad (2.37)$$

A frequência de colisão  $\gamma_\alpha$  e o operador de colisão  $\mathfrak{L}$  serão definidos no Cap.4.

## 2.4 Interação gás-superfície

A fim de descrever, matematicamente, a interação do gás com a superfície sólida que o delimita precisa-se estabelecer uma relação entre a função de distribuição de velocidades  $f(\mathbf{r}', \mathbf{v})$  das partículas que deixam a parede após a interação ( $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0$ ) e da função de distribuição de velocidades  $f(\mathbf{r}', \mathbf{v}')$  das partículas incidentes ( $\mathbf{v}' \cdot \mathbf{n} < 0$ ). Segundo Cercignani [15] para uma mistura de  $N$  gases essa relação é escrita do seguinte modo:

$$|v_{\alpha n}| f_{\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{v}) = \int_{v'_{\alpha n} < 0} |v'_{\alpha n}| R(\mathbf{v}'_{\alpha} : \mathbf{v}_{\alpha}) f_{\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{v}') d\mathbf{v}'_{\alpha}, \quad v_{\alpha n} \geq 0, \quad (2.38)$$

onde  $\alpha = 1, \dots, N$ ,  $v_{\alpha n} = \mathbf{v}_{\alpha} \cdot \mathbf{n}$  é a componente normal da velocidade do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura,  $R(\mathbf{v}'_{\alpha} : \mathbf{v}_{\alpha})$  é o núcleo de espalhamento, o qual fornece a densidade de probabilidade de que a velocidade de uma molécula seja alterada de  $\mathbf{v}'$ , imediatamente antes da colisão com a parede, para  $\mathbf{v}$ , imediatamente após a colisão, ou seja, o núcleo de espalhamento expressa o tipo de interação que ocorre entre o gás e a superfície que o delimita.

Pode-se dizer que o núcleo de espalhamento depende, principalmente, da espécie gasosa em estudo, da composição química e temperatura da superfície sólida, da estrutura mecânica da superfície. Segundo [15] o núcleo de espalhamento satisfaz as seguintes propriedades:

- Condição de normalização

$$\int_{v_{\alpha n} > 0} R(\mathbf{v}'_{\alpha} : \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha} = 1; \quad (2.39)$$

- Não-negatividade

$$R(\mathbf{v}'_{\alpha} : \mathbf{v}_{\alpha}) \geq 0; \quad (2.40)$$

- Relação de reciprocidade

$$|v'_{\alpha n}| \exp\left(-\frac{m_{\alpha} v_{\alpha}'^2}{2kT_w}\right) R(\mathbf{v}'_{\alpha} : \mathbf{v}_{\alpha}) = |v_{\alpha n}| \exp\left(-\frac{m_{\alpha} v_{\alpha}^2}{2kT_w}\right) R(-\mathbf{v}_{\alpha} : -\mathbf{v}'_{\alpha}), \quad (2.41)$$

onde  $T_w$  é a temperatura da parede.

Tem-se alguns tipos de interação gás-superfície onde o que os diferencia é o núcleo de espalhamento. O mais utilizado em cálculos práticos é a reflexão difusa, pois este núcleo não depende da velocidade das moléculas antes da colisão com a parede e estabelece que não existe direção preferencial para a velocidade das partículas espalhadas. Logo, o núcleo de espalhamento do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura é escrito do seguinte modo

$$R_d(\mathbf{v}'_{\alpha} : \mathbf{v}_{\alpha}) = \frac{m_{\alpha}^2 v_{\alpha n}}{2\pi(kT_w)^2} \exp\left(-\frac{m_{\alpha} v_{\alpha}^2}{2kT_w}\right). \quad (2.42)$$

Porém, apesar de ser muito utilizado, existem casos em que o uso da reflexão difusa falha na concordância de resultados obtidos experimentalmente. Para eliminar essa discordância, é mais conveniente utilizar o núcleo de espalhamento difuso-especular proposto por Maxwell [72], cuja expressão do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura é dado por:

$$R_{de}(\mathbf{v}'_\alpha : \mathbf{v}_\alpha) = \zeta_\alpha R_d + (1 - \zeta_\alpha) \delta(\mathbf{v}'_\alpha - \mathbf{v}_\alpha + 2\mathbf{n}v_{\alpha n}). \quad (2.43)$$

Aqui,  $\delta$  é a função de Dirac,  $\zeta_\alpha$  conhecido como coeficiente de acomodação, representa a fração das partículas gasosas refletida difusamente e  $(1 - \zeta_\alpha)$  corresponde à fração de partículas refletidas especularmente, ambas do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura gasosa. Para uma mistura de  $N$  gases rarefeitos, cada espécie gasosa possui um coeficiente de acomodação definido como:

$$\zeta_\alpha(\varphi) = \frac{\Theta^-(\varphi) - \Theta^+(\varphi)}{\Theta^-(\varphi) - \Theta_{dif}^+(\varphi)}, \quad (2.44)$$

onde

$$\Theta^-(\varphi) = \int_{v'_{\alpha n} < 0} |v'_{\alpha n}| \varphi(\mathbf{v}'_\alpha) f_\alpha(\mathbf{v}'_\alpha) d\mathbf{v}'_\alpha \quad \text{e} \quad \Theta^+(\varphi) = \int_{v_{\alpha n} > 0} |v_{\alpha n}| \varphi(\mathbf{v}_\alpha) f_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha. \quad (2.45)$$

Tem-se que  $\Theta^\pm(\varphi)$  representa o fluxo da quantidade  $\varphi$  para as partículas gasosas refletidas (+) e incidentes (-) na superfície sólida,  $\Theta_{dif}^+(\varphi)$  representa o fluxo da quantidade  $\varphi$  para as partículas gasosas refletidas difusamente,  $\varphi(v_\alpha)$  é uma função arbitrária da velocidade da partícula.

O coeficiente de acomodação  $\zeta_\alpha(\varphi)$  tem os seguintes significados físicos:

- Coeficiente de acomodação de momento tangencial: se  $\varphi = m_\alpha v_{\alpha t}$ , onde  $v_{\alpha t}$  denota a componente tangencial da velocidade  $v_\alpha$ ;
- Coeficiente de acomodação de momento normal: se  $\varphi = m_\alpha v_{\alpha n}$ , onde  $v_{\alpha n}$  denota a componente normal da velocidade  $v_\alpha$ ;
- Coeficiente de acomodação de energia:  $\varphi = m_\alpha v_\alpha^2 / 2$ .

Como mencionado anteriormente, na reflexão difusa a velocidade das partículas espalhadas não assumem direção preferencial, isso ocorre devido ao valor que o coeficiente de acomodação  $\zeta_\alpha(\varphi)$  assume para qualquer função  $\varphi(v_\alpha)$ , ou seja, se substituir as Eqs.(2.38) e (2.42) na Eq.(2.44) obtém-se que  $\zeta_\alpha(\varphi) = 1$ .

Assim como na reflexão difusa, também existem situações nas quais o uso do núcleo de Maxwell falha, algumas delas podem ser encontradas nas Refs.[58, 59]. Isso ocorre devido ao fato de que nesse núcleo os coeficientes de acomodação associados a cada função  $\varphi(v_\alpha)$  são todos iguais ao número de partículas refletidas difusamente, porém na prática as funções  $\varphi(v_\alpha)$  ( $\alpha = 1, \dots, N$ ) estão associadas a coeficientes de acomodação diferentes entre si, portanto o uso desse núcleo não descreve corretamente a interação gás-superfície.

O núcleo proposto por Cercignani e Lampis [13], fornece resultados mais coerentes com os experimentais, já que esse núcleo apresenta dois coeficientes de acomodação: um coeficiente de acomodação para a energia cinética  $\zeta_{\alpha n}$  associada à velocidade normal  $v_{\alpha n}$ , e um coeficiente de acomodação de momento tangencial  $\zeta_{\alpha t}$  associada a componente tangencial  $v_{\alpha t}$  da velocidade  $\mathbf{v}_\alpha$ . O núcleo de Cercignani-Lampis do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura é escrito como segue

$$R_{cl}(\mathbf{v}'_\alpha : \mathbf{v}_\alpha) = \frac{m_\alpha^2 v_{\alpha n}}{2\pi \zeta_{\alpha n} \zeta_{\alpha t} (2 - \zeta_{\alpha t}) (kT_w)^2} \exp \left\{ -\frac{m_\alpha [v_{\alpha n}^2 + (1 - \zeta_{\alpha n}) v_{\alpha n}'^2]}{2kT_w \zeta_{\alpha n}} \right\} \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{\zeta_{\alpha t} (2 - \zeta_{\alpha t})} \frac{m_\alpha [v_{\alpha t} - (1 - \zeta_{\alpha t}) v_{\alpha t}']^2}{2kT_w} \right\} \mathcal{J}_0 \left( \frac{\sqrt{1 - \zeta_{\alpha n}} m_\alpha v_{\alpha n} v_{\alpha n}'}{\zeta_{\alpha n} kT_w} \right), \quad (2.46)$$

onde  $\mathcal{J}_0$  é a função de Bessel de primeira espécie e ordem zero definida como

$$\mathcal{J}_0(\iota) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{\iota \cos \phi} d\phi. \quad (2.47)$$

O coeficiente de acomodação de momento tangencial  $\zeta_{\alpha t}$  pode variar no intervalo  $[0, 2]$ , enquanto que o coeficiente de acomodação de energia cinética  $\zeta_{\alpha n}$ , pode variar no intervalo  $[0, 1]$ . Sharipov [67] complementa que quando  $\zeta_{\alpha t} = 0$  e  $\zeta_{\alpha n} = 0$  a reflexão é especular, quando  $\zeta_{\alpha t} = 1$  e  $\zeta_{\alpha n} = 1$  a reflexão é difusa, e por fim, se  $\zeta_{\alpha t} = 2$  e  $\zeta_{\alpha n} = 0$  a reflexão é para trás, ou seja, a velocidade troca de sinal após a colisão com a parede, conseqüentemente, troca-se a sua direção.

Na literatura encontra-se poucos trabalhos desenvolvidos com a utilização do núcleo proposto por Cercignani e Lampis, mesmo fornecendo resultados mais coerentes com os experimentais. Isso ocorre devido à sua complexidade matemática. Neste trabalho, assume-se como interação gás-superfície as condições de contorno difuso especular (Maxwell) e as condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis).

### 2.4.1 Condições de contorno linearizadas

Assim como a equação de Boltzmann, as interações gás-superfície também são linearizadas e adimensionalizadas para o vetor velocidade  $\mathbf{c}$  segundo a Eq.(2.30). Para a condição de contorno difuso-especular proposta por Maxwell, escreve-se então, o modelo difuso-especular para problemas de fluxo de gases em um canal definido por  $x \in [-a, a]$  em coordenadas cartesianas como

$$h_\alpha(-a, c_x, c_y, c_z) = (1 - \zeta_\alpha) h_\alpha(-a, -c_x, c_y, c_z) \\ + \frac{2\zeta_\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(-a, -c'_x, c'_y, c'_z) dc'_x dc'_y dc'_z \quad (2.48)$$

e

$$h_\alpha(a, -c_x, c_y, c_z) = (1 - \zeta_\alpha)h_\alpha(a, c_x, c_y, c_z) + \frac{2\zeta_\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(a, c'_x, c'_y, c'_z) dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (2.49)$$

onde  $\zeta_\alpha$  é o coeficiente de acomodação e a expressão

$$\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(\mp a, \mp c'_x, c'_y, c'_z) dc'_x dc'_y dc'_z \quad (2.50)$$

denota o termo de difusidade.

Para a interação gás-superfície cujo núcleo de espalhamento é proposto por Cercignani-Lampis Eq.(2.46), em termos da velocidade adimensional  $\mathbf{c}$  escreve-se em coordenadas retangulares como

$$h_\alpha(-a, c_x, c_y, c_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} h_\alpha(-a, -c'_x, c'_y, c'_z) R_{cl}(-c'_x, c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) dc'_x dc'_y dc'_z \quad (2.51)$$

e

$$h_\alpha(a, -c_x, c_y, c_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} h_\alpha(a, c'_x, c'_y, c'_z) R_{cl}(c'_x, c'_y, c'_z : -c_x, c_y, c_z) dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (2.52)$$

onde

$$R_{cl}(c'_x, c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) = \frac{2c'_x}{\pi\zeta_{\alpha n}\zeta_{\alpha t}(2 - \zeta_{\alpha t})} T(c'_y : c_y) S(c'_x : c_x) T(c'_z : c_z) \quad (2.53)$$

com

$$T(y : z) = \exp \left[ -\frac{[(1 - \zeta_{\alpha t})z - y]^2}{\zeta_{\alpha t}(2 - \zeta_{\alpha t})} \right] \quad (2.54)$$

e

$$S(y : z) = \exp \left[ -\frac{[(1 - \zeta_{\alpha n})^{1/2}z - y]^2}{\zeta_{\alpha n}} \right] \mathcal{J}_0 \left[ \frac{2(1 - \zeta_{\alpha n})^{1/2}|zy|}{\zeta_{\alpha n}} \right]. \quad (2.55)$$

# Capítulo 3

## Exposição do problema e objetivos

Considera-se dois reservatórios contendo a mesma mistura binária de gases rarefeitos e conectados através de duas placas paralelas de comprimento  $l$  e largura  $x \in [-a, a]$ , tal que  $l \gg a$  como na figura abaixo

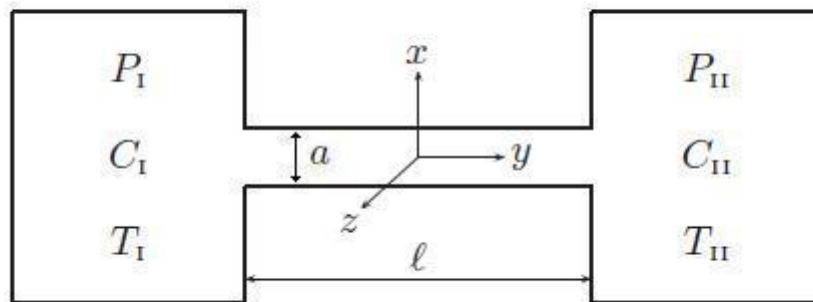


Figura 3.1: Escoamento da mistura gasosa em um canal plano

Aqui,  $P_i, T_i$  e  $C_i$  representam respectivamente, a pressão, temperatura e concentração molar da mistura confinada no reservatório  $i$ , com  $i = 1, 2$ . O fluxo da mistura gasosa ocorre devido aos gradientes de pressão, temperatura e concentração, onde  $P_1 > P_2, T_1 < T_2$  e  $C_1 > C_2$ . Considera-se que a mistura desloca-se paralelamente na direção  $y$ .

Ao longo do canal entre as placas, existem fenômenos de transferência de massa, calor e difusão. Pode-se caracterizá-los como:

- Fenômenos de transferência de massa: ocorre devido ao gradiente de pressão (fluxo de Poiseuille), gradiente de temperatura (Creep-Térmico) e gradiente de concentração;
- Fenômenos de transferência de calor: ocorre devido ao gradiente de pressão (efeito mecanocalórico), gradiente de temperatura e gradiente de concentração (efeito Dufour);
- Fenômenos de difusão: ocorre devido ao gradiente de pressão (barodifusão), gradiente de temperatura (termo-difusão ou efeito Soret) e gradiente de concentração.

Segundo dados encontrados na Ref. [33], os fluxos de massa  $J_M$ , calor  $J_H$  e difusão  $J_D$  em um tubo circular são definidos como

$$J_M = 2\pi \int_0^R \varrho u'_x r' dr', \quad (3.1)$$

$$J_H = 2\pi \int_0^R q'_x r' dr' \quad (3.2)$$

e

$$J_D = 2\pi \int_0^R \frac{\varrho_1 \varrho_2}{\varrho} (u'_{1x} - u'_{2x}) r' dr'. \quad (3.3)$$

Aqui  $\varrho$  é a densidade de massa da mistura,  $\varrho_1, \varrho_2$  são as densidades de massa de cada espécie que compõe a mistura, suas definições são dadas na Eq.(2.7). As componentes longitudinais da velocidade hidrodinâmica  $u'_x$  e do vetor fluxo de calor  $q'_x$  são definidos nas Eqs.(2.6) e (2.12). A quantidade

$$r' = \sqrt{y'^2 + z'^2} \quad (3.4)$$

é a coordenada radial. Em alguns problemas é mais conveniente trabalhar com coordenadas cilíndricas  $(x', r', \varphi)$  no lugar das coordenadas cartesianas  $(x', y', z')$ .

No presente trabalho, dá-se ênfase aos problemas clássicos em dinâmica de gases rarefeitos como o problema fluxo de Poiseuille, problema Creep-Térmico e problema Difuso, que são definidos como

- Problema de Poiseuille: considera-se a mistura binária de gases confinada entre duas placas paralelas infinitas separadas por uma distância  $2a(x = \pm a)$ , sujeito a um gradiente (constante) de pressão. A mistura gasosa desloca-se paralelamente as placas, na direção  $y$ , da região de maior pressão para a região de menor pressão. Considera-se, ainda, neste problema, que a temperatura da parede é constante.

- Problema Creep-Térmico: O fenômeno de Creep-Térmico ocorre nas proximidades da parede e, de acordo com Kennard [34], o mecanismo físico para esse fluxo de massa é o seguinte: ao incidir com a parede, a velocidade média das partículas vindas das regiões mais quentes é maior que a velocidade média das partículas vindas das regiões menos quentes. Conseqüentemente, ao incidir com a parede há transferência de momento do gás para a parede e a componente tangencial desse momento possui direção oposta ao gradiente de temperatura. Como reação a parede exerce uma força sob o gás na direção do gradiente de temperatura e, conseqüentemente, o gás se movimenta da região de menor temperatura para a região de maior temperatura.

- Problema Difuso: considera-se a mistura binária de gases confinada entre duas placas paralelas infinitas separadas por uma distância  $2a(x = \pm a)$ , sujeito a um gradiente de densidade. A mistura gasosa desloca-se, paralelamente as placas, na direção  $y$ , da região de menor concentração para a região de maior concentração.



Assim, o presente trabalho tem por objetivo determinar, numericamente, as grandezas macroscópicas (perfil de velocidade, perfil do fluxo de calor, perfil tensão de cisalhamento, taxa do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor) para os fluxos de massa de uma mistura binária de gases rarefeitos através de um canal plano sujeitas a gradientes de pressão (Poiseuille), gradientes de temperatura (Creep-Térmico) e gradientes de densidade (Difuso), em coordenadas cartesianas. Considera-se o intervalo do número de Knudsen no regime de transição. A determinação das grandezas macroscópicas é realizada através da solução numérica do modelo para mistura de gases proposto por McCormack [49] para a equação de Boltzmann (equação cinética de McCormack).

A equação cinética é resolvida, analiticamente, através da versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) [4] assumindo-se o núcleo difuso especular de Maxwell [72] e o núcleo de Cercignani-Lampis [13] como interação entre as partículas gasosas e a superfície sólida. Nos problemas trabalhados não considera-se condição de simetria das placas onde a mistura gasosa está confinada.

A princípio, devido a falta de resultados presentes na literatura segundo o nosso conhecimento, a confiabilidade dos resultados obtidos neste trabalho é verificada através de comparações tabeladas com os resultados obtidos por Siewert e Valougeorgis [79] e por Garcia e Siewert [27].

# Capítulo 4

## O modelo de McCormack para misturas de gases

Como já mencionado, devido a dificuldade de resolver a equação de Boltzmann original, lineariza-se a equação e simplifica-se em equações modelos. Quando se refere a informação sobre mistura de gases, o modelo proposto por McCormack [49] é o mais apropriado para descrever o fenômeno, pois este, mantém as propriedades da integral de colisões original e fornece corretamente todos os coeficientes de transporte (viscosidade, condutividade térmica, difusão e termo-difusão) da mistura.

Os demais modelos propostos na literatura possuem algum tipo de restrição que impede o fornecimento correto de todos os coeficientes de transporte.

Segundo McCormack [49] o modelo que descreve o fluxo de uma mistura binária de gases é dada pela expressão

$$S_\alpha(\mathbf{c}) + c_x \frac{\partial}{\partial x^*} h_\alpha(x^*, \mathbf{c}) + \omega_\alpha \gamma_\alpha h_\alpha(x^*, \mathbf{c}) = \omega_\alpha \gamma_\alpha \mathfrak{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(x^*, \mathbf{c}), \quad (4.1)$$

onde  $\alpha = 1, 2$  corresponde a cada gás, o vetor  $\mathbf{c}$ , com componentes  $c_x, c_y, c_z$  e magnitude  $c$ , é uma velocidade adimensional. Introduce-se esta velocidade adimensional  $c$  diferentemente nas duas equações, segundo Siewert e Valougeorgis [79], para o caso  $\alpha = 1$  usa-se a transformação  $\mathbf{c} = \omega_1 \mathbf{v}$ , e para o caso  $\alpha = 2$  usa-se a transformação  $\mathbf{c} = \omega_2 \mathbf{v}$ . Ainda,

$$\omega_\alpha = \left[ \frac{m_\alpha}{2kT_0} \right]^{1/2}. \quad (4.2)$$

O termo  $S_\alpha(\mathbf{c})$ , o qual é chamado de termo não homogêneo da equação, é dado pelas expressões

$$S_1(\mathbf{c}) = c_z [(c^2 - 5/2)X_T + X_P + (n_2/n)X_C] \quad (4.3)$$

e

$$S_2(\mathbf{c}) = c_z [(c^2 - 5/2)X_T + X_P - (n_1/n)X_C], \quad (4.4)$$

onde as constantes  $X_T$ ,  $X_P$  e  $X_C$  definem, respectivamente, o gradiente de temperatura, de pressão e de densidade que impulsionam o fluxo do gás no canal.

Vale notar que o termo  $S(\mathbf{c})$  define cada problema em estudo, ou seja, se considerarmos  $X_T = 0$ ,  $X_P = 0$  e  $X_C = 1$  tem-se o problema de fluxo de massa causado pelo gradiente de densidade (Problema Difuso), se  $X_P = 0$ ,  $X_C = 0$  e  $X_T = 1$  tem-se o problema de fluxo de massa causado pelo gradiente de temperatura (Problema Creep-Térmico), e se  $X_C = 0$ ,  $X_T = 0$  e  $X_P = 1$  tem-se o problema de fluxo de massa causado pelo gradiente de pressão (Problema de Poiseuille).

A frequência de colisão  $\gamma_\alpha$  será definida posteriormente.

O operador de colisão  $\mathfrak{L}$  é escrito como

$$\mathfrak{L}_\alpha\{h_1, h_2\}(x^*, \mathbf{c}) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_{\beta=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\beta(x^*, \mathbf{c}') \mathbf{K}_{\alpha,\beta}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) d\mathbf{c}'_x d\mathbf{c}'_y d\mathbf{c}'_z, \quad (4.5)$$

onde os núcleos de espalhamento  $\mathbf{K}_{\alpha,\beta}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$  segundo McCormack [49] são dados pela expressão

$$\mathbf{K}_{\alpha,\beta}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \mathbf{K}_{\alpha,\beta}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \mathbf{K}_{\alpha,\beta}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \mathbf{K}_{\alpha,\beta}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \mathbf{K}_{\alpha,\beta}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) \quad , \quad \alpha = 1, 2 \quad (4.6)$$

onde

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{1,2}^{(1)}] - \eta_{1,2}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.7)$$

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (4.8)$$

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_1[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (4.9)$$

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\beta_1(c'^2 - 5/2) - \eta_{1,2}^{(2)}(c^2 - 5/2)] \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.10)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = r\{2\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(2)}[r^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.11)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)r^* \eta_{1,2}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (4.12)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{1,2}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (4.13)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)] \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.14)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{2,1}^{(1)}] - \eta_{2,1}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.15)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2s^* \eta_{2,1}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (4.16)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_2[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (4.17)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\beta_2(c'^2 - 5/2) - \eta_{2,1}^{(2)}(c^2 - 5/2)] \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.18)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = s\{2\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(2)}[s^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (4.19)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)s^* \eta_{2,1}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (4.20)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{2,1}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2] \quad (4.21)$$

e

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}]. \quad (4.22)$$

Aqui, usa-se

$$r = (m_1/m_2)^{1/2}, \quad s = (m_2/m_1)^{1/2}, \quad r^* = \frac{r^2}{1+r^2} \quad \text{e} \quad s^* = \frac{s^2}{1+s^2}, \quad (4.23)$$

além disso,

$$\varpi_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(4)} - \eta_{1,1}^{(3)} - \eta_{1,2}^{(3)}, \quad (4.24)$$

$$\varpi_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(4)} - \eta_{2,2}^{(3)} - \eta_{2,1}^{(3)}, \quad (4.25)$$

$$\beta_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(6)} - \eta_{1,1}^{(5)} - \eta_{1,2}^{(5)}, \quad (4.26)$$

e

$$\beta_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(6)} - \eta_{2,2}^{(5)} - \eta_{2,1}^{(5)} \quad (4.27)$$

onde

$$\eta_{i,j}^{(k)} = \nu_{i,j}^{(k)} / \gamma_i. \quad (4.28)$$

De acordo com McCormack [49], escreve-se

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} n_\beta \Omega_{\alpha,\beta}^{11}, \quad (4.29)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 n_\beta (\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{11}), \quad (4.30)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha,\beta}^{22} \right), \quad (4.31)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \Omega_{\alpha,\beta}^{22} \right), \quad (4.32)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} \quad (4.33)$$

e

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \left( \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{3/2} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)}, \quad (4.34)$$

com

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} = \Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \left( \frac{15m_\alpha}{4m_\beta} + \frac{25m_\beta}{8m_\alpha} \right) \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \left( \frac{m_\beta}{2m_\alpha} \right) (5\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \Omega_{\alpha,\beta}^{13}), \quad (4.35)$$

e após uma correção por Pan e Storvick [55]

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)} = -\Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{12} + \frac{1}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{13}. \quad (4.36)$$

Aqui,

$$m_{\alpha,\beta} = m_{\alpha}m_{\beta}/(m_{\alpha} + m_{\beta}) \quad (4.37)$$

e as funções  $\Omega$  são integrais de Chapman-Cowling [17, 22], as mesmas são integrais que dependem do potencial de interação intermolecular. Para o caso do modelo de esferas rígidas tem-se

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{ij} = \frac{(j+1)!}{8} \left[ 1 - \frac{1 + (-1)^i}{2(i+1)} \right] \left( \frac{\pi kT}{2m_{\alpha,\beta}} \right) (d_{\alpha} + d_{\beta})^2, \quad (4.38)$$

onde  $d_{\alpha}$  é o diâmetro molecular da espécie  $\alpha$ .

Seguindo Siewert e Valougeorgis [79], introduz-se na Eq.(4.1) a variável espacial adimensional

$$\tau = \frac{x}{l_0}, \quad (4.39)$$

onde

$$l_0 = \frac{\mu v_0}{P_0} \quad (4.40)$$

representa o livre caminho médio (baseado na viscosidade) da mistura introduzido por Sharipov e Kalempa [70]. Seguindo Sharipov [70], escreve-se a velocidade molecular característica da mistura como

$$v_0 = (2kT_0/m)^{1/2}, \quad (4.41)$$

onde

$$m = \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 + n_2} \quad (4.42)$$

representa a massa molecular média da mistura.

As expressões que definem a viscosidade da mistura em termos das pressões parciais  $P_{\alpha}$  são dadas por

$$\mu = \frac{P_1}{\gamma_1} + \frac{P_2}{\gamma_2}, \quad (4.43)$$

onde

$$\frac{P_{\alpha}}{P_0} = \frac{n_{\alpha}}{n_1 + n_2}, \quad (4.44)$$

e a frequência de colisão  $\gamma_{\alpha}$ , com  $\alpha = 1, 2$  dadas por

$$\gamma_1 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}}{\Psi_2 + \nu_{1,2}^{(4)}} \quad \text{e} \quad \gamma_2 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}}{\Psi_1 + \nu_{2,1}^{(4)}}. \quad (4.45)$$

Aqui,

$$\Psi_{\alpha} = \nu_{\alpha,\alpha}^{(3)} - \nu_{\alpha,\alpha}^{(4)} + \nu_{\alpha,\beta}^{(3)}, \quad \alpha = 1, 2, \quad \beta = 1, 2 \quad \text{e} \quad \beta \neq \alpha. \quad (4.46)$$

Por fim, por questão de notação introduz-se

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \omega_\alpha l_0 \quad (4.47)$$

ou, mais explicitamente,

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \frac{n_1/\gamma_1 + n_2/\gamma_2}{n_1 + n_2} (m_\alpha/m)^{1/2} \quad (4.48)$$

e reescreve-se a Eq.(4.1) em termos da variável  $\tau$  como

$$S_\alpha(\mathbf{c}) + c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) + \sigma_\alpha h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) = \sigma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(\tau, \mathbf{c}), \quad (4.49)$$

onde

$$S_1(\mathbf{c}) = c_z [(c^2 - 5/2)x_T + x_P + (n_2/n)x_C] \quad (4.50)$$

e

$$S_2(\mathbf{c}) = c_z [(c^2 - 5/2)x_T + x_P - (n_1/n)x_C], \quad (4.51)$$

com

$$x_A = l_0 X_a \quad , \quad A = P, T, C. \quad (4.52)$$

## 4.1. Resolução da equação modelo de McCormack

Para avaliar-se as grandezas macrosópicas desejadas, precisa-se trabalhar com certos momentos (integrals). Primeiramente multiplica-se a Eq.(4.49) por

$$\phi_1(c_y, c_z) = \frac{1}{\pi} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} c_z \quad (4.53)$$

e integra-se sobre todo  $c_y$  e  $c_z$ .

A seguir, repete-se o procedimento multiplicando-se agora por

$$\phi_2(c_y, c_z) = \frac{1}{\pi} (c_y^2 + c_z^2 - 2) c_z e^{-(c_y^2 + c_z^2)}, \quad (4.54)$$

e integra-se sobre todo  $c_y$  e  $c_z$ . Considera-se a nova variável  $\xi = c_x$ .

Obtem-se assim, quatro equações balanço

$$\begin{aligned} (1/2)[x_P + (n_2/n)x_C + (\xi^2 - 1/2)x_T] + \xi \frac{\partial}{\partial \tau} g_1(\tau, \xi) + \sigma_1 g_1(\tau, \xi) = \\ \pi^{-1/2} \sigma_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{1,1}(\xi', \xi) g_1(\tau, \xi') + k_{1,2}(\xi', \xi) g_2(\tau, \xi') + \\ k_{1,3}(\xi', \xi) g_3(\tau, \xi') + k_{1,4}(\xi', \xi) g_4(\tau, \xi')] d\xi' \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$x_T + \xi \frac{\partial}{\partial \tau} g_2(\tau, \xi) + \sigma_1 g_2(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \sigma_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{2,1}(\xi', \xi) g_1(\tau, \xi') + k_{2,2}(\xi', \xi) g_2(\tau, \xi') + k_{2,3}(\xi', \xi) g_3(\tau, \xi') + k_{2,4}(\xi', \xi) g_4(\tau, \xi')] d\xi', \quad (4.56)$$

$$(1/2)[x_P - (n_1/n)x_C + (\xi^2 - 1/2)x_T] + \xi \frac{\partial}{\partial \tau} g_3(\tau, \xi) + \sigma_2 g_3(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \sigma_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{3,1}(\xi', \xi) g_1(\tau, \xi') + k_{3,2}(\xi', \xi) g_2(\tau, \xi') + k_{3,3}(\xi', \xi) g_3(\tau, \xi') + k_{3,4}(\xi', \xi) g_4(\tau, \xi')] d\xi' \quad (4.57)$$

e

$$x_T + \xi \frac{\partial}{\partial \tau} g_4(\tau, \xi) + \sigma_2 g_4(\tau, \xi) = \pi^{-1/2} \sigma_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} [k_{4,1}(\xi', \xi) g_1(\tau, \xi') + k_{4,2}(\xi', \xi) g_2(\tau, \xi') + k_{4,3}(\xi', \xi) g_3(\tau, \xi') + k_{4,4}(\xi', \xi) g_4(\tau, \xi')] d\xi', \quad (4.58)$$

onde

$$g_1(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_1(\tau, c) dc_y dc_z, \quad (4.59)$$

$$g_2(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_1(\tau, c) dc_x dc_z, \quad (4.60)$$

$$g_3(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_2(\tau, c) dc_y dc_z, \quad (4.61)$$

$$g_4(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_2(\tau, c) dc_x dc_z, \quad (4.62)$$

$$k_{1,1}(\xi', \xi) = 2\varpi_1 \xi' \xi + 1 - \eta_{1,2}^{(1)} - \eta_{1,2}^{(2)} (\xi'^2 + \xi^2 - 1)/2 + 2\beta_1 (\xi'^2 - 1/2) (\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.63)$$

$$k_{1,2}(\xi', \xi) = -(1/2) \eta_{1,2}^{(2)} + 2\beta_1 (\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.64)$$

$$k_{1,3}(\xi', \xi) = 2\eta_{1,2}^{(4)} \xi' \xi + r \{ \eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(2)} [r^2 (\xi'^2 - 1/2) + \xi^2 - 1/2] / 2 \} + 2\eta_{1,2}^{(6)} (\xi'^2 - 1/2) (\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.65)$$

$$k_{1,4}(\xi', \xi) = (1/2) r^3 \eta_{1,2}^{(2)} + 2\eta_{1,2}^{(6)} (\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.66)$$

$$k_{2,1}(\xi', \xi) = -\eta_{1,2}^{(2)} + 4\beta_1 (\xi'^2 - 1/2)/5, \quad (4.67)$$

$$k_{2,2}(\xi', \xi) = (4/5) \beta_1, \quad (4.68)$$

$$k_{2,3}(\xi', \xi) = r \eta_{1,2}^{(2)} + 4\eta_{1,2}^{(6)} (\xi'^2 - 1/2)/5, \quad (4.69)$$

$$k_{2,4}(\xi', \xi) = (4/5) \eta_{1,2}^{(6)}, \quad (4.70)$$

$$k_{3,1}(\xi', \xi) = 2\eta_{1,2}^{(4)} \xi' \xi + s \{ \eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(2)} [s^2 (\xi'^2 - 1/2) + \xi^2 - 1/2] / 2 \} + 2\eta_{2,1}^{(6)} (\xi'^2 - 1/2) (\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.71)$$

$$k_{3,2}(\xi', \xi) = (1/2) s^3 \eta_{2,1}^{(2)} + 2\eta_{2,1}^{(6)} (\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.72)$$

$$k_{3,3}(\xi', \xi) = 2\varpi_2 \xi' \xi + 1 - \eta_{2,1}^{(1)} - \eta_{2,1}^{(2)}(\xi'^2 + \xi^2 - 1)/2 + 2\beta_2(\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.73)$$

$$k_{3,4}(\xi', \xi) = -(1/2)\eta_{2,1}^{(2)} + 2\beta_2(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (4.74)$$

$$k_{4,1}(\xi', \xi) = s\eta_{2,1}^{(2)} + 4\eta_{2,1}^{(6)}(\xi'^2 - 1/2)/5, \quad (4.75)$$

$$k_{4,2}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}, \quad (4.76)$$

$$k_{4,3}(\xi', \xi) = \eta_{2,1}^{(2)} + 4\beta_2(\xi'^2 - 1/2)/5 \quad (4.77)$$

e

$$k_{4,4}(\xi', \xi) = (4/5)\beta_2. \quad (4.78)$$

Escrevendo-se as Eqs.(4.55)-(4.58) na forma vetorial  $\mathbf{G}(\tau, \xi)$ , tem-se

$$\mathbf{S}(\xi) + \xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathbf{\Sigma} \mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{\Sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}_s(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (4.79)$$

onde

$$\mathbf{\Sigma} = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_2\} \quad , \quad \psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2} \quad (4.80)$$

e

$$\mathbf{S}(\xi) = \begin{bmatrix} (1/2)[x_P + (n_2/n)x_C + x_T(\xi^2 - 1/2)] & & & \\ & x_T & & \\ (1/2)[x_P - (n_1/n)x_C + x_T(\xi^2 - 1/2)] & & & \\ & & & x_T \end{bmatrix}. \quad (4.81)$$

As componentes de  $\mathbf{G}(\tau, \xi)$  dadas pelas Eqs.(4.59)-(4.62) podem ser reescritas como

$$g_{2\alpha-1}(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_\alpha(\tau, c) dc_y dc_z \quad (4.82)$$

e

$$g_{2\alpha}(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_\alpha(\tau, c) dc_x dc_z, \quad (4.83)$$

com  $\alpha = 1, 2$ . Ainda, as componentes  $k_{i,j}(\xi', \xi)$  do núcleo  $\mathbf{K}_s(\xi', \xi)$  são definidas pelas Eqs.(4.63)-(4.78).

Partindo-se agora para o cálculo da solução da Eq.(4.79), tem-se que a mesma é uma equação não-homogênea e portanto, para encontrar sua solução precisa-se resolver o problema homogêneo e encontrar uma solução particular para o problema não-homogêneo. Ou seja, a solução geral da equação é dada pela expressão

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{G}_p(\tau, \xi) + \mathbf{G}_h(\tau, \xi), \quad (4.84)$$

onde  $\mathbf{G}_p(\tau, \xi)$  representa a solução do problema particular e  $\mathbf{G}_h(\tau, \xi)$  a solução do proble-



ma homogêneo.

### 4.1.1 Solução particular

Aqui, considera-se os três problemas (Poiseuille, Creep Térmico e Difuso) acoplados no termo fonte  $\mathbf{S}(\xi)$  dado pela Eq.(4.81). Busca-se uma solução que satisfaça a equação (4.79), válida para todo  $\tau \in [-a, a]$ . Propõem-se a solução particular para a Eq.(4.79) segundo Siewert e Valougeorgis [79] como

$$\mathbf{G}_p(\tau, \xi) = \mathbf{G}_p^{(1)}(\tau, \xi) + \mathbf{G}_p^{(2)}(\tau, \xi), \quad (4.85)$$

onde

$$\mathbf{G}_p^{(1)}(\tau, \xi) = A\tau^2 + B\tau\xi + C\xi^2 + D, \quad (4.86)$$

é a solução particular proposta para o problema de Poiseuille e difuso, enquanto que

$$\mathbf{G}_p^{(2)}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} E(\xi^2 - 1/2 - sw) \\ 2E \\ F(\xi^2 - 1/2 - rw) \\ 2F \end{bmatrix} \quad (4.87)$$

é a solução particular referente ao problema creep térmico.

Segundo Siewert e Valougeorgis [79], expressa-se as constantes necessárias na Eq.(4.86) como

$$A = \begin{bmatrix} a_1\sigma_1^2 \\ 0 \\ \lambda a_1\sigma_2^2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -2a_1\sigma_1 \\ 0 \\ -2\lambda a_1\sigma_2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad C = \begin{bmatrix} c_1 \\ 0 \\ c_2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad D = \begin{bmatrix} d_1 \\ 2c_1 - 4a_1 \\ 0 \\ 2c_3 - 4\lambda a_1 \end{bmatrix} \quad (4.88)$$

onde as constantes restantes estão definidas pelo sistema linear

$$M \begin{bmatrix} a_1 \\ c_1 \\ c_3 \\ d_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x_P + (n_2/n)x_C)/\sigma_1 \\ (x_P - (n_1/n)x_C)/\sigma_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.89)$$

Aqui,

$M =$

$$\begin{bmatrix} 2 + 4\eta_{1,2}^{(2)}(1 - r^3\lambda & -\eta_{1,2}^{(1)} - (5/2)\eta_{1,2}^{(2)} & r\eta_{1,2}^{(1)} + (5/2)r^3\eta_{1,2}^{(2)} & -2\eta_{1,2}^{(1)} \\ 2\lambda + 4\eta_{2,1}^{(2)}(\lambda - s^3) & s\eta_{2,1}^{(1)} + (5/2)s^3\eta_{2,1}^{(2)} & -\eta_{2,1}^{(1)} - (5/2)\eta_{2,1}^{(2)} & 2s\eta_{2,1}^{(1)} \\ -4 + (16/5)(\beta_1 + \lambda\eta_{1,2}^{(6)}) & 2(1 - \beta_1) + (1/2)\eta_{1,2}^{(2)} & -2\eta_{1,2}^{(6)} - (r/2)\eta_{1,2}^{(2)} & \eta_{1,2}^{(2)} \\ (16/5)\eta_{2,1}^{(6)} + [(16/5)\beta_2 - 4]\lambda & -2\eta_{2,1}^{(6)} - (s/2)\eta_{2,1}^{(2)} & 2(1 - \beta_2) + (1/2)\eta_{2,1}^{(2)} & -s\eta_{2,1}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad (4.90)$$

sendo

$$\lambda = s(\sigma_1/\sigma_2)^2 \quad \text{e} \quad w = (5/4)r \frac{\nu_{1,2}^{(2)}}{\nu_{1,2}^{(1)}}. \quad (4.91)$$

As constantes  $E$  e  $F$  dadas na Eq.(4.87) são soluções do sistema linear

$$\begin{bmatrix} -\rho_1 + (5/8)[\eta_{1,2}^{(2)}]^2/\eta_{1,2}^{(1)} & \eta_{1,2}^{(6)} - (5/8)r^3[\eta_{1,2}^{(2)}]^2/\eta_{1,2}^{(1)} \\ \eta_{2,1}^{(6)} - (5/8)s^3[\eta_{2,1}^{(2)}]^2/\eta_{2,1}^{(1)} & -\rho_2 + (5/8)[\eta_{2,1}^{(2)}]^2/\eta_{2,1}^{(1)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = \frac{x_T}{2} \begin{bmatrix} 1/\sigma_1 \\ 1/\sigma_2 \end{bmatrix}, \quad (4.92)$$

onde

$$\rho_1 = \eta_{1,1}^{(5)} + \eta_{1,2}^{(5)} - \eta_{1,1}^{(6)} \quad \text{e} \quad \rho_2 = \eta_{2,2}^{(5)} + \eta_{2,1}^{(5)} - \eta_{2,2}^{(6)}. \quad (4.93)$$

### 4.1.2 Solução homogênea

Para encontrar a solução do problema não-homogêneo da Eq.(4.79), utiliza-se a versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) proposto por Barrichello e Siewert [4] para a solução de problemas baseados em modelos cinéticos derivados da equação de Boltzmann linearizada em geometria plana.

Propõem-se então como solução para o problema não-homogêneo a solução na forma exponencial

$$\mathbf{G}_h(\tau, \xi) = \mathbf{\Phi}(\nu, \xi)e^{-\tau/\nu}, \quad (4.94)$$

onde a constante de separação  $\nu$  e as funções  $\mathbf{\Phi}(\nu, \xi)$  que são as componentes independentes da variável espacial das soluções elementares serão determinadas. Substitui-se a Eq.(4.94) na Eq.(4.79) e separa-se o intervalo de integração de  $(-\infty, \infty)$  para  $[0, \infty)$ , obtendo-se

$$(\nu\Sigma - \xi I)\mathbf{\Phi}(\nu, \xi) = \nu\Sigma \int_0^\infty \psi(\xi')[\mathbf{K}(\xi', \xi)\mathbf{\Phi}(\nu, \xi) + \mathbf{K}(-\xi', \xi)\mathbf{\Phi}(\nu, -\xi)]d\xi' \quad (4.95)$$

e

$$(\nu\Sigma + \xi I)\mathbf{\Phi}(\nu, -\xi) = \nu\Sigma \int_0^\infty \psi(\xi')[\mathbf{K}(\xi', -\xi)\mathbf{\Phi}(\nu, \xi) + \mathbf{K}(-\xi', -\xi)\mathbf{\Phi}(\nu, -\xi)]d\xi'. \quad (4.96)$$

Nota-se que, como

$$K(\xi', -\xi) = K(-\xi', \xi) \quad (4.97)$$

tem-se

$$\Phi(\nu, \xi) = \Phi(-\nu, -\xi). \quad (4.98)$$

A seguir, soma-se e subtrai-se as Eqs.(4.95) e (4.96), então obtém-se

$$V(\nu, \xi) = \frac{\nu}{\xi} \Sigma \left[ U(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi') U(\nu, \xi') K_+(\xi', \xi) d\xi' \right] \quad (4.99)$$

e

$$U(\nu, \xi) = \frac{\nu}{\xi} \Sigma \left[ V(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi') V(\nu, \xi') K_-(\xi', \xi) d\xi' \right], \quad (4.100)$$

onde

$$U(\nu, \xi) = \Phi(\nu, \xi) + \Phi(\nu, -\xi) \quad , \quad \mathbf{V}(\nu, \xi) = \Phi(\nu, \xi) - \Phi(\nu, -\xi) \quad (4.101)$$

e

$$K_+(\xi', \xi) = K(\xi', \xi) + K(-\xi', \xi) \quad , \quad K_-(\xi', \xi) = K(\xi', \xi) - K(-\xi', \xi). \quad (4.102)$$

Substituindo a Eq.(4.100) na Eq.(4.99) obtém-se

$$\frac{1}{\xi^2} \left[ \Sigma^2 V(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi') \mathfrak{K}(\xi', \xi) V(\nu, \xi') d\xi' \right] = \lambda V(\nu, \xi), \quad (4.103)$$

onde

$$\lambda = \frac{1}{\nu^2} \quad (4.104)$$

e

$$\mathfrak{K}(\xi', \xi) = \frac{\xi}{\xi'} \Sigma^2 K_+(\xi', \xi) + \Sigma^2 K_-(\xi', \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi'') \frac{\xi}{\xi''} \Sigma^2 K_+(\xi'', \xi) K_-(\xi', \xi'') d\xi''. \quad (4.105)$$

Aproxima-se o termo integral das Eqs.(4.100) e (4.103) pela fórmula de quadratura de Gauss-Legendre que, segundo Davis e Polonski [19], no caso de  $x \in [-1, 1]$  segue a fórmula básica

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{k=1}^N w_k f(\xi_k), \quad (4.106)$$

onde, na prescrição de Gauss, os nós  $\{x_k\}$  são os zeros do polinômio de Legendre  $P_N(x)$  e  $\{w_k\}$  os pesos associados.

Observa-se que o intervalo de integração nas Eqs.(4.100) e (4.103) são de  $[0, \infty)$ , logo utiliza-se a transformação  $u(\xi) = e^{-\xi}$  para mapear  $\xi \in [0, \infty)$  sobre  $u \in [0, 1]$ , e assim, aplica-se a fórmula de Gauss-Legendre mapeado (linearmente) no intervalo  $[0, 1]$ . De-

notando por  $\{\xi_k\}$  e  $\{w_k\}$ , respectivamente, os conjuntos dos  $N$  pontos de quadraturas e  $N$  pesos obtidos para o intervalo  $[0, \infty)$ , escreve-se as Eqs.(4.100) e (4.103) como um problema de autovalores e autovetores

$$\frac{1}{\xi_i^2} \left[ \Sigma^2 V(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k) \mathfrak{K}(\xi_k, \xi_i) V(\nu_j, \xi_k) \right] = \lambda_j V(\nu_j, \xi_i) \quad (4.107)$$

e

$$U(\nu_j, \xi_i) = \frac{\nu_j}{\xi_i} \Sigma \left[ V(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k) K_-(\xi_k, \xi_i) V(\nu_j, \xi_k) \right], \quad (4.108)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$  e  $j = 1, 2, \dots, 4N$ .

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

$$\Phi(\nu_j, \xi_j) = \frac{1}{2} [U(\nu_j, \xi_i) + V(\nu_j, \xi_i)] \quad \text{e} \quad \Phi(\nu_j, -\xi_j) = \frac{1}{2} [U(\nu_j, \xi_i) - V(\nu_j, \xi_i)]. \quad (4.109)$$

Assim, escreve-se a solução geral em ordenadas discretas para a Eq.(4.79) como

$$\mathbf{G}_h(\tau, \pm \xi_i) = \sum_{j=1}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm \xi_i) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp \xi_i) e^{-(a-\tau)/\nu_j}], \quad (4.110)$$

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

No problema de autovalores dado pela Eq.(4.107), tem-se que um dos autovalores  $\lambda$  tende para zero quando  $N$  tender ao infinito, conseqüentemente uma constante de separação ( $\nu$ ) tende ao infinito. Levando em conta este fato, negligencia-se o maior dos  $\nu_j$  computados obtendo-se a solução

$$\mathbf{G}_h(\tau, \pm \xi_i) = A_1 \mathbf{G}_+ + B_1 \mathbf{G}_-(\tau, \pm \xi_i) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm \xi_i) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp \xi_i) e^{-(a-\tau)/\nu_j}], \quad (4.111)$$

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

$$\mathbf{G}_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ s \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{G}_-(\tau, \pm \xi) = \begin{bmatrix} \sigma_1 \tau \mp \xi \\ 0 \\ \sigma_1 s (\tau \mp \xi / \sigma_2) \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.112)$$

Com a solução do problema não-homogêneo (particular) e a solução do problema homogêneo (via método ADO) encontra-se a solução geral dada pela Eq.(4.84) para o modelo de McCormack para o fluxo de uma mistura binária de gases em um canal plano

como

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{G}_{\mathbf{p}}^{(1)}(\tau, \xi) + \mathbf{G}_{\mathbf{p}}^{(2)}(\tau, \xi) + A_1 \mathbf{G}_+ + B_1 \mathbf{G}_-(\tau, \pm \xi_i) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm \xi_i) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp \xi_i) e^{-(a-\tau)/\nu_j}]. \quad (4.113)$$

# Capítulo 5

## Resolução através das condições de contorno

A metodologia utilizada para a obtenção da Eq.(4.79) para o modelo proposto por McCormack, é utilizada nas condições de contorno difuso-especular (Maxwell) e generalizadas (Cercignani-Lampis).

### 5.1. Condições de contorno difuso-especular

A partir da condições de contorno proposta por Maxwell, inicialmente multiplica-se as Eq.(2.48) pelas funções momentos Eqs.(4.53)-(4.54) e integra-se sobre todo  $c_y$  e  $c_z$  obtendo-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_1(-a, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z = (1 - \zeta_{11}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_1(-a, -c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z, \quad (5.1)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_1(-a, c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z = (1 - \zeta_{11}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_1(-a, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z, \quad (5.2)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_2(-a, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z = (1 - \zeta_{21}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_2(-a, -c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z \quad (5.3)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_2(-a, c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z =$$

$$(1 - \zeta_{21}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_2(-a, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z. \quad (5.4)$$

A seguir, repete-se o mesmo procedimento multiplicando-se a condição de contorno Eq.(2.49) pelas funções momentos Eqs.(4.53)-(4.54) e integra-se sobre todo  $c_y$  e  $c_z$  obtendo-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_1(a, -c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z =$$

$$(1 - \zeta_{12}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_1(a, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z, \quad (5.5)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_1(a, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z =$$

$$(1 - \zeta_{12}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_1(a, c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z, \quad (5.6)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_2(a, -c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z =$$

$$(1 - \zeta_{22}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_2(a, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z \quad (5.7)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_2(a, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z =$$

$$(1 - \zeta_{22}) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_2(a, c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z. \quad (5.8)$$

Reescrevendo as Eqs.(5.1)-(5.8) na forma vetorial onde  $c_x = \xi$ , tem-se

$$\mathbf{G}(-a, \xi) = \mathbf{S}_1 \mathbf{G}(-a, -\xi) \quad \text{e} \quad \mathbf{G}(a, -\xi) = \mathbf{S}_2 \mathbf{G}(a, \xi), \quad (5.9)$$

onde

$$\mathbf{S}_1 = \text{diag}\{1 - \zeta_{11}, 1 - \zeta_{11}, 1 - \zeta_{21}, 1 - \zeta_{21}\} \quad (5.10)$$

e

$$\mathbf{S}_2 = \text{diag}\{1 - \zeta_{12}, 1 - \zeta_{12}, 1 - \zeta_{22}, 1 - \zeta_{22}\}. \quad (5.11)$$

Aqui, tem-se que  $\zeta_{\alpha\beta}$  representa o coeficiente de acomodação para a espécie  $\alpha = 1, 2$  na placa  $\beta = 1, 2$ .

Com o objetivo de encontrar as grandezas macroscópicas dos gases para os problemas de transferência de massa, com a utilização da interação gás-superfície difuso-especular, substituiu-se a Eq.(4.113) nas condições de contorno dada pela Eq.(5.9) obtendo-se assim, um sistema quadrado com  $8N$  equações algébricas lineares e  $8N$  incógnitas, dadas pelas expressões

$$A_1\zeta_{11} + B_1[-2\xi_i + \zeta_{11}(-a\sigma_1 + \xi_i)] + \sum_{j=2}^{4N} A_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i-3}) - (1 - \zeta_{11})\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-3})] + B_1e^{-2a/\nu_j}[\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-3}) - (1 - \zeta_{11})\Phi(\nu_j, \xi_{4i-3})] = -[\zeta_{11}\sigma_1^2a^2a_1 + (2a_1\sigma_1a\xi_i)(2 - \zeta_{11}) + c_1\xi_i^2\zeta_{11} + d_1\zeta_{11} + E(\xi_i^2 - 1/2 - sw)\zeta_{11}], \quad (5.12)$$

$$\sum_{j=2}^{4N} A_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i-2}) - (1 - \zeta_{11})\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-2})] + B_1e^{-2a/\nu_j}[\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-2}) - (1 - \zeta_{11})\Phi(\nu_j, \xi_{4i-2})] = -[(2c_1 - 4a_1)\zeta_{11} + 2E\zeta_{11}], \quad (5.13)$$

$$A_1\zeta_{21}s + B_1[s\sigma_1(-2\xi_i/\sigma_2) + \zeta_{21}s\sigma_1(-a + \xi_i/\sigma_2)] + \sum_{j=2}^{4N} A_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i-1}) - (1 - \zeta_{21})\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-1})] + B_1e^{-2a/\nu_j}[\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-1}) - (1 - \zeta_{21})\Phi(\nu_j, \xi_{4i-1})] = -[\lambda a_1\sigma_2^2a^2\zeta_{21} + 2\lambda a_1\sigma_2a\xi_i(2 - \zeta_{21}) + c_3\xi_i^2\zeta_{21} + F\xi_i^2 - 1/2 - rw)\zeta_{21}], \quad (5.14)$$

$$\sum_{j=2}^{4N} A_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i}) - (1 - \zeta_{21})\Phi(\nu_j, -\xi_{4i})] + B_1e^{-2a/\nu_j}[\Phi(\nu_j, -\xi_{4i}) - (1 - \zeta_{21})\Phi(\nu_j, \xi_{4i})] = -[(2c_3 - 4\lambda a_1)\zeta_{21} + 2F\zeta_{21}], \quad (5.15)$$

$$A_1\zeta_{12} + B_1[2\xi_i + \zeta_{12}(a\sigma_1 - \xi_i)] + \sum_{j=2}^{4N} A_je^{-2a/\nu_j}[\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-3}) - (1 - \zeta_{12})\Phi(\nu_j, \xi_{4i-3})] + B_1[\Phi(\nu_j, \xi_{4i-3}) - (1 - \zeta_{12})\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-3})] = -[\zeta_{12}\sigma_1^2a^2a_1 + (2a_1\sigma_1a\xi_i)(2 - \zeta_{12}) + c_1\xi_i^2\zeta_{12} + d_1\zeta_{12} + E(\xi_i^2 - 1/2 - sw)\zeta_{12}], \quad (5.16)$$

$$\sum_{j=2}^{4N} A_je^{-2a/\nu_j}[\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-2}) - (1 - \zeta_{12})\Phi(\nu_j, \xi_{4i-2})] + B_1[\Phi(\nu_j, \xi_{4i-2}) - (1 - \zeta_{12})\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-2})] = -[(2c_1 - 4a_1)\zeta_{12} + 2E\zeta_{12}], \quad (5.17)$$



$$\begin{aligned}
A_1\zeta_{22}s + B_1[s\sigma_1(2\xi_i/\sigma_2) + \zeta_{22}s\sigma_1(a - \xi_i/\sigma_2)] + \sum_{j=2}^{4N} A_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-1}) - \\
(1 - \zeta_{22})\Phi(\nu_j, \xi_{4i-1})] + B_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i-1}) - (1 - \zeta_{22})\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-1})] = \\
-[\lambda a_1\sigma_2^2 a^2 \zeta_{22} + 2\lambda a_1\sigma_2 a \xi_i(2 - \zeta_{22}) + c_3 \xi_i^2 \zeta_{22} + F \xi_i^2 - 1/2 - rw)\zeta_{22}] \quad (5.18)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\sum_{j=2}^{4N} A_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i}) - (1 - \zeta_{22})\Phi(\nu_j, \xi_{4i})] + B_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i}) \\
-(1 - \zeta_{22})\Phi(\nu_j, -\xi_{4i})] = -[(2c_3 - 4\lambda a_1)\zeta_{22} + 2F\zeta_{22}], \quad (5.19)
\end{aligned}$$

onde  $i = 1, 2, \dots, N$  e  $j = 1, 2, \dots, 4N$ .

Vetorialmente, pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
A_1 \mathbf{G}_+(I - \mathbf{S}) + B_1 \mathbf{G}_-(-a, \xi_i) - \mathbf{S} B_1 \mathbf{G}_-(-a, -\xi_i) + \\
\sum_{j=2}^{4N} [A_j [\mathbf{\Phi}(v_j, \xi_i) - \mathbf{S} \mathbf{\Phi}(v_j, -\xi_i)] + B_j e^{-2a/\nu_j} [\mathbf{\Phi}(v_j, -\xi_i) - \mathbf{S} \mathbf{\Phi}(v_j, \xi_i)]] = -\mathbf{R}_1^*(\xi) \quad (5.20)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
A_1 \mathbf{G}_+(I - \mathbf{S}) + B_1 \mathbf{G}_-(a, -\xi_i) - \mathbf{S} B_1 \mathbf{G}_-(a, \xi_i) + \\
\sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-2a/\nu_j} [\mathbf{\Phi}(v_j, -\xi_i) - \mathbf{S} \mathbf{\Phi}(v_j, \xi_i)] + B_j [\mathbf{\Phi}(v_j, \xi_i) - \mathbf{S} \mathbf{\Phi}(v_j, -\xi_i)]] = -\mathbf{R}_2^*(\xi), \quad (5.21)
\end{aligned}$$

onde

$$\mathbf{R}_1^*(\xi) = \begin{bmatrix} \zeta_{11}\sigma_1^2 a^2 a_1 + (2a_1\sigma_1 a \xi_i)(2 - \zeta_{11}) + c_1 \xi_i^2 \zeta_{11} + d_1 \zeta_{11} + E(\xi_i^2 - 1/2 - sw)\zeta_{11} \\ (2c_1 - 4a_1)\zeta_{11} + 2E\zeta_{11} \\ \lambda a_1\sigma_2^2 a^2 \zeta_{21} + 2\lambda a_1\sigma_2 a \xi_i(2 - \zeta_{21}) + c_3 \xi_i^2 \zeta_{21} + F \xi_i^2 - 1/2 - rw)\zeta_{21} \\ (2c_3 - 4\lambda a_1)\zeta_{21} + 2F\zeta_{21} \end{bmatrix} \quad (5.22)$$

e

$$\mathbf{R}_2^*(\xi) = \begin{bmatrix} \zeta_{12}\sigma_1^2 a^2 a_1 + (2a_1\sigma_1 a \xi_i)(2 - \zeta_{12}) + c_1 \xi_i^2 \zeta_{12} + d_1 \zeta_{12} + E(\xi_i^2 - 1/2 - sw)\zeta_{12} \\ (2c_1 - 4a_1)\zeta_{12} + 2E\zeta_{12} \\ \lambda a_1\sigma_2^2 a^2 \zeta_{22} + 2\lambda a_1\sigma_2 a \xi_i(2 - \zeta_{22}) + c_3 \xi_i^2 \zeta_{22} + F \xi_i^2 - 1/2 - rw)\zeta_{22} \\ (2c_3 - 4\lambda a_1)\zeta_{22} + 2F\zeta_{22} \end{bmatrix}. \quad (5.23)$$

Resolve-se o sistema e encontra-se o valor para as constantes arbitrárias  $A_j$  e  $B_j$  para

posteriormente encontrar os resultados numéricos para as grandezas macroscópicas.

## 5.2. Condições de contorno de Cercignani-Lampis

A partir da condições de contorno proposta por Cercignani e Lampis, inicialmente multiplica-se a Eq.(2.51) pelas funções momentos Eqs.(4.53)-(4.54) e integra-se sobre todo  $c_y$  e  $c_z$  obtendo-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_1(-a, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z = (1 - \zeta_{11}) \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{11}(c'_x, c_x) \phi_1(c_y, c_z) h_1(-a, -c'_x, c_y, c_z) dc_y dc_z dc'_x, \quad (5.24)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_1(-a, c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z = (1 - \zeta_{11}) \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{11}(c'_x, c_x) \phi_2(c_y, c_z) h_1(-a, -c'_x, c_y, c_z) dc_x dc_z dc'_x, \quad (5.25)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_2(-a, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z = (1 - \zeta_{21}) \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{21}(c'_x, c_x) \phi_1(c_y, c_z) h_2(-a, -c'_x, c_y, c_z) dc_y dc_z dc'_x \quad (5.26)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_2(-a, c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z = (1 - \zeta_{21}) \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{21}(c'_x, c_x) \phi_2(c_y, c_z) h_2(-a, -c'_x, c_y, c_z) dc_x dc_z dc'_x. \quad (5.27)$$

A seguir, repete-se o mesmo procedimento multiplicando-se a condição de contorno Eq.(2.52) pelas funções momentos Eqs.(4.53)-(4.54) e integra-se sobre todo  $c_y$  e  $c_z$  obtendo-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_1(a, -c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z = (1 - \zeta_{12}) \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{12}(c'_x, c_x) \phi_1(c_y, c_z) h_1(a, c'_x, c_y, c_z) dc_y dc_z dc'_x, \quad (5.28)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_1(a, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z =$$

$$(1 - \zeta_{12}) \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty f_{12}(c'_x, c_x) \phi_2(c_y, c_z) h_1(a, c'_x, c_y, c_z) dc_x dc_z dc'_x, \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \phi_1(c_y, c_z) h_2(a, -c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z = \\ & (1 - \zeta_{22}) \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty f_{22}(c'_x, c_x) \phi_1(c_y, c_z) h_2(a, c'_x, c_y, c_z) dc_y dc_z dc'_x \end{aligned} \quad (5.30)$$

e

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \phi_2(c_y, c_z) h_2(a, -c_x, c_y, c_z) dc_x dc_z = \\ & (1 - \zeta_{22}) \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty f_{22}(c'_x, c_x) \phi_2(c_y, c_z) h_2(a, c'_x, c_y, c_z) dc_x dc_z dc'_x. \end{aligned} \quad (5.31)$$

onde

$$f_{n\beta}(c'_x, c_x) = \frac{2c'_x}{\zeta_{n\beta}} \exp \left[ -\frac{[(1 - \zeta_{n\beta})^{1/2} c_x - c'_x]^2}{\zeta_{n\beta}} \right] \mathcal{J}_0 \left[ \frac{2(1 - \zeta_{n\beta})^{1/2} |c'_x c_x|}{\zeta_{n\beta}} \right]. \quad (5.32)$$

Aqui, tem-se que  $\zeta_{\alpha\beta}$  representa o coeficiente de acomodação do momento tangencial para os gases  $\alpha = 1, 2$  nas placas  $\beta = 1, 2$  e  $\zeta_{n\beta}$  representa o coeficiente de acomodação de energia cinética para os gases  $n = \alpha = 1, 2$  nas placas  $\beta = 1, 2$ .

Reescrevendo as Eqs.(5.24)-(5.31) na forma vetorial onde  $c_x = \xi$ , tem-se

$$\mathbf{G}(-a, \xi) = \mathbf{S}_1^* \int_0^\infty \mathbf{G}(-a, -\xi') \mathbf{F}_1(\xi', \xi) d\xi', \quad (5.33)$$

$$\mathbf{G}(a, -\xi) = \mathbf{S}_2^* \int_0^\infty \mathbf{G}(a, \xi') \mathbf{F}_2(\xi', \xi) d\xi' \quad (5.34)$$

onde

$$\mathbf{S}_1^* = \text{diag}\{(1 - \zeta_{11}), (1 - \zeta_{11})^3, (1 - \zeta_{21})(1 - \zeta_{21})^3\}, \quad (5.35)$$

$$\mathbf{S}_2^* = \text{diag}\{(1 - \zeta_{12}), (1 - \zeta_{12})^3, (1 - \zeta_{22})(1 - \zeta_{22})^3\}, \quad (5.36)$$

$$\mathbf{F}_1(\xi', \xi) = \text{diag}\{f_{11}(\xi', \xi), f_{11}(\xi', \xi), f_{21}(\xi', \xi), f_{21}(\xi', \xi)\} \quad (5.37)$$

e

$$\mathbf{F}_2(\xi', \xi) = \text{diag}\{f_{12}(\xi', \xi), f_{12}(\xi', \xi), f_{22}(\xi', \xi), f_{22}(\xi', \xi)\}. \quad (5.38)$$

Com o objetivo de encontrar as grandezas macroscópicas dos gases para os problemas de transferência de massa, com a utilização da interação gás-superfície proposta por Cercignani e Lampis, substitui-se a Eq.(4.113) nas condições de contorno dadas pelas Eqs.(5.33)-(5.34) obtendo-se assim, um sistema quadrado com  $8N$  equações algébricas lineares e  $8N$  incógnitas, dadas pelas expressões

$$\begin{aligned}
& A_1[1 - (1 - \zeta_{11}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{11}(\xi_k, \xi_i)] + B_1[-\sigma_1 a - \xi_i + (1 - \zeta_{11}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{11}(\xi_k, \xi_i)(a\sigma_1 - \xi_i)] + \\
& \sum_{j=2}^{4N} [A_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i-3}) - (1 - \zeta_{11}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{11}(\xi_k, \xi_i)\Phi(\nu_j, -\xi_{4k-3})] + \\
& B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-3}) - (1 - \zeta_{11}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{11}(\xi_k, \xi_i)\Phi(\nu_j, \xi_{4k-3})]] = \\
& (1 - \zeta_{11}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{11}(\xi_k, \xi_i) (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_k^2 + d_1 - 2a_1 \sigma_1 a \xi_k + E(\xi_k^2 - 1/2 - sw)) - \\
& (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_i^2 + d_1 + 2a_1 \sigma_1 a \xi_i + E(\xi_i^2 - 1/2 - sw)), \quad (5.39)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=2}^{4N} [A_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i-2}) - (1 - \zeta_{11})^3 \sum_{k=1}^N \omega_k f_{11}(\xi_k, \xi_i)\Phi(\nu_j, -\xi_{4k-2})] + \\
& B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-2}) - (1 - \zeta_{11})^3 \sum_{k=1}^N \omega_k f_{11}(\xi_k, \xi_i)\Phi(\nu_j, \xi_{4k-2})]] = \\
& (1 - \zeta_{11})^3 \sum_{k=1}^N \omega_k f_{11}(\xi_k, \xi_i) (2c_1 - 4a_1 + 2E) - (2c_1 - 4a_1 + 2E), \quad (5.40)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& A_1[s - s(1 - \zeta_{21}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{21}(\xi_k, \xi_i)] + B_1[-s\sigma_1(a + \xi_i/\sigma_2) + (1 - \zeta_{21}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{21}(\xi_k, \xi_i) \\
& (s\sigma_1(a - \xi_k/\sigma_2))] + \sum_{j=2}^{4N} [A_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i-1}) - (1 - \zeta_{21}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{21}(\xi_k, \xi_i)\Phi(\nu_j, -\xi_{4k-1})] + \\
& B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-1}) - (1 - \zeta_{21}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{21}(\xi_k, \xi_i)\Phi(\nu_j, \xi_{4k-1})]] = \\
& (1 - \zeta_{21}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{21}(\xi_k, \xi_i) (\lambda\sigma_2^2 a^2 a_1 + c_3 \xi_k^2 - 2a_1 \lambda\sigma_2 a \xi_k + F(\xi_k^2 - 1/2 - rw)) - \\
& (\lambda\sigma_2^2 a^2 a_1 + c_3 \xi_i^2 + 2a_1 \lambda\sigma_2 a \xi_i + F(\xi_i^2 - 1/2 - rw)), \quad (5.41)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=2}^{4N} [A_j[\Phi(\nu_j, \xi_{4i}) - (1 - \zeta_{21})^3 \sum_{k=1}^N \omega_k f_{21}(\xi_k, \xi_i)\Phi(\nu_j, -\xi_{4k})] + \\
& B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i}) - (1 - \zeta_{21})^3 \sum_{k=1}^N \omega_k f_{21}(\xi_k, \xi_i)\Phi(\nu_j, \xi_{4k})]] =
\end{aligned}$$

$$(1 - \zeta_{21})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{21}(\xi_k, \xi_i)(2c_3 - 4\lambda a_1 + 2F) - (2c_3 - 4\lambda a_1 + 2F), \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned} & A_1 \left[ 1 - (1 - \zeta_{12}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) \right] + B_1 \left[ -\sigma_1 a - \xi_i + (1 - \zeta_{12}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{12}(\xi_k, \xi_i)(a\sigma_1 - \xi_i) \right] + \\ & \sum_{j=2}^{4N} \left[ A_j [\Phi(\nu_j, \xi_{4i-3}) - (1 - \zeta_{12}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, -\xi_{4k-3})] + \right. \\ & \left. B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-3}) - (1 - \zeta_{12}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, \xi_{4k-3})] \right] = \\ & (1 - \zeta_{12}) \sum_{k=1}^N w_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_k^2 + d_1 - 2a_1 \sigma_1 a \xi_k + E(\xi_k^2 - 1/2 - sw)) - \\ & (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_i^2 + d_1 + 2a_1 \sigma_1 a \xi_i + E(\xi_i^2 - 1/2 - sw)), \quad (5.43) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{j=2}^{4N} \left[ A_j [\Phi(\nu_j, \xi_{4i-2}) - (1 - \zeta_{12})^3 \sum_{k=1}^N \omega_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, -\xi_{4k-2})] + \right. \\ & \left. B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-2}) - (1 - \zeta_{12})^3 \sum_{k=1}^N \omega_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, \xi_{4k-2})] \right] = \\ & (1 - \zeta_{12})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) (2c_1 - 4a_1 + 2E) - (2c_1 - 4a_1 + 2E), \quad (5.44) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & A_1 \left[ s - s(1 - \zeta_{22}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) \right] + B_1 \left[ -s\sigma_1(a + \xi_i/\sigma_2) + (1 - \zeta_{22}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) \right. \\ & \left. (s\sigma_1(a - \xi_k/\sigma_2)) \right] + \sum_{j=2}^{4N} \left[ A_j [\Phi(\nu_j, \xi_{4i-1}) - (1 - \zeta_{22}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, -\xi_{4k-1})] + \right. \\ & \left. B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i-1}) - (1 - \zeta_{22}) \sum_{k=1}^N \omega_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, \xi_{4k-1})] \right] = \\ & (1 - \zeta_{22}) \sum_{k=1}^N w_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) (\lambda \sigma_2^2 a^2 a_1 + c_3 \xi_k^2 - 2a_1 \lambda \sigma_2 a \xi_k + F(\xi_k^2 - 1/2 - rw)) - \\ & (\lambda \sigma_2^2 a^2 a_1 + c_3 \xi_i^2 + 2a_1 \lambda \sigma_2 a \xi_i + F(\xi_i^2 - 1/2 - rw)) \quad (5.45) \end{aligned}$$

e

$$\sum_{j=2}^{4N} \left[ A_j [\Phi(\nu_j, \xi_{4i}) - (1 - \zeta_{22})^3 \sum_{k=1}^N \omega_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, -\xi_{4k})] + \right.$$

$$B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_{4i}) - (1 - \zeta_{22})^3 \sum_{k=1}^N \omega_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, \xi_{4k})] =$$

$$(1 - \zeta_{22})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) (2c_3 - 4\lambda a_1 + 2F) - (2c_3 - 4\lambda a_1 + 2F), \quad (5.46)$$

onde  $i = 1, 2, \dots, N$  e  $j = 1, 2, \dots, 4N$ .

Vetorialmente, pode ser escrito como

$$A_1 \mathbf{G}_+ [I - \mathbf{S}_1^* \sum_{k=1}^N w_k \mathbf{F}_1(\xi_k, \xi_i)] + B_1 [\mathbf{G}_-(-a, \xi_i) - \mathbf{S}_1^* \sum_{k=1}^N w_k \mathbf{F}_1(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}_-(-a, -\xi_k)] +$$

$$\sum_{j=2}^{4N} [A_j [\Phi(\nu_j, \xi_i) - \mathbf{S}_1^* \Xi] + B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_i) - \mathbf{S}_1^* \Lambda]] = \mathbf{R}_1^*(\xi) \quad (5.47)$$

e

$$A_1 \mathbf{G}_+ [I - \mathbf{S}_2^* \sum_{k=1}^N w_k \mathbf{F}_2(\xi_k, \xi_i)] + B_1 [\mathbf{G}_-(a, -\xi_i) - \mathbf{S}_2^* \sum_{k=1}^N w_k \mathbf{F}_2(\xi_k, \xi_i) \mathbf{G}_-(a, \xi_k)] +$$

$$\sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_i) - \mathbf{S}_2^* \Lambda] + B_j [\Phi(\nu_j, \xi_i) - \mathbf{S}_2^* \Xi]] = \mathbf{R}_2^*(\xi), \quad (5.48)$$

onde

$$\Xi = \sum_{k=1}^N w_k \mathbf{F}_\beta(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, -\xi_k), \quad (5.49)$$

$$\Lambda = \sum_{k=1}^N w_k \mathbf{F}_\beta(\xi_k, \xi_i) \Phi(\nu_j, \xi_k), \quad (5.50)$$

$$\mathbf{R}_1^*(\xi) =$$

$$\begin{bmatrix} (1 - \zeta_{11}) \sum_{k=1}^N w_k f_{11}(\xi_k, \xi_i) (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_k^2 + d_1 - 2a_1 \sigma_1 a \xi_k) \\ (1 - \zeta_{11})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{11}(\xi_k, \xi_i) (2c_1 - 4a_1) \\ (1 - \zeta_{12}) \sum_{k=1}^N w_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 - 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_k + c_3 \xi_k^2 \\ (1 - \zeta_{12})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) (2c_3 - 4\lambda a_1) \end{bmatrix} -$$

$$\begin{bmatrix} (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_i^2 + d_1 + 2a_1 \sigma_1 a \xi_i) \\ (2c_1 - 4a_1) \\ \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 + 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_i + c_3 \xi_i^2 \\ (2c_3 - 4\lambda a_1) \end{bmatrix} \quad (5.51)$$

e

$$\mathbf{R}_2^*(\xi) =$$

$$\begin{aligned}
& \left[ \begin{array}{l} (1 - \zeta_{21}) \sum_{k=1}^N w_k f_{21}(\xi_k, \xi_i) (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_k^2 + d_1 - 2a_1 \sigma_1 a \xi_k) \\ (1 - \zeta_{21})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{21}(\xi_k, \xi_i) (2c_1 - 4a_1) \\ (1 - \zeta_{22}) \sum_{k=1}^N w_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 - 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_k + c_3 \xi_k^2 \\ (1 - \zeta_{22})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) (2c_3 - 4\lambda a_1) \end{array} \right] - \\
& \left[ \begin{array}{l} (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_i^2 + d_1 + 2a_1 \sigma_1 a \xi_i) \\ (2c_1 - 4a_1) \\ \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 + 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_i + c_3 \xi_i^2 \\ (2c_3 - 4\lambda a_1) \end{array} \right]. \quad (5.52)
\end{aligned}$$

Resolve-se o sistema e encontra-se o valor para as constantes arbitrárias  $A_j$  e  $B_j$  para posteriormente encontrar os resultados numéricos para as grandezas macroscópicas.

# Capítulo 6

## Grandezas macroscópicas da mistura binária gasosa

Para atingir o objetivo desejado precisa-se encontrar os valores para as propriedades macroscópicas da mistura binária de gases, perfil de velocidade, perfil do fluxo de calor e tensão de cisalhamento, que segundo Siewert e Valougeorgis [79], são escritos em termos da função de perturbação  $h_\alpha$ , respectivamente,

- Perfil de velocidade:

$$v_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) c_x dc_x dc_y dc_z; \quad (6.1)$$

- Perfil de tensão de cisalhamento:

$$p_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) c_x c_z dc_x dc_y dc_z; \quad (6.2)$$

- Perfil de fluxo de calor:

$$q_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) (\mathbf{c}^2 - 5/2) c_x dc_x dc_y dc_z. \quad (6.3)$$

Trabalha-se também aqui, com os momentos integrais, reescrevendo-se assim, as grandezas macroscópicas da mistura binária de gases, respectivamente como

- Perfil de velocidade:

$$v_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) g_{2\alpha-1}(y, \xi) d\xi \quad \alpha = 1, 2. \quad (6.4)$$

- Perfil de tensão de cisalhamento:

$$p_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) g_{2\alpha-1}(y, \xi) \xi d\xi \quad \alpha = 1, 2. \quad (6.5)$$



- Perfil de fluxo de calor:

$$q_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi)[(\xi^2 - 1/2)g_{2\alpha-1}(y, \xi) + g_{2\alpha}(y, \xi)]d\xi \quad \alpha = 1, 2. \quad (6.6)$$

Além das grandezas físicas desejadas, podemos encontrar também a taxa do fluxo de partículas e a taxa do fluxo de calor para cada gás ( $\alpha = 1, 2$ ), que são dadas, respectivamente, pelas integrais

$$U_\alpha = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a u_\alpha(\tau)d\tau \quad e \quad Q_\alpha = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a q_\alpha(\tau)d\tau. \quad (6.7)$$

Afim de encontrar os resultados numéricos para as grandezas físicas da mistura gasosa, substitui-se as Eqs.(4.82) e (4.83) nas Eqs.(6.4)-(6.6) escrevendo-as na versão de ordenadas discretas para os dois gases ( $\alpha = 1, 2$ ), o perfil de velocidade, respectivamente,

$$u_1(\tau) = A_1 + B_1\sigma_1\tau + a_1(\sigma_1\tau)^2 + \frac{1}{2}c_1 + d_1 - swE + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{u,1}(\nu_j) \quad (6.8)$$

e

$$u_2(\tau) = A_1s + B_1s\sigma_1\tau + \lambda a_1(\sigma_2\tau)^2 + \frac{1}{2}c_3 - rwF + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{u,2}(\nu_j) \quad (6.9)$$

o perfil de tensão de cisalhamento, respectivamente

$$p_1(\tau) = -a_1\sigma_1\tau - \frac{1}{2}B_1 + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} - B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{p,1}(\nu_j) \quad (6.10)$$

e

$$p_2(\tau) = -\lambda a_1\sigma_2\tau - B_1 \frac{s\sigma_1}{2\sigma_2} + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} - B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{p,2}(\nu_j), \quad (6.11)$$

e o perfil do fluxo de calor, respectivamente

$$q_1(\tau) = -4a_1 + \frac{5}{2}(c_1 + E) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{q,1}(\nu_j) \quad (6.12)$$

e

$$q_2(\tau) = -4a_1\lambda + \frac{5}{2}(c_3 + F) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{q,2}(\nu_j). \quad (6.13)$$

Para as taxas do fluxo de partículas e fluxo de calor tem-se, respectivamente,

$$U_1 = \frac{1}{a}[A_1 - swE + (1/2)c_1 + d_1 + (1/3)a_1(\sigma_1 a)^2] + \frac{1}{2a^2} \sum_{j=2}^{4N} N_{u,1}(\nu_j) \nu_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) [A_j + B_j], \quad (6.14)$$

$$U_2 = \frac{1}{a}[sA_1 - rwF + (1/2)c_3 + (1/3)\lambda a_1(\sigma_2 a)^2] + \frac{1}{2a^2} \sum_{j=2}^{4N} N_{u,2}(\nu_j) \nu_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) [A_j + B_j], \quad (6.15)$$

$$Q_1 = \frac{1}{a}[(5/2)(E + c_1) - 4a_1] + \frac{1}{2a^2} \sum_{j=2}^{4N} N_{q,1}(\nu_j) \nu_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) [A_j + B_j] \quad (6.16)$$

e

$$Q_2 = \frac{1}{a}[(5/2)(F + c_3) - 4\lambda a_1] + \frac{1}{2a^2} \sum_{j=2}^{4N} N_{q,2}(\nu_j) \nu_j (1 - e^{-2a/\nu_j}) [A_j + B_j]. \quad (6.17)$$

Nas Eqs. (6.8)-(6.17) tem-se

$$N_{v,\alpha}(\nu_j) = \mathbf{F}_\alpha^T \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (6.18)$$

$$N_{p,\alpha}(\nu_j) = \mathbf{F}_\alpha^T \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \xi_k [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (6.19)$$

e

$$N_{q,\alpha}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \mathbf{F}_{q,\alpha}^T(\xi_k) [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (6.20)$$

onde o sobrescrito  $T$  significa a operação transposta,

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_{q,1} = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.21)$$

e

$$\mathbf{F}_{q,2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (6.22)$$

No caso em que considera-se condição de simetria nas placas, substitui-se as equações balanço Eqs.(4.82) e (4.83) nas grandezas macroscópicas Eqs.(6.4)-(6.6) obtendo-se na versão de ordenadas discretas para os dois gases ( $\alpha = 1, 2$ ), o perfil de velocidade, respectivamente,

$$u_1(\tau) = A_1 + a_1(\sigma_1\tau)^2 + \frac{1}{2}c_1 + d_1 - swE + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{u,1}(\nu_j) [e^{-(a+\tau)/\nu_j} + e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \quad (6.23)$$

e

$$u_2(\tau) = A_1 s + \lambda a_1(\sigma_2\tau)^2 + \frac{1}{2}c_3 - rwF + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{u,2}(\nu_j) [e^{-(a+\tau)/\nu_j} + e^{-(a-\tau)/\nu_j}], \quad (6.24)$$

o perfil de tensão de cisalhamento, respectivamente

$$p_1(\tau) = -a_1\sigma_1\tau + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{p,1}(\nu_j) [e^{-(a+\tau)/\nu_j} - e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \quad (6.25)$$

e

$$p_2(\tau) = -\lambda a_1\sigma_2\tau + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{p,2}(\nu_j) [e^{-(a+\tau)/\nu_j} - e^{-(a-\tau)/\nu_j}], \quad (6.26)$$

e o perfil do fluxo de calor, respectivamente

$$q_1(\tau) = -4a_1 + \frac{5}{2}(c_1 + E) + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{q,1}(\nu_j) [e^{-(a+\tau)/\nu_j} + e^{-(a-\tau)/\nu_j}] \quad (6.27)$$

e

$$q_2(\tau) = -4a_1\lambda + \frac{5}{2}(c_3 + F) + \sum_{j=2}^{4N} A_j N_{q,2}(\nu_j) [e^{-(a+\tau)/\nu_j} + e^{-(a-\tau)/\nu_j}]. \quad (6.28)$$

Para as taxas do fluxo de partículas e fluxo de calor tem-se, respectivamente,

$$U_1 = \frac{1}{a}[A_1 - swE + (1/2)c_1 + d_1 + (1/3)a_1(\sigma_1 a)^2] + \frac{1}{a^2} \sum_{j=2}^{4N} A_j \nu_j N_{u,1}(\nu_j) [1 - e^{-2a/\nu_j}], \quad (6.29)$$

$$U_2 = \frac{1}{a}[sA_1 - rwF + (1/2)c_3 + (1/3)\lambda a_1(\sigma_2 a)^2] + \frac{1}{a^2} \sum_{j=2}^{4N} A_j \nu_j N_{u,2}(\nu_j) [1 - e^{-2a/\nu_j}], \quad (6.30)$$

$$Q_1 = \frac{1}{a}[(5/2)(E + c_1) - 4a_1] + \frac{1}{a^2} \sum_{j=2}^{4N} A_j \nu_j N_{q,1}(\nu_j) [1 - e^{-2a/\nu_j}] \quad (6.31)$$

e

$$Q_2 = \frac{1}{a}[(5/2)(F + c_3) - 4\lambda a_1] + \frac{1}{a^2} \sum_{j=2}^{4N} A_j \nu_j N_{q,2}(\nu_j) [1 - e^{-2a/\nu_j}]. \quad (6.32)$$

Nas Eqs. (6.23)-(6.32) os valores para  $N_{v,\alpha}(\nu_j)$ ,  $N_{p,\alpha}(\nu_j)$  e  $N_{q,\alpha}(\nu_j)$  são dados pelas Eqs.(6.18)-(6.20).

Com as grandezas macroscópicas para uma mistura binária de gases escrita em orde-

nadas discretas, agora basta substituir nas Eqs.(6.8)-(6.17) as constantes arbitrárias  $A_j$ , e  $B_j$  obtidas através da resolução dos sistemas Eqs.(5.20)-(5.21) e Eqs.(5.47)-(5.48). Os resultados numéricos são obtidos através da implementação computacional.

# Capítulo 7

## Resultados Numéricos

Para obter-se os resultados numéricos para as grandezas macroscópicas do fluxo da mistura gasosa em um canal plano, foi feita a implementação computacional através de programas em linguagem FORTRAN.

Primeiramente, define-se o problema a ser trabalhado, para o caso do Problema de Poiseuille (fluxo dos gases impulsionado por um gradiente de pressão), atribui-se o valor  $x_T = 0$  e  $x_C = 0$ , e usa-se a normalização  $x_P = 1$ . Para o caso do Problema de Creep-Térmico (fluxo dos gases impulsionado por um gradiente de temperatura), atribui-se o valor  $x_P = 0$  e  $x_C = 0$ , e usa-se a normalização  $x_T = 1$ . Similarmente para o caso do Problema Difuso (fluxo dos gases impulsionado por um gradiente de densidade), atribui-se o valor  $x_P = 0$  e  $x_T = 0$ , e usa-se a normalização  $x_C = 1$ .

Após definido o problema para o qual quer-se encontrar as grandezas macroscópicas desejadas, deve-se definir o esquema de quadratura associado a versão analítica do método de ordenadas discretas ADO). Visando avaliar integrais no intervalo  $[1, \infty)$ , usa-se a transformação não-linear

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

para mapear o intervalo  $[0, \infty)$  sob o intervalo  $[0, 1]$  e então utiliza-se o esquema de quadratura de Gauss-Legendre [9] mapeado linearmente no intervalo  $[0, 1]$ .

Tendo definido o esquema de quadratura, calcula-se os autovalores e autovetores definidos pela Eq.(4.107) usando-se a subrotina RG, do pacote matemático EISPACK [81]. A seguir determina-se as constantes de separação  $\nu_j$  dada pela Eq.(4.104) e os vetores elementares  $\Phi \pm (\nu_j)$  definidos nas Eqs.(4.109).

Para resolver o sistema algébrico linear que determina as constantes arbitrárias para a solução em ordenadas discretas, usa-se as subrotinas DGECO e DGESL do pacote matemático LINPACK [20], o qual resolve o sistema através o método de eliminação gaussiana. Os sistemas são dados pelas Eqs. (5.20)-(5.21) e Eqs.(5.47)-(5.48).

Todos os cálculos numéricos foram realizados para três misturas de gases nobres: Néônio - Argônio, Hélio - Argônio e Hélio - Xenônio. As espécies que compõem es-

sas misturas possuem as seguintes massas atômicas:  $m_{He} = 4,0026$ ,  $m_{Ne} = 20,183$ ,  $m_{Ar} = 39,948$  e  $m_{Xe} = 131,30$  unidades de massa atômica. Para calcular os diâmetros moleculares  $d_\alpha$  para todas as espécies  $\alpha$ , segundo Sharipov e Kalempa [70] usa-se a expressão da viscosidade  $\mu_\alpha$  para um gás simples, obtida da equação de Boltzmann para o modelo de esfera rígidas [56, 57]. Os diâmetros são encontrados através de dados experimentais das viscosidades  $\mu_\alpha$  à temperatura  $T_0 = 300k$  segundo Kestin [35]. Com isso, as razões entre os diâmetros  $d_2/d_1$  valem

- para a mistura Ne-Ar:  $d_2/d_1 = 1,406$ ;
- para a mistura He-Ar:  $d_2/d_1 = 1,665$ ;
- para a mistura He-Xe:  $d_2/d_1 = 2,226$ .

Os resultados a seguir, serão encontrados para estes três casos, considerando-se  $N$  variando de 60 à 100 pontos de quadratura, e em termos da concentração molar, é definida em relação a primeira partícula como

$$C = \frac{n_1/n_2}{1 + n_1/n_2}. \quad (7.2)$$

Vale salientar que, pode-se testar os resultados obtidos para problemas de mistura de gases, reduzindo-se para o caso de um único gás. Isso ocorre através de três caminhos:

- Considerando-se  $n_1 = 0$ ;
- Considerando-se  $n_2 = 0$ ;
- Considerando-se  $m_1 = m_2$  e  $d_1 = d_2$ .

Os problemas de mistura de gases baseado no modelo de McCormack podem ser reduzidos para o modelo S, Ref. [72], quando os dados da mistura de gases são reduzidos para os de um gás.

Neste trabalho, usa-se as seguintes notações: DE e CL, para representar, respectivamente, as condições de contorno (difuso-especular) de Maxwell e condições de contorno (generalizadas) de Cercignani-Lampis. Ainda, LBE representa a equação linearizada de Boltzmann propriamente dita com condições de contorno de Maxwell. Nas tabelas, as notações  $(-1)$ ,  $(-2)$ ,  $(1)$  e  $(2)$  representam, respectivamente,  $10^{-1}$ ,  $10^{-2}$ ,  $10^1$  e  $10^2$ .

Para comparações com os resultados encontrados em [27] multiplica-se os resultados encontrados neste trabalho pelo fator de conversão  $\xi_M$ , isso devido a diferente forma de definir as variáveis espaço adimensional em [27]. Define-se o fator de conversão pela equação

$$\xi_M = \frac{c_2[Y_1 + X_{2,1}^{(4)}] + c_1[Y_2 + X_{1,2}^{(4)}]}{Y_1 Y_2 - X_{1,2}^{(4)} X_{2,1}^{(4)}}, \quad (7.3)$$

onde

$$Y_1 = X_{1,1}^{(3)} + X_{1,2}^{(3)} - X_{1,1}^{(4)}, \quad Y_2 = X_{2,2}^{(3)} + X_{2,1}^{(3)} - X_{2,2}^{(4)}, \quad (7.4)$$

$$X_{\alpha,\beta}^{(3)} = \left( \frac{10}{3} + \frac{2m_\beta}{m_\alpha} \right) F_{\alpha,\beta}, \quad X_{\alpha,\beta}^{(4)} = \frac{4}{3} F_{\alpha,\beta} \quad (7.5)$$

e

$$F_{\alpha,\beta} = \frac{2c_\beta m_\alpha}{5m_\beta} \left( \frac{m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \right)^{3/2} \left( \frac{c_1 m_1 + c_2 m_2}{m_\alpha} \right)^{1/2} \left( \frac{d_\alpha + d_\beta}{c_1 d_1 + c_2 d_2} \right)^2. \quad (7.6)$$

A seguir, apresenta-se os resultados numéricos para as grandezas macroscópicas para várias combinações dos coeficientes de acomodação tangencial e normal com condições de contorno de Maxwell e de Cercignani-Lampis e, em alguns casos, faz-se comparações com outros trabalhos existentes 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)-(7.9).

Nas tabelas (7.1) e (7.3) apresenta-se, respectivamente, resultados para o perfil de velocidade e perfil de fluxo de calor para o caso baseado nas condições de contorno de Cercignani-Lampis, onde os coeficientes de acomodação tangencial possuem mesmo valor, assim, compara-se com os resultados numéricos obtidos por Siewert e Valougeorgis [79].

Tabela 7.1: Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde  $2a = 1, 0$ ,  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = \zeta_{21} = \zeta_{22} = 1, 0$  e  $C = 0, 5$ .

$\tau/a$	$DE^a - u_1(\tau)$	$DE^a - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$
0,0	-8,00649(-1)	-9,61435(-1)	-8,00649(-1)	-9,61435(-1)
0,1	-7,98282(-1)	-9,58321(-1)	-7,98282(-1)	-9,58321(-1)
0,2	-7,91138(-1)	-9,48927(-1)	-7,91138(-1)	-9,48927(-1)
0,3	-7,79088(-1)	-9,33096(-1)	-7,79088(-1)	-9,33096(-1)
0,4	-7,61892(-1)	-9,10535(-1)	-7,61892(-1)	-9,10535(-1)
0,5	-7,39162(-1)	-8,80774(-1)	-7,39162(-1)	-8,80774(-1)
0,6	-7,10285(-1)	-8,43063(-1)	-7,10285(-1)	-8,43063(-1)
0,7	-6,74252(-1)	-7,96168(-1)	-6,74252(-1)	-7,96168(-1)
0,8	-6,29239(-1)	-7,37845(-1)	-6,29239(-1)	-7,37845(-1)
0,9	-5,71200(-1)	-6,63082(-1)	-5,71200(-1)	-6,63082(-1)
1,0	-4,79774(-1)	-5,46308(-1)	-4,79774(-1)	-5,46308(-1)

*Ref*<sup>a</sup>=Siewert e Valougeorgis[79]

Considera-se  $\zeta_{n1} = \zeta_{n2} = 0, 5$  em CL.

Observa-se na tabela acima que os resultados encontrados, aparentemente, são iguais, mas através de uma reprodução analítica e computacional do trabalho publicado por Siewert e Valougeorgis [79], constatou-se divergência entre os resultados obtidos via as duas condições de contorno a partir da décima primeira casa decimal.

Tabela 7.2: Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde  $2a = 1,0$ ,  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ ,  $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$  e  $C = 0,5$ .

$\tau/a$	$DE - u_1(\tau)$	$DE - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$
			$\zeta_{n1} = 0,5$	$\zeta_{n1} = 0,5$	$\zeta_{n1} = 0,01$	$\zeta_{n1} = 0,01$
			$\zeta_{n2} = 0,5$	$\zeta_{n2} = 0,5$	$\zeta_{n2} = 0,01$	$\zeta_{n2} = 0,01$
0,0	-9,97361(-1)	-1,53449	-9,94798(-1)	-1,52929	-9,97270(-1)	-1,53428
0,1	-9,94540(-1)	-1,53205	-9,91972(-1)	-1,52676	-9,94449(-1)	-1,53184
0,2	-9,86020(-1)	-1,52471	-9,83440(-1)	-1,51193	-9,85928(-1)	-1,52449
0,3	-9,71627(-1)	-1,51237	-9,69021(-1)	-1,50630	-9,71530(-1)	-1,51213
0,4	-9,51015(-1)	-1,49486	-9,48393(-1)	-1,48809	-9,50924(-1)	-1,49461
0,5	-9,23674(-1)	-1,47191	-9,21030(-1)	-1,46419	-9,23583(-1)	-1,47162
0,6	-8,88762(-1)	-1,44305	-8,86106(-1)	-1,43410	-8,88673(-1)	-1,44273
0,7	-8,44910(-1)	-1,40752	-8,42264(-1)	-1,39702	-8,44825(-1)	-1,40718
0,8	-7,89661(-1)	-1,36389	-7,87071(-1)	-1,35143	-7,89585(-1)	-1,36356
0,9	-7,17605(-1)	-1,30886	-7,15163(-1)	-1,29394	-7,17544(-1)	-1,30865
1,0	-6,01928(-1)	-1,22437	-5,99926(-1)	-1,20668	-6,01894(-1)	-1,22531

Das duas tabelas anteriores, observa-se que a espécie pesada da mistura possui maior velocidade em relação a espécie mais leve e, as duas espécies constituintes da mistura apresentam segundo a tabela (7.2) maior velocidade nos resultados obtidos via condição de contorno difuso especular que os resultados obtidos via condições de contorno de Cercignani-Lampis. Pode-se observar graficamente os resultados obtidos na tabela (7.2) na figura abaixo

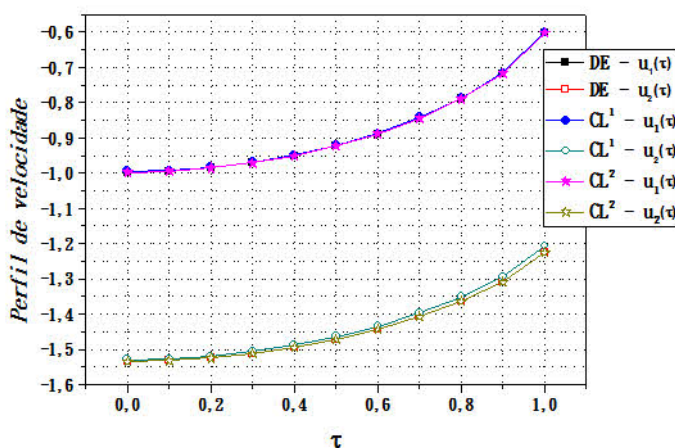


Figura 7.1: Perfil de velocidade - Mistura Ne-Ar -  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ ,  $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$  e  $C = 0,5$ .



Tabela 7.3: Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde  $2a = 1, 0$ ,  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = \zeta_{21} = \zeta_{22} = 1, 0$  e  $C = 0, 5$ .

$\tau/a$	$DE^a - q_1(\tau)$	$DE^a - q_2(\tau)$	$CL - q_1(\tau)$	$CL - q_2(\tau)$
0,0	2,09771(-1)	2,78327(-1)	2,09771(-1)	2,78327(-1)
0,1	2,09116(-1)	2,77171(-1)	2,09116(-1)	2,77171(-1)
0,2	2,07131(-1)	2,73675(-1)	2,07131(-1)	2,73675(-1)
0,3	2,03758(-1)	2,67751(-1)	2,03758(-1)	2,67751(-1)
0,4	1,98887(-1)	2,59235(-1)	1,98887(-1)	2,59235(-1)
0,5	1,92344(-1)	2,47866(-1)	1,92344(-1)	2,47866(-1)
0,6	1,83853(-1)	2,33227(-1)	1,83853(-1)	2,33227(-1)
0,7	1,72963(-1)	2,14637(-1)	1,72963(-1)	2,14637(-1)
0,8	1,58867(-1)	1,90864(-1)	1,58867(-1)	1,90864(-1)
0,9	1,39794(-1)	1,59167(-1)	1,39794(-1)	1,59167(-1)
1,0	1,07018(-1)	1,05619(-1)	1,07018(-1)	1,05619(-1)

*Ref*<sup>a</sup>=Siewert e Valougeorgis[79]

Considera-se  $\zeta_{n1} = \zeta_{n2} = 0, 5$  em CL.

Observa-se na tabela acima, que os resultados encontrados, aparentemente, são iguais, mas através de uma reprodução analítica e computacional do trabalho publicado por Siewert e Valougeorgis [79], conclui-se que há divergência entre os resultados obtidos via as duas condições de contorno a partir da décima casa decimal.

Tabela 7.4: Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde  $2a = 1, 0$ ,  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1, 0$ ,  $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0, 5$  e  $C = 0, 5$ .

$\tau/a$	$DE - q_1(\tau)$	$DE - q_2(\tau)$	$CL - q_1(\tau)$	$CL - q_2(\tau)$	$CL - q_1(\tau)$	$CL - q_2(\tau)$
			$\zeta_{n1} = 0, 5$	$\zeta_{n1} = 0, 5$	$\zeta_{n1} = 0, 01$	$\zeta_{n1} = 0, 01$
			$\zeta_{n2} = 0, 5$	$\zeta_{n2} = 0, 5$	$\zeta_{n2} = 0, 01$	$\zeta_{n2} = 0, 01$
0,0	2,36240(-1)	2,31016(-1)	2,32881(-1)	2,09123(-1)	2,35231(-1)	2,24263(-1)
0,1	2,35321(-1)	2,30268(-1)	2,31963(-1)	2,08301(-1)	2,34312(-1)	2,23487(-1)
0,2	2,32536(-1)	2,28010(-1)	2,29184(-1)	2,05815(-1)	2,31529(-1)	2,21140(-1)
0,3	2,27802(-1)	2,24184(-1)	2,24461(-1)	2,01604(-1)	2,26797(-1)	2,17164(-1)
0,4	2,20964(-1)	2,18695(-1)	2,17642(-1)	1,95556(-1)	2,19965(-1)	2,11457(-1)
0,5	2,11776(-1)	2,11382(-1)	2,08484(-1)	1,87491(-1)	2,10785(-1)	2,03850(-1)
0,6	1,99844(-1)	2,01992(-1)	1,96602(-1)	1,77126(-1)	1,98867(-1)	1,94075(-1)
0,7	1,84524(-1)	1,40106(-1)	1,81360(-1)	1,63992(-1)	1,83568(-1)	1,81694(-1)
0,8	1,64652(-1)	1,74953(-1)	1,61616(-1)	1,47248(-1)	1,63731(-1)	1,56909(-1)
0,9	1,37651(-1)	1,54786(-1)	1,34833(-1)	1,25016(-1)	1,36788(-1)	1,44923(-1)
1,0	9,05563(-2)	1,20180(-1)	8,82452(-2)	8,76225(-2)	8,98267(-2)	1,09380(-1)

Observa-se graficamente o comportamento das soluções obtidas na tabela acima na figura que segue

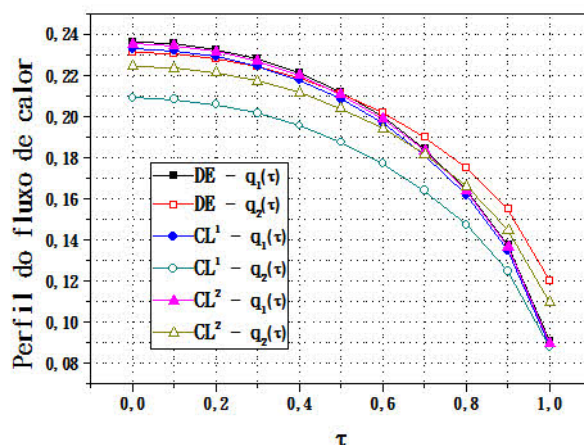


Figura 7.2: Perfil do fluxo de calor - Mistura Ne-Ar -  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ ,  $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$  e  $C = 0,5$ .

Tabela 7.5: Perfil tensão de cisalhamento de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde  $2a = 1,0$ ,  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ ,  $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$  e  $C = 0,5$ .

$\tau/a$	$DE - p_1(\tau)$	$DE - p_2(\tau)$	$CL - p_1(\tau)$	$CL - p_2(\tau)$	$CL - p_1(\tau)$	$CL - p_2(\tau)$
			$\zeta_{n1} = 0,5$	$\zeta_{n1} = 0,5$	$\zeta_{n1} = 0,01$	$\zeta_{n1} = 0,01$
			$\zeta_{n2} = 0,5$	$\zeta_{n2} = 0,5$	$\zeta_{n2} = 0,01$	$\zeta_{n2} = 0,01$
0,0	-4,24534(-17)	-3,19844(-17)	-2,13013(-16)	-2,85513(-16)	-3,45765(-17)	-7,20835(-17)
0,1	-2,76572(-2)	-2,23428(-1)	-2,76443(-2)	-2,23557(-2)	-2,76576(-2)	-2,23424(-2)
0,2	-5,53614(-2)	-4,46386(-1)	-5,53328(-2)	-4,46672(-2)	-5,53622(-2)	-4,46378(-2)
0,3	-8,31611(-2)	-6,68389(-1)	-8,31112(-2)	-6,68888(-2)	-8,31162(-2)	-6,68379(-2)
0,4	-1,11108(-1)	-8,88917(-1)	-1,11028(-1)	-8,89718(-2)	-1,11109(-1)	-8,88906(-2)
0,5	-1,39261(-1)	-1,10739(-1)	-1,39138(-1)	-1,10862(-1)	-1,39262(-1)	-1,10738(-1)
0,6	-1,67684(-1)	-1,32316(-1)	-1,67503(-1)	-1,32497(-1)	-1,67685(-1)	-1,32315(-1)
0,7	-1,96460(-1)	-1,53540(-1)	-1,96199(-1)	-1,53801(-1)	-1,96461(-1)	-1,53539(-1)
0,8	-2,25692(-1)	-1,74308(-1)	-2,25323(-1)	-1,74677(-1)	-2,25693(-1)	-1,74306(-1)
0,9	-2,55530(-1)	-1,94470(-1)	-2,55015(-1)	-1,94985(-1)	-2,55532(-1)	-1,94468(-1)
1,0	-2,86249(-1)	-2,13751(-1)	-2,85543(-1)	-2,14457(-1)	-2,86269(-1)	-2,13740(-1)

Nas duas tabelas acima apresentou-se, respectivamente, resultados numéricos para o perfil de fluxo de calor e perfil tensão de cisalhamento. Os resultados são obtidos via utilização das condições de contorno de Maxwell e de Cercignani-Lampis para diferentes coeficientes de acomodação. Considerando-se a mistura de gases Ne-Ar, e a largura do canal  $2a = 1$ , obteve-se na maioria dos casos 2 dígitos de concordância entre os resultados obtidos através das duas condições de contorno. Observa-se, graficamente, os resultados obtidos na tabela (7.5) na figura abaixo

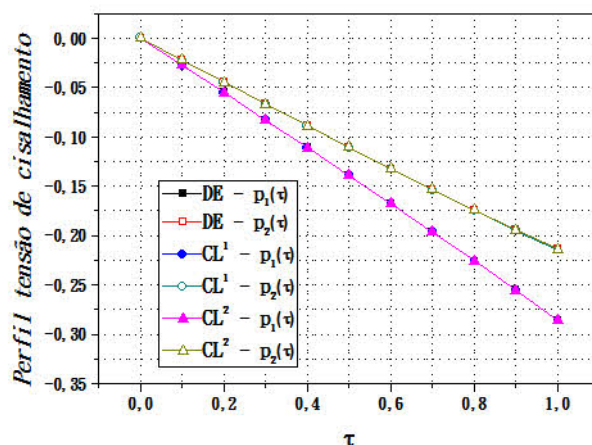


Figura 7.3: Perfil tensão de cisalhamento - Mistura Ne-Ar -  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1, 0$ ,  $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0, 5$  e  $C = 0, 5$ .

Nas tabelas (7.6)-(7.9), apresenta-se, respectivamente, resultados numéricos para o perfil de velocidade, perfil de fluxo de calor e perfil tensão de cisalhamento para a mistura de gases He-Xe, e as taxas do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor para a mistura de gases Ne-Ar, com a utilização das condições de contorno de Cercignani-Lampis e de Maxwell. Os resultados encontrados, são comparados aos resultados obtidos via equação de Boltzmann propriamente dita [27].

Tabela 7.6: Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde  $2a = 0, 1$ ,  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$  e  $C = 0, 4$ .

$\tau/a$	$DE - u_1(\tau)$	$DE - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$LBE^a - u_1(\tau)$	$LBE^a - u_2(\tau)$
0,0	-8,73853(-2)	-7,55783(-2)	-8,57079(-2)	-6,51123(-2)	-1,7426(-1)	-1,8925(-1)
0,1	-8,70981(-2)	-7,52106(-2)	-8,54552(-2)	-6,49398(-2)	-	-
0,2	-8,67507(-2)	-7,47388(-2)	-8,51324(-2)	-6,46371(-2)	-1,7257(-1)	-1,8606(-1)
0,3	-8,63395(-2)	-7,41578(-2)	-8,47360(-2)	-6,41998(-2)	-	-
0,4	-8,58593(-2)	-7,34595(-2)	-8,42609(-2)	-6,36204(-2)	-1,7017(-1)	-1,8106(-1)
0,5	-8,53028(-2)	-7,26325(-2)	-8,36992(-2)	-6,28867(-2)	-	-
0,6	-8,46593(-2)	-7,16593(-2)	-8,30389(-2)	-6,19796(-2)	-1,6692(-1)	-1,7388(-1)
0,7	-8,39122(-2)	-7,05127(-2)	-8,22616(-2)	-6,08687(-2)	-	-
0,8	-8,30327(-2)	-6,91449(-2)	-8,13344(-2)	-5,94994(-2)	-1,6246(-1)	-1,6353(-1)
0,9	-8,19593(-2)	-6,74532(-2)	-8,01874(-2)	-5,77541(-2)	-	-
1,0	-8,03999(-2)	-6,49459(-2)	-7,84867(-2)	-5,50669(-2)	-1,5509(-1)	-1,4439(-1)

$Re f^a = \text{Garcia e Siewert [27]}$

Considera-se  $\zeta_{n11} = \zeta_{n12} = 0, 01$ ,  $\zeta_{n21} = \zeta_{n22} = 0, 9$  em CL.

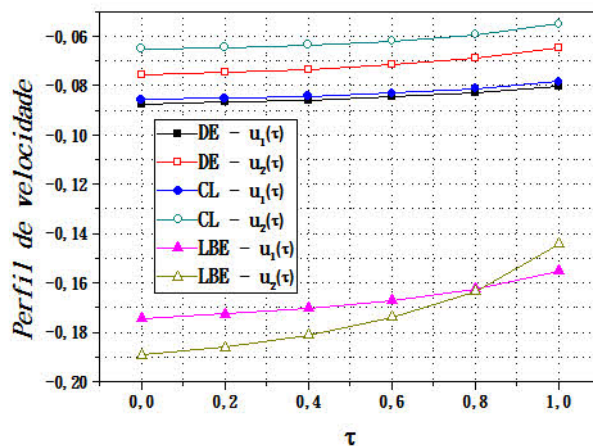


Figura 7.4: Perfil de velocidade - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$

Tabela 7.7: Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde  $2a = 0,1$ ,  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ .

$\tau/a$	$DE - q_1(\tau)$	$DE - q_2(\tau)$	$CL - q_1(\tau)$	$CL - q_2(\tau)$	$LBE^a - q_1(\tau)$	$LBE^a - q_2(\tau)$
0,0	3,17675(-2)	2,46813(-2)	2,88366(-2)	1,63753(-2)	7,4367(-2)	5,6408(-2)
0,1	3,16192(-2)	2,45109(-2)	2,87067(-2)	1,63083(-2)	-	-
0,2	3,14391(-2)	2,42910(-2)	2,85378(-2)	1,61786(-2)	7,3610(-2)	5,5124(-2)
0,3	3,12254(-2)	2,40188(-2)	2,83279(-2)	1,59842(-2)	-	-
0,4	3,09751(-2)	2,36903(-2)	2,80741(-2)	1,57210(-2)	7,2531(-2)	5,3067(-2)
0,5	3,06843(-2)	2,32995(-2)	2,77718(-2)	1,53830(-2)	-	-
0,6	3,03469(-2)	2,28376(-2)	2,74142(-2)	1,49605(-2)	7,1059(-2)	5,0049(-2)
0,7	2,99538(-2)	2,22906(-2)	2,69904(-2)	1,44380(-2)	-	-
0,8	2,94888(-2)	2,16341(-2)	2,64813(-2)	1,37878(-2)	6,9031(-2)	4,5589(-2)
0,9	2,89177(-2)	2,08154(-2)	2,58463(-2)	1,29502(-2)	-	-
1,0	2,80771(-2)	1,95824(-2)	2,48904(-2)	1,16374(-2)	6,5634(-2)	3,6907(-2)

*Ref*<sup>a</sup>=Garcia e Siewert[27]

Considera-se  $\zeta_{n11} = \zeta_{n12} = 0,01$ ,  $\zeta_{n21} = \zeta_{n22} = 0,9$  em CL.

Tabela 7.8: Perfil tensão de cisalhamento de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde  $2a = 0, 1$ ,  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$  e  $C = 0, 4$ .

$\tau/a$	$DE - p_1(\tau)$	$DE - p_2(\tau)$	$CL - p_1(\tau)$	$CL - p_2(\tau)$	$LBE^a - p_1(\tau)$	$LBE^a - p_2(\tau)$
0,0	-4,1524(-3)	-4,3370(-3)	-4,1470(-3)	-4,4123(-3)	-1,8622(-2)	2,5472(-2)
0,1	-4,8724(-3)	-5,3294(-3)	-4,8653(-3)	-5,4059(-3)	-	-
0,2	-5,5930(-3)	-6,3216(-3)	-5,5841(-3)	-6,3992(-3)	-2,5236(-2)	3,7729(-2)
0,3	-6,3141(-3)	-7,3133(-3)	-6,3036(-3)	-7,3920(-3)	-	-
0,4	-7,0360(-3)	-8,3046(-3)	-7,0238(-3)	-8,3844(-3)	-3,1881(-2)	4,9966(-2)
0,5	-7,7586(-3)	-9,2953(-3)	-7,7448(-3)	-9,3762(-3)	-	-
0,6	-8,4821(-3)	-1,02854(-2)	-8,4668(-3)	-1,03674(-2)	-3,8566(-2)	6,2176(-2)
0,7	-9,2068(-3)	-1,12749(-2)	-9,1900(-3)	-1,13578(-2)	-	-
0,8	-9,9326(-3)	-1,22635(-2)	-9,9144(-3)	-1,23473(-2)	-4,5303(-2)	7,4352(-2)
0,9	-1,06599(-2)	-1,32511(-2)	-1,06404(-2)	-1,33358(-2)	-	-
1,0	-1,13890(-2)	-1,42375(-2)	-1,13684(-2)	-1,43230(-2)	-5,2111(-2)	8,6479(-2)

*Ref*<sup>a</sup>=Garcia e Siewert[27]

Considera-se  $\zeta_{n11} = \zeta_{n12} = 0, 01$ ,  $\zeta_{n21} = \zeta_{n22} = 0, 9$  em CL.

Tabela 7.9: Taxa do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor para a mistura de gases Ne-Ar, onde  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$  e  $C = 0, 4$ .

$2a$	$DE - U_1$	$DE - U_2$	$CL - U_1$	$CL - U_2$	$LBE^a - U_1$	$LBE^a - U_2$
1,0(-2)	-3,71083	-2,43415	-2,67651	-2,01421	-7,02875	-4,57921
1,0(-1)	-2,15682	-1,66118	-2,01356	-1,61679	-3,97126	-3,34605
5,0(-1)	-1,44802	-1,42805	-1,48626	-1,48803	-2,88363	-3,26237
1,0	-1,28199	-1,31869	-1,32255	-1,48573	-2,80472	-3,50334
2,0	-1,22219	-1,50054	-1,25103	-1,54418	-3,02335	-4,02064
5,0	-1,33909	-1,16567	-1,34964	-1,80017	-3,94713	-5,45691
1,0(1)	-1,62841	-2,21709	-1,62857	-2,23778	-5,49952	-7,68822
1,0(2)	-6,79183	-9,21066	-6,77939	-9,53165	-3,27996(1)	-4,61398(1)

$2a$	$DE - Q_1$	$DE - Q_2$	$CL - Q_1$	$CL - Q_2$	$LBE^a - Q_1$	$LBE^a - Q_2$
1,0(-2)	1,43487	9,50068(-1)	7,66903(-1)	7,11751(-1)	3,05198	1,90616
1,0(-1)	6,93583(-1)	5,23984(-1)	5,02453(-1)	4,74454(-1)	1,31567	1,01481
5,0(-1)	3,32560(-1)	2,98548(-1)	3,09865(-1)	3,09370(-1)	5,15113(-1)	4,87750(-1)
1,0	2,21373(-1)	2,14669(-1)	2,26805(-1)	2,32264(-1)	3,07392(-1)	3,07713(-1)
2,0	1,38185(-1)	1,42355(-1)	1,51427(-1)	1,58114(-1)	1,72501(-2)	1,77501(-1)
5,0	6,73527(-2)	7,24110(-2)	7,59613(-2)	8,08987(-2)	7,46936(-2)	7,77501(-2)
1,0(1)	3,67508(-2)	3,99046(-2)	4,09830(-2)	4,41341(-2)	3,82931(-2)	3,99837(-2)
1,0(2)	3,98571(-3)	4,35104(-3)	4,25095(-3)	4,67708(-3)	3,90604(-3)	4,09657(-3)

*Ref*<sup>a</sup>=Garcia e Siewert[27]

Considera-se  $\zeta_{n11} = \zeta_{n12} = \zeta_{n21} = \zeta_{n22} = 0, 5$  em CL.

Da tabela acima, pode-se verificar que a diferença média entre os resultados obtidos através desse trabalho, e os obtidos via equação de Boltzmann propriamente dita [27], são de

- 51,2% e 57,6%, respectivamente, para a taxa do fluxo de partículas para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno difuso-especular (Maxwell). Obs: desconsiderando-se os resultados obtidos no canal  $2a = 1, 0(-2)$ .

- 55,2% e 56%, respectivamente, para a taxa do fluxo de partículas para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno generalizadas (Cecignani-Lampis). Obs: desconsiderando-se os resultados obtidos no canal  $2a = 1,0(-2)$ .

- 45% e 44%, respectivamente, para a taxa do fluxo de calor para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno difuso-especular (Maxwell).

- 60% e 49%, respectivamente, para a taxa do fluxo de calor para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno generalizadas (Cecignani-Lampis).

Observa-se graficamente o comportamento das soluções obtidas na tabela acima, nas figuras que seguem abaixo

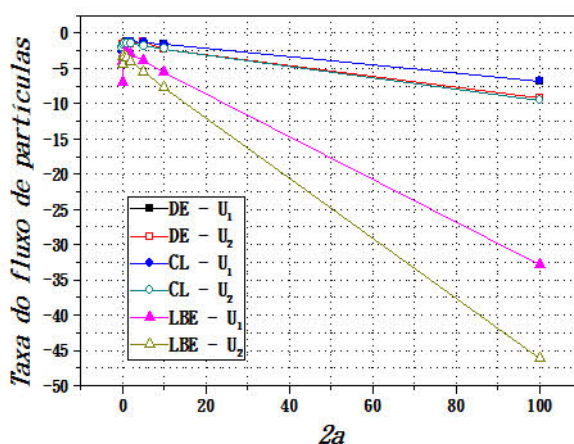


Figura 7.5: Taxa do fluxo de partículas - Mistura Ne-Ar -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ .

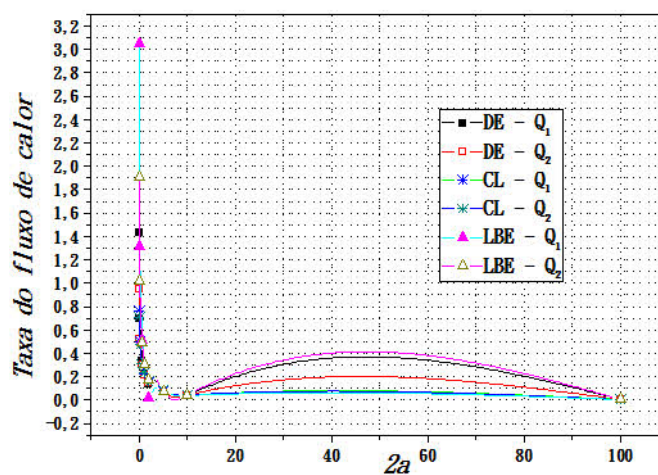


Figura 7.6: Taxa do fluxo de calor - Mistura Ne-Ar -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ .

## 7.2 Creep-Térmico

Os resultados numéricos para as grandezas macroscópicas desejadas para o problema Creep-Térmico são apresentados nas tabelas (7.10)-(7.15).

Nas tabelas (7.10) e (7.11) apresenta-se resultados numéricos para o perfil de velocidade com 3 diferentes concentrações molares. Os resultados são obtidos via utilização das condições de contorno de Maxwell e de Cercignani-Lampis. Considera-se a mistura de gases Ne-Ar, e a largura do canal  $2a = 1$ . Obteve-se boa concordância de resultados ao comparar-se as duas tabelas.

Tabela 7.10: Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde  $2a = 1, 0$ ,  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$ .

$\tau/a$	$C = 0, 1$		$C = 0, 4$		$C = 0, 9$	
	$DE - u_1(\tau)$	$DE - u_2(\tau)$	$DE - u_1(\tau)$	$DE - u_2(\tau)$	$DE - u_1(\tau)$	$DE - u_2(\tau)$
0,0	2,85538(-1)	2,44893(-1)	2,82459(-1)	2,40344(-1)	2,76347(-1)	2,32168(-1)
0,1	2,83064(-1)	2,42309(-1)	2,79917(-1)	2,37656(-1)	2,73615(-1)	2,29164(-1)
0,2	2,79713(-1)	2,38644(-1)	2,76513(-1)	2,33932(-1)	2,70044(-1)	2,25219(-1)
0,3	2,75417(-1)	2,33821(-1)	2,72179(-1)	2,29099(-1)	2,65567(-1)	2,20259(-1)
0,4	2,70085(-1)	2,27728(-1)	2,66822(-1)	2,23043(-1)	2,60086(-1)	2,14172(-1)
0,5	2,63585(-1)	2,20200(-1)	2,60308(-1)	2,15598(-1)	2,53463(-1)	2,06789(-1)
0,6	2,55722(-1)	2,10985(-1)	2,52438(-1)	2,06510(-1)	2,45490(-1)	1,97851(-1)
0,7	2,46191(-1)	1,99682(-1)	2,42901(-1)	1,95372(-1)	2,35842(-1)	1,86939(-1)
0,8	2,34454(-1)	1,85580(-1)	2,31147(-1)	1,81462(-1)	2,23939(-1)	1,73301(-1)
0,9	2,19333(-1)	1,67115(-1)	2,15973(-1)	1,63186(-1)	2,08509(-1)	1,55264(-1)
1,0	1,94849(-1)	1,36377(-1)	1,91267(-1)	1,32485(-1)	1,83069(-1)	1,24308(-1)

Tabela 7.11: Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde  $2a = 1, 0$ ,  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$ .

$\tau/a$	$C = 0, 1$		$C = 0, 4$		$C = 0, 9$	
	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$
0,0	2,71316(-1)	2,31636(-1)	2,67792(-1)	2,26583(-1)	2,61579(-1)	2,18198(-1)
0,1	2,67971(-1)	2,29150(-1)	2,64361(-1)	2,23960(-1)	2,57888(-1)	2,15159(-1)
0,2	2,63512(-1)	2,25370(-1)	2,59833(-1)	2,20093(-1)	2,53127(-1)	2,10971(-1)
0,3	2,57858(-1)	2,20222(-1)	2,54127(-1)	2,14910(-1)	2,47215(-1)	2,05566(-1)
0,4	2,50892(-1)	2,13587(-1)	2,47127(-1)	2,08294(-1)	2,40033(-1)	1,98830(-1)
0,5	2,42444(-1)	2,05286(-1)	2,38661(-1)	2,00067(-1)	2,31411(-1)	1,90590(-1)
0,6	2,32264(-1)	1,95043(-1)	2,28477(-1)	1,89954(-1)	2,21090(-1)	1,80570(-1)
0,7	2,19958(-1)	1,82414(-1)	2,16177(-1)	1,77510(-1)	2,08666(-1)	1,68329(-1)
0,8	2,04831(-1)	1,66608(-1)	2,01062(-1)	1,61941(-1)	1,93423(-1)	1,53064(-1)
0,9	1,85379(-1)	1,45885(-1)	1,81611(-1)	1,41500(-1)	1,73799(-1)	1,32999(-1)
1,0	1,54113(-1)	1,11521(-1)	1,50254(-1)	1,07403(-1)	1,41986(-1)	0,99112(-1)

Considera-se  $\zeta_{n11} = 0, 1$ ,  $\zeta_{n12} = 0, 5$ ,  $\zeta_{n21} = 0, 3$ ,  $\zeta_{n22} = 0, 7$  em CL.

Através das duas tabelas acima, observa-se que a espécie leve da mistura possui maior velocidade em relação a espécie mais pesada, a partir que a concentração aumenta, as velocidades das duas espécies tendem a diminuir. As duas espécies constituintes da mistura apresentam maior velocidade nos resultados obtidos via condição de contorno difuso especular que os resultados obtidos via condições de contorno de Cercignani-Lampis. Nas figuras abaixo, mostra-se o comportamento das soluções obtidas nas tabelas (7.10) e (7.11), respectivamente

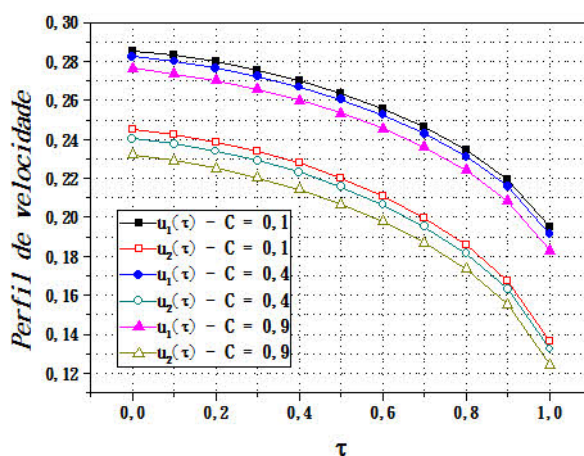


Figura 7.7: Perfil de velocidade - Mistura Ne-Ar - Condições de contorno de Maxwell -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$ .

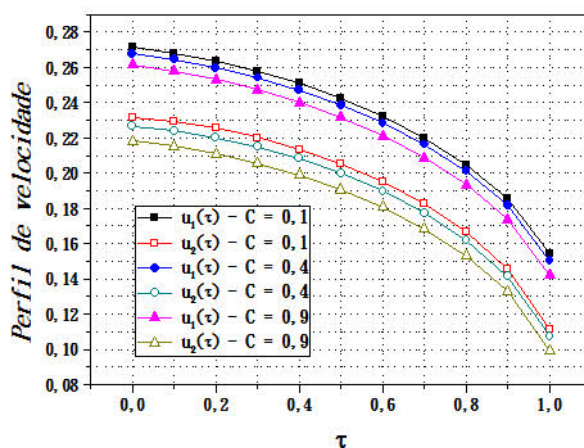


Figura 7.8: Perfil de velocidade - Mistura Ne-Ar - Condições de contorno de Cercignani-Lampis -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$ .



Tabela 7.12: Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde  $2a = 10,0$ ,  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ ,  $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$  e  $C = 0,5$ .

$\tau/a$	$DE^a - q_1(\tau)$	$DE^a - q_2(\tau)$	$CL - q_1(\tau)$	$CL - q_2(\tau)$
			$\zeta_{n1} = 0,1$	$\zeta_{n1} = 0,1$
			$\zeta_{n2} = 0,9$	$\zeta_{n2} = 0,9$
0,0	-1,98146	-1,84230	-1,98146	-1,84230
0,1	-1,97945	-1,84067	-1,97945	-1,84067
0,2	-1,97316	-1,83555	-1,97316	-1,83555
0,3	-1,96184	-1,82617	-1,96184	-1,82617
0,4	-1,94400	-1,81105	-1,94400	-1,81105
0,5	-1,91702	-1,78752	-1,91702	-1,78752
0,6	-1,87632	-1,75089	-1,87632	-1,75089
0,7	-1,81340	-1,69236	-1,81340	-1,69236
0,8	-1,71073	-1,59359	-1,71073	-1,59359
0,9	-1,52359	-1,40750	-1,52359	-1,40750
1,0	-9,90282(-1)	-8,54232(-1)	-9,90282(-1)	-8,54232(-1)

*Ref*<sup>a</sup>=Siewert e Valougeorgis[79].

Observa-se na tabela acima, que os resultados encontrados para perfil de fluxo de calor aparentemente são iguais para as duas condições de contorno. Mas, através de uma reprodução feita do trabalho publicado por Siewert e Valougeorgis [79], conclui-se que há divergência entre os resultados obtidos via as duas condições de contorno a partir da décima quarta casa decimal.

Nas tabelas (7.13) e (7.14) apresenta-se, respectivamente, resultados para o perfil de fluxo de calor considerando-se a mistura He-Xe, e perfil tensão de cisalhamento considerando-se a mistura He-Ar para o caso baseado nas condições de contorno de Cercignani-Lampis e de Maxwell. Para diferentes coeficientes de acomodação normal e considerando-se  $2a = 1$ , para o perfil de fluxo de calor, obteve-se na maioria dos casos 3 dígitos de concordância entre os resultados obtidos através das duas condições de contorno.

Tabela 7.13: Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde  $2a = 10,0$ ,  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ ,  $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$  e  $C = 0,5$ .

$\tau/a$	$DE - q_1(\tau)$	$DE - q_2(\tau)$	$CL - q_1(\tau)$ $\zeta_{n1} = 0,1$ $\zeta_{n2} = 0,9$	$CL - q_2(\tau)$ $\zeta_{n1} = 0,1$ $\zeta_{n2} = 0,9$	$CL - q_1(\tau)$ $\zeta_{n1} = 0,4$ $\zeta_{n2} = 0,6$	$CL - q_2(\tau)$ $\zeta_{n1} = 0,4$ $\zeta_{n2} = 0,6$
0,0	-1,98143	-1,85910	-1,98150	-1,84502	-1,98145	-1,84764
0,1	-1,97943	-1,85819	-1,97949	-1,84353	-1,97944	-1,84623
0,2	-1,97317	-1,85533	-1,97321	-1,83883	-1,97316	-1,84178
0,3	-1,96191	-1,85008	-1,96190	-1,83024	-1,96186	-1,83362
0,4	-1,94415	-1,84162	-1,94407	-1,81639	-1,94404	-1,82044
0,5	-1,91730	-1,82847	-1,91712	-1,79490	-1,91711	-1,79992
0,6	-1,87679	-1,80805	-1,87645	-1,76152	-1,87647	-1,76793
0,7	-1,81413	-1,77557	-1,81358	-1,70833	-1,81363	-1,71678
0,8	-1,71181	-1,72125	-1,71096	-1,61892	-1,71106	-1,63045
0,9	-1,52506	-1,62034	-1,52386	-1,45130	-1,52403	-1,46790
1,0	-9,91468(-1)	-1,32656	-9,90398(-1)	-9,57121(-1)	-9,90563(-1)	-9,86003(-1)

Observa-se graficamente o comportamento das soluções obtidas na tabela acima na figura que segue

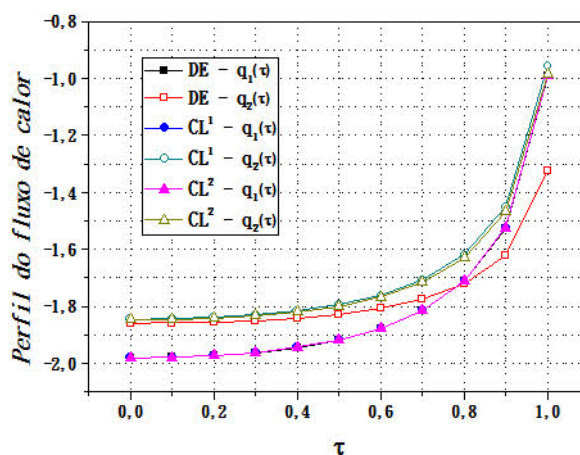


Figura 7.9: Perfil do fluxo de calor - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = \zeta_{12} = 1,0$ ,  $\zeta_{21} = \zeta_{22} = 0,5$  e  $C = 0,5$ .

Tabela 7.14: Perfil de tensão de cisalhamento de cada espécie constituinte da mistura He-Ar, onde  $2a = 1,0$ ,  $\zeta_{11} = 1,0$ ,  $\zeta_{12} = 0,8$ ,  $\zeta_{21} = 0,6$ ,  $\zeta_{22} = 0,4$  e  $C = 0,6$ .

$\tau/a$	$DE - p_1(\tau)$	$DE - p_2(\tau)$	$CL - p_1(\tau)$	$CL - p_2(\tau)$	$CL - p_1(\tau)$	$CL - p_2(\tau)$
			$\zeta_n = \zeta_t$	$\zeta_n = \zeta_t$	$\zeta_{n11} = \zeta_{n12} = 0,5$	$\zeta_{n11} = \zeta_{n12} = 0,5$
			$\zeta_n = \zeta_t$	$\zeta_n = \zeta_t$	$\zeta_{n21} = \zeta_{n22} = 0,5$	$\zeta_{n21} = \zeta_{n22} = 0,5$
0,0	1,62126(-3)	1,64755(-3)	-1,79956(-4)	1,90043(-3)	5,40617(-4)	1,03509(-3)
0,1	1,96956(-3)	1,12509(-3)	5,09731(-5)	1,55404(-3)	7,57295(-4)	7,10072(-4)
0,2	2,31376(-3)	6,08790(-3)	2,87321(-4)	1,19952(-3)	9,74033(-4)	3,84964(-4)
0,3	2,66165(-3)	8,69679(-5)	5,33992(-4)	8,29510(-4)	1,19506(-3)	5,34227(-5)
0,4	3,92121(-3)	-4,52384(-4)	7,96171(-4)	4,36242(-4)	1,42470(-3)	-2,91041(-4)
0,5	3,40100(-3)	-1,02206(-3)	1,07949(-3)	1,12687(-5)	1,66749(-3)	-6,55222(-4)
0,6	3,81047(-3)	-1,63626(-3)	1,39026(-3)	-4,54887(-4)	1,92830(-3)	-1,04644(-3)
0,7	4,26067(-3)	-2,31157(-3)	1,73588(-3)	-9,73317(-4)	2,21260(-3)	-1,47289(-3)
0,8	4,76545(-3)	-3,06873(-3)	2,12556(-3)	-1,55784(-3)	2,52685(-3)	-1,94426(-3)
0,9	5,34423(-3)	-3,93690(-3)	2,57209(-3)	-2,22764(-3)	2,87955(-3)	-2,47331(-3)
1,0	6,03384(-3)	-4,97133(-3)	3,09947(-3)	-3,01871(-3)	3,28573(-3)	-3,08259(-3)

A figura abaixo descreve graficamente o comportamento das soluções obtidas na tabela (7.14).

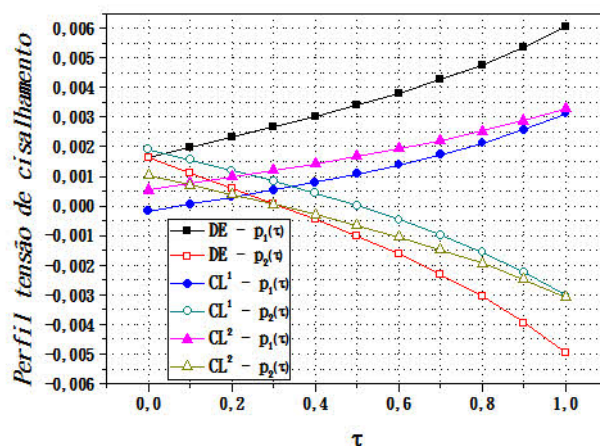


Figura 7.10: Perfil tensão de cisalhamento - Mistura He-Ar -  $\zeta_{11} = 1,0$ ,  $\zeta_{12} = 0,8$ ,  $\zeta_{21} = 0,6$ ,  $\zeta_{22} = 0,4$  e  $C = 0,6$ .

Na tabela (7.15) apresenta-se, resultados numéricos para as taxas do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor para a mistura de gases He-Xe, com a utilização das condições de contorno de Cercignani-Lampis e de Maxwell. Os resultados encontrados, são comparados aos resultados obtidos via equação de Boltzmann propriamente dita [27].

Tabela 7.15: Taxa do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor para a mistura de gases He-Xe, onde  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$  e  $C = 0, 4$ .

$2a$	$DE - U_1$	$DE - U_2$	$CL - U_1$	$CL - U_2$	$LBE^a - U_1$	$LBE^a - U_2$
1,0(-2)	9,26464(-1)	8,85374(-1)	6,14010(-1)	5,39299(-1)	3,47992	1,63717
1,0(-1)	4,99137(-1)	4,48215(-1)	4,07257(-1)	3,31870(-1)	1,51411	8,53282(-1)
5,0(-1)	2,74709(-1)	2,28850(-1)	2,55347(-1)	2,01381(-1)	5,71005(-1)	3,90743(-1)
1,0	1,90025(-1)	1,61060(-1)	1,84472(-1)	1,51763(-1)	3,30863(-1)	2,44038(-1)
2,0	1,20109(-1)	1,07472(-1)	1,19927(-1)	1,07444(-1)	1,80382(-1)	1,40608(-1)
5,0	5,78101(-2)	5,66838(-2)	5,86144(-2)	6,02808(-2)	7,61935(-2)	6,17139(-2)
1,0(1)	3,10746(-2)	3,22238(-2)	3,16802(-2)	3,54436(-2)	3,87787(-2)	3,17730(-2)
1,0(2)	3,23390(-3)	3,66205(-3)	3,41737(-3)	4,19532(-3)	3,93853(-3)	3,25543(-3)

$2a$	$DE - Q_1$	$DE - Q_2$	$CL - Q_1$	$CL - Q_2$	$LBE^a - Q_1$	$LBE^a - Q_2$
1,0(-2)	36,63349	23,73096	-3,43743	-2,82076	-1,59823(1)	-8,73594
1,0(-1)	-6,51362(-2)	-4,64056(-3)	-2,23693	-1,77053	-6,79083	-4,41149
5,0(-1)	-1,14766	-8,92056(-1)	-1,25527	-1,02026	-2,45191	-1,85972
1,0	-8,36586(-1)	-6,96045(-1)	-8,56822(-1)	-7,20908(-1)	-1,39410	-1,10712
2,0	-5,27555(-1)	-4,64797(-1)	-5,31637(-1)	-4,66610(-1)	-7,49405(-1)	-6,11321(-1)
5,0	-2,48706(-1)	-2,29835(-1)	-2,49396(-1)	-2,29319(-1)	-3,13429(-1)	-2,59709(-1)
1,0(1)	-1,31914(-1)	-1,24002(-1)	-1,32071(-1)	-1,23830(-1)	-1,59023(-1)	-1,32410(-1)
1,0(2)	-1,39037(-2)	-1,32528(-2)	-1,39052(-2)	-1,32511(-2)	-1,61100(-2)	-1,34710(-2)

*Ref*<sup>a</sup>=Garcia e Siewert [27]

Considera-se  $\zeta_{n11} = \zeta_{n12} = \zeta_{n21} = \zeta_{n22} = 0, 5$  em CL.

Da tabela acima, pode-se verificar que a diferença média entre os resultados obtidos através desse trabalho, e os obtidos via equação de Boltzmann propriamente dita [27], são de

- 66% e 42, 8%, respectivamente, para a taxa do fluxo de partículas para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno difuso-especular (Maxwell).
- 73% e 57, 4%, respectivamente, para a taxa do fluxo de partículas para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno generalizadas (Cecignani-Lampis).
- 75% e 71%, respectivamente, para a taxa do fluxo de calor para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno difuso-especular (Maxwell). Obs: desconsiderando-se os resultados obtidos no canal  $2a = 1, 0(-2)$ .
- 68, 7% e 58, 2%, respectivamente, para a taxa do fluxo de calor para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno generalizadas (Cecignani-Lampis).

Observa-se graficamente o comportamento das soluções obtidas na tabela acima, nas figuras que seguem abaixo. Nota-se que a partir que o canal aumenta, os resultados numéricos obtidos para cada espécie nos 3 casos (DE , CL e LBE), tendem ao mesmo valor.

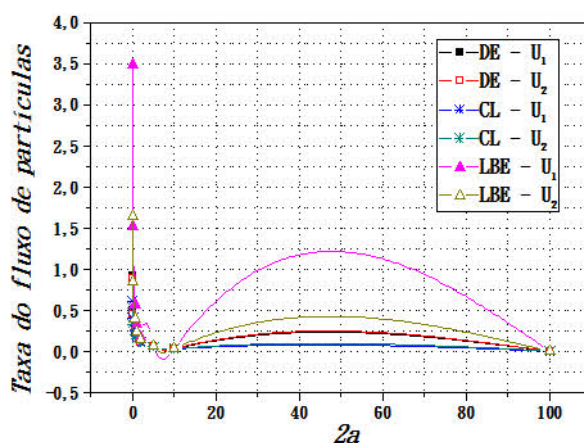


Figura 7.11: Taxa do fluxo de partículas - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ .

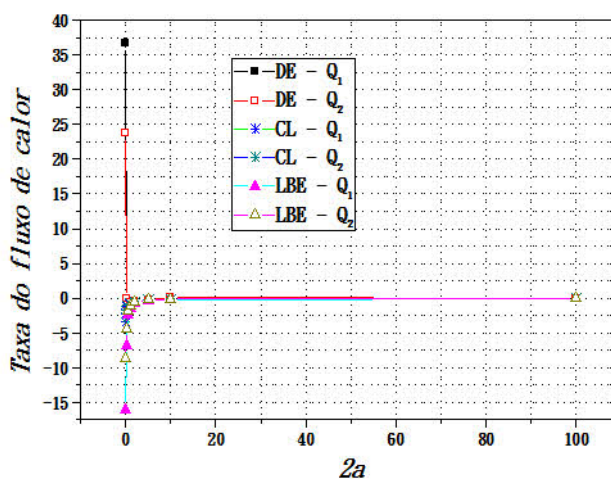


Figura 7.12: Taxa do fluxo de calor - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ .

## 7.3 Problema Difuso

Os resultados numéricos para as grandezas macroscópicas desejadas para o problema difuso são apresentados nas tabelas (7.16)-(7.21).

Nas tabelas (7.16), (7.17) e (7.18) apresenta-se resultados numéricos para o perfil de velocidade com 3 diferentes concentrações molares. Os resultados são obtidos via utilização das condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis). Considera-se as 3 misturas de gases nobres, Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, e a largura do canal  $2a = 1$ .

Tabela 7.16: Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne-Ar, onde  $2a = 1, 0$ ,  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$ .

	$C = 0, 1$		$C = 0, 4$		$C = 0, 9$	
$\tau/a$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$
0,0	-5,16902(-1)	3,73231(-2)	-3,49415(-1)	1,51689(-1)	-6,02764(-2)	3,55218(-1)
0,1	-5,13137(-1)	3,70537(-2)	-3,46819(-1)	1,50570(-1)	-5,98056(-2)	3,52461(-1)
0,2	-5,08363(-1)	3,66616(-2)	-3,43545(-1)	1,48953(-1)	-5,92199(-2)	3,48549(-1)
0,3	-5,02482(-1)	3,61366(-2)	-3,39524(-1)	1,46795(-1)	-5,85071(-2)	3,43374(-1)
0,4	-4,95353(-1)	3,54634(-2)	-3,34657(-1)	1,44032(-1)	-5,76488(-2)	3,36775(-1)
0,5	-4,86773(-1)	3,46199(-2)	-3,28806(-1)	1,40572(-1)	-5,66186(-2)	3,28515(-1)
0,6	-4,76445(-1)	3,35734(-2)	-3,21760(-1)	1,36277(-1)	-5,53773(-2)	3,18241(-1)
0,7	-4,63903(-1)	3,22724(-2)	-3,13195(-1)	1,30930(-1)	-5,38633(-2)	3,05394(-1)
0,8	-4,48341(-1)	3,06277(-2)	-3,02548(-1)	1,24157(-1)	-5,19699(-2)	2,89006(-1)
0,9	-4,28042(-1)	2,84489(-2)	-2,88619(-1)	1,15156(-1)	-4,94694(-2)	2,67009(-1)
1,0	-3,94843(-1)	2,48283(-2)	-2,65707(-1)	1,00112(-1)	-4,52834(-2)	2,29589(-1)

Considera-se  $\zeta_{n11} = 0, 1$ ,  $\zeta_{n12} = 0, 5$ ,  $\zeta_{n21} = 0, 3$ ,  $\zeta_{n22} = 0, 7$  em CL.

Tabela 7.17: Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura He-Ar, onde  $2a = 1, 0$ ,  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$ .

	$C = 0, 1$		$C = 0, 4$		$C = 0, 9$	
$\tau/a$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$
0,0	-5,29484(-1)	3,71837(-2)	-3,84390(-1)	1,62081(-1)	-8,02325(-2)	4,58071(-1)
0,1	-5,25722(-1)	3,69279(-2)	-3,81579(-1)	1,60929(-1)	-7,95713(-2)	4,54453(-1)
0,2	-5,20953(-1)	3,65541(-2)	-3,78036(-1)	1,59270(-1)	-7,87504(-2)	4,49419(-1)
0,3	-5,15078(-1)	3,60524(-2)	-3,73692(-1)	1,57063(-1)	-7,77560(-2)	4,42863(-1)
0,4	-5,07960(-1)	3,54083(-2)	-3,68449(-1)	1,54247(-1)	-7,65682(-2)	4,34620(-1)
0,5	-4,99399(-1)	3,46008(-2)	-3,62167(-1)	1,50734(-1)	-7,51583(-2)	4,24450(-1)
0,6	-4,89102(-1)	3,35982(-2)	-3,54638(-1)	1,46390(-1)	-7,34836(-2)	4,11991(-1)
0,7	-4,76608(-1)	3,23512(-2)	-3,45538(-1)	1,41008(-1)	-7,14772(-2)	3,96674(-1)
0,8	-4,61120(-1)	3,07737(-2)	-3,34302(-1)	1,34222(-1)	-6,90226(-2)	3,77501(-1)
0,9	-4,40928(-1)	2,86815(-2)	-3,19724(-1)	1,25256(-1)	-6,58699(-2)	3,52327(-1)
1,0	-4,07882(-1)	2,51930(-2)	-2,96033(-1)	1,10382(-1)	-6,08146(-2)	3,10834(-1)

Considera-se  $\zeta_{n11} = 0, 1$ ,  $\zeta_{n12} = 0, 5$ ,  $\zeta_{n21} = 0, 3$ ,  $\zeta_{n22} = 0, 7$  em CL.

Tabela 7.18: Perfil de velocidade de cada espécie constituinte da mistura He-Xe, onde  $2a = 1, 0$ ,  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$ .

$\tau/a$	$C = 0, 1$		$C = 0, 4$		$C = 0, 9$	
	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$	$CL - u_1(\tau)$	$CL - u_2(\tau)$
0,0	-5,99522(-1)	4,21949(-2)	-4,35995(-1)	1,83976(-1)	-9,33163(-2)	5,32750(-1)
0,1	-5,95366(-1)	4,18811(-2)	-4,32935(-1)	1,82602(-1)	-9,25895(-2)	5,28671(-1)
0,2	-5,90118(-1)	4,14311(-2)	-4,29088(-1)	1,80651(-1)	-9,16873(-2)	5,23024(-1)
0,3	-5,83681(-1)	4,08348(-2)	-4,24383(-1)	1,78083(-1)	-9,05962(-2)	5,15700(-1)
0,4	-5,75913(-1)	4,00771(-2)	-4,18725(-1)	1,74833(-1)	-8,92962(-2)	5,06538(-1)
0,5	-5,66613(-1)	3,91359(-2)	-4,11971(-1)	1,70812(-1)	-8,77585(-2)	4,95297(-1)
0,6	-5,55480(-1)	3,79783(-2)	-4,03913(-1)	1,65881(-1)	-8,59402(-2)	4,81612(-1)
0,7	-5,42046(-1)	3,65523(-2)	-3,94223(-1)	1,59825(-1)	-8,37742(-2)	4,64911(-1)
0,8	-5,25495(-1)	3,47671(-2)	-3,82331(-1)	1,52268(-1)	-8,11432(-2)	4,44189(-1)
0,9	-5,04080(-1)	3,24275(-2)	-3,67019(-1)	1,42396(-1)	-7,77953(-2)	4,17278(-1)
1,0	-4,69432(-1)	2,85895(-2)	-3,42439(-1)	1,26291(-1)	-7,25144(-2)	3,73732(-1)

Considera-se  $\zeta_{n11} = 0, 1$ ,  $\zeta_{n12} = 0, 5$ ,  $\zeta_{n21} = 0, 3$ ,  $\zeta_{n22} = 0, 7$  em CL.

Dos dados apresentados nas três tabelas citadas acima, observa-se que as velocidades das espécies constituintes de cada mistura causada pelo gradiente de densidade possuem direções opostas. Para as três misturas consideradas no presente trabalho, quando  $C = 0.1$  a espécie leve possui maior velocidade. À medida que a concentração  $C$  aumenta, a velocidade da espécie leve tende a diminuir enquanto que a velocidade da espécie pesada tende a aumentar.

As figuras (7.13), (7.14) e (7.15), respectivamente, representam graficamente os resultados numéricos em modulo para o perfil de velocidade das tabelas (7.16), (7.17) e (7.18).

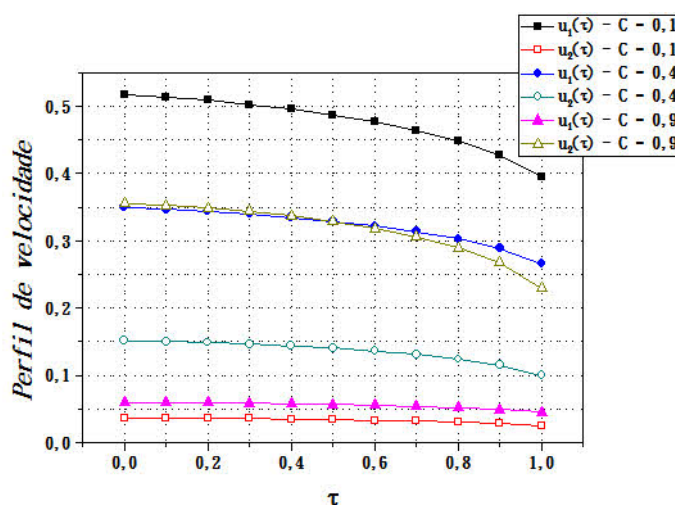


Figura 7.13: Perfil de velocidade - Mistura Ne-Ar -  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$ .

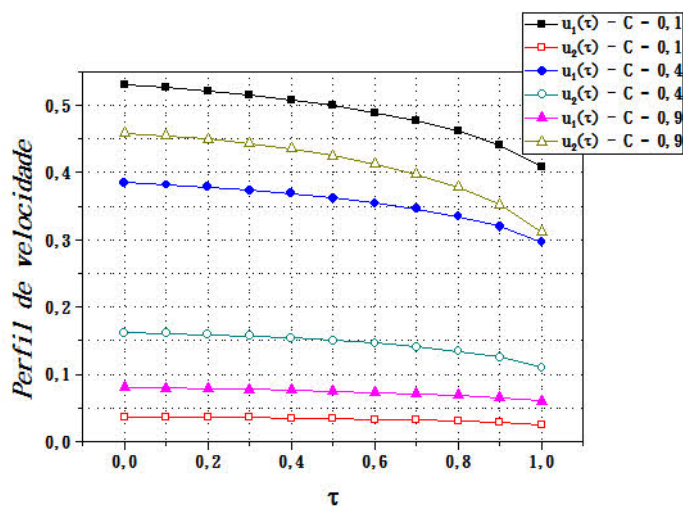


Figura 7.14: Perfil de velocidade - Mistura He-Ar -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$ .

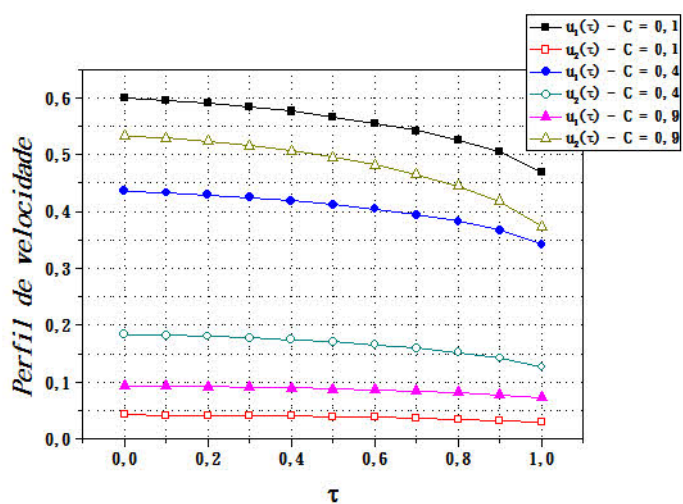


Figura 7.15: Perfil de velocidade - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$ .

Na tabela (7.19) apresenta-se, resultados numéricos para o perfil do fluxo de calor para as três misturas de gases, Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, com a utilização das condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis) para diferentes coeficientes de acomodação.



Tabela 7.19: Perfil do fluxo de calor de cada espécie constituinte das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe. Considera-se  $2a = 1,0$ ,  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,5$ .

$\tau/a$	Ne-Ar		He-Ar		He-Xe	
	$CL - q_1(\tau)$	$CL - q_2(\tau)$	$CL - q_1(\tau)$	$CL - q_2(\tau)$	$CL - q_1(\tau)$	$CL - q_2(\tau)$
0,0	7,69170(-2)	-3,06132(-2)	1,06413(-1)	-2,72923(-2)	1,23166(-1)	-3,58664(-2)
0,1	7,61157(-2)	-3,05586(-2)	1,05247(-1)	-2,72228(-2)	1,21808(-1)	-3,56512(-2)
0,2	7,50359(-2)	-3,03657(-2)	1,03689(-1)	-2,70124(-2)	1,20009(-1)	-3,52330(-2)
0,3	7,36461(-2)	-3,00124(-2)	1,01702(-1)	-2,66395(-2)	1,17730(-1)	-3,45881(-2)
0,4	7,18989(-2)	-2,94638(-2)	9,92304(-2)	-2,60705(-2)	1,14916(-1)	-3,36803(-2)
0,5	6,97243(-2)	-2,86667(-2)	9,61945(-2)	-2,52548(-2)	1,11482(-1)	-3,24554(-2)
0,6	6,70166(-2)	-2,75388(-2)	9,24724(-2)	-2,41151(-2)	1,07305(-1)	-3,08306(-2)
0,7	6,36062(-2)	-2,59456(-2)	8,78715(-2)	-2,25265(-2)	1,02187(-1)	-2,86736(-2)
0,8	5,91926(-2)	-2,36443(-2)	8,20519(-2)	-2,02665(-2)	9,57804(-2)	-2,57497(-2)
0,9	5,31184(-2)	-2,00985(-2)	7,42757(-2)	-1,68467(-2)	8,73316(-2)	-2,15467(-2)
1,0	4,21636(-2)	-1,26599(-2)	6,09385(-2)	-9,87924(-3)	7,31752(-2)	-1,35589(-2)

Considera-se  $\zeta_{n11} = 0,1$ ,  $\zeta_{n12} = 0,5$ ,  $\zeta_{n21} = 0,3$ ,  $\zeta_{n22} = 0,7$  em CL.

A figura abaixo ilustra graficamente os resultados obtidos para o perfil do fluxo de calor para as três misturas gasosas, Ne-Ar, He-Ar e He-Xe obtidos através das condições de contorno de Maxwell e de Cercignani-Lampis.

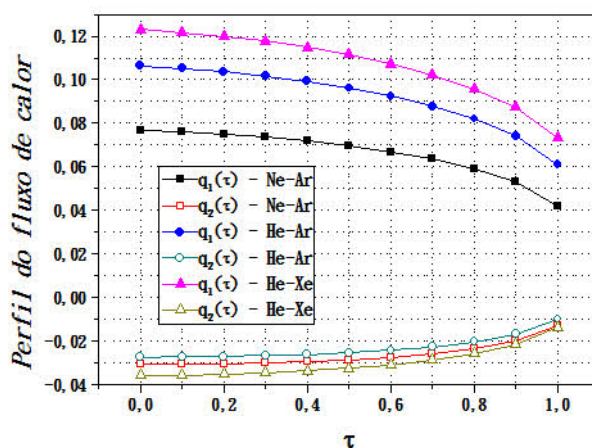


Figura 7.16: Perfil fluxo de calor - Mistura Ne-Ar, He-Ar e He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,5$ .

Nas tabela (7.20) apresenta-se resultados numéricos para o perfil tensão de cisalhamento. Os resultados são obtidos via utilização das condições de contorno de Maxwell e de Cercignani-Lampis para diferentes coeficientes de acomodação. Considerando-se a mistura de gases Ne-Ar, e a largura do canal  $2a = 1$ , obteve-se na maioria dos casos 2 dígitos de concordância entre os resultados obtidos via as duas condições de cotorno.

Tabela 7.20: Perfil tensão de cisalhamento de cada espécie constituinte das misturas Ne-Ar, onde  $2a = 1,0$ ,  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ .

$\tau/a$	$DE - p_1(\tau)$	$DE - p_2(\tau)$	$CL - p_1(\tau)$	$CL - p_2(\tau)$	$CL - p_1(\tau)$	$CL - p_2(\tau)$
			$\zeta_{n1} = 0,01$	$\zeta_{n1} = 0,01$	$\zeta_{n1} = 0,9$	$\zeta_{n1} = 0,9$
			$\zeta_{n2} = 0,01$	$\zeta_{n2} = 0,01$	$\zeta_{n2} = 0,9$	$\zeta_{n2} = 0,9$
0,0	-1,58075(-2)	6,13253(-3)	-1,57951(-2)	6,12827(-3)	-1,69982(-2)	6,78817(-3)
0,1	-1,92096(-2)	8,40064(-3)	-1,91928(-2)	8,39340(-3)	-2,04024(-2)	9,05763(-3)
0,2	-2,27087(-2)	1,07334(-2)	-2,26870(-2)	1,07228(-2)	-2,38981(-2)	1,13881(-2)
0,3	-2,63307(-2)	1,31481(-2)	-2,63035(-2)	1,31338(-2)	-2,75138(-2)	1,37985(-2)
0,4	-3,01045(-2)	1,56639(-2)	-3,00709(-2)	1,56455(-2)	-3,12808(-2)	1,63099(-2)
0,5	-3,40629(-2)	1,83028(-2)	-3,40220(-2)	1,82795(-2)	-3,52347(-2)	1,89458(-2)
0,6	-3,82449(-2)	2,10908(-2)	-3,81954(-2)	2,10618(-2)	-3,94171(-2)	2,17341(-2)
0,7	-4,26982(-2)	2,40597(-2)	-4,26385(-2)	2,40239(-2)	-4,38793(-2)	2,47088(-2)
0,8	-4,74855(-2)	2,72512(-2)	-4,74136(-2)	2,72072(-2)	-4,86880(-2)	2,79147(-2)
0,9	-5,26976(-2)	3,07260(-2)	-5,26105(-2)	3,06719(-2)	-5,39404(-2)	3,14163(-2)
1,0	-5,85081(-2)	3,45996(-2)	-5,84013(-2)	3,45324(-2)	-5,98222(-2)	3,53375(-2)

Observa-se o comportamento das soluções graficamente na figura abaixo.

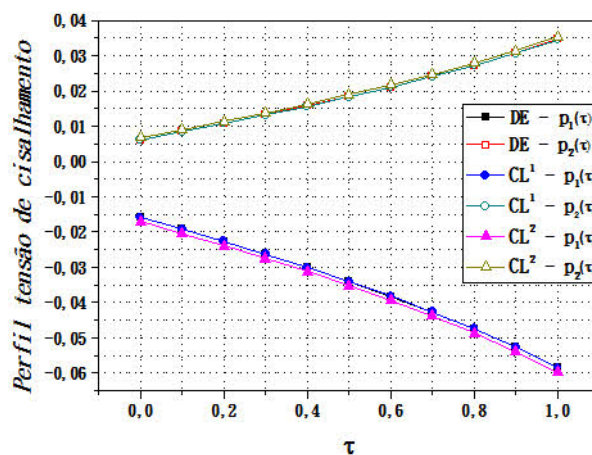


Figura 7.17: Perfil tensão de cisalhamento - Mistura Ne-Ar -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ .

Na tabela (7.21) apresenta-se, resultados numéricos para as taxas do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor para a mistura de gases He-Xe, com a utilização das condições de contorno de Cercignani-Lampis e de Maxwell. Os resultados encontrados, são comparados aos resultados obtidos via equação de Boltzmann propriamente dita [27].

Tabela 7.21: Taxa do fluxo de partículas e taxa do fluxo de calor para a mistura de gases He-Xe, onde  $\zeta_{11} = 0, 2$ ,  $\zeta_{12} = 0, 6$ ,  $\zeta_{21} = 0, 4$ ,  $\zeta_{22} = 0, 8$  e  $C = 0, 4$ .

$2a$	$DE - U_1$	$DE - U_2$	$CL - U_1$	$CL - U_2$	$LBE^a - U_1$	$LBE^a - U_2$
1,0(-2)	-1,89400	7,79255(-1)	-1,50630	6,93351(-1)	-4,30486	1,52721
1,0(-1)	-9,87998(-1)	4,07501(-1)	-1,01453	4,42998(-1)	-1,85963	7,02653(-1)
5,0(-1)	-4,69107(-1)	1,91861(-1)	-5,18076(-1)	2,22617(-1)	-6,81859(-1)	2,67760(-1)
1,0	-3,01568(-1)	1,23150(-1)	-3,30211(-1)	1,41493(-1)	-3,89145(-1)	1,56308(-1)
2,0	-1,78752(-1)	7,33360(-2)	-1,91406(-1)	8,18598(-2)	-2,09485(-1)	8,63759(-2)
5,0	-8,07765(-2)	3,36834(-2)	-8,36506(-2)	3,57196(-2)	-8,76311(-2)	3,70753(-2)
1,0(1)	-4,21423(-2)	1,77854(-2)	-4,29088(-2)	1,82941(-2)	-4,44688(-2)	1,89313(-2)
1,0(2)	-4,37768(-3)	1,85137(-3)	-4,38757(-3)	1,84439(-3)	-4,50724(-3)	1,91922(-3)

$2a$	$DE - Q_1$	$DE - Q_2$	$CL - Q_1$	$CL - Q_2$	$LBE^a - Q_1$	$LBE^a - Q_2$
1,0(-2)	7,58413(-1)	-3,05710(-1)	4,84212(-1)	-2,09299(-1)	2,07209	-5,94298(-1)
1,0(-1)	3,74875(-1)	-1,29653(-1)	3,14088(-1)	-1,03545(-1)	8,71981(-1)	-2,01990(-1)
5,0(-1)	1,76431(-1)	-4,09208(-2)	1,67759(-1)	-3,27467(-2)	3,11395(-1)	-3,71345(-2)
1,0	1,13094(-1)	-1,89245(-2)	1,10326(-1)	-1,38854(-2)	1,76153(-1)	-1,22203(-2)
2,0	6,66806(-2)	-6,95536(-3)	6,58345(-2)	-4,21333(-3)	9,43221(-2)	-3,14174(-3)
5,0	2,99004(-2)	-1,21488(-3)	2,96747(-2)	-4,24388(-4)	3,93363(-2)	-3,25368(-4)
1,0(1)	1,55398(-2)	-1,98285(-4)	1,54689(-2)	1,95302(-5)	1,99386(-2)	6,32300(-7)
1,0(2)	1,10737(-3)	2,11685(-5)	1,60658(-3)	2,32244(-5)	2,01820(-3)	1,48122(-5)

*Ref*<sup>a</sup>=Garcia e Siewert[27]

Considera-se  $\zeta_{n11} = 0, 1$ ,  $\zeta_{n12} = 0, 5$ ,  $\zeta_{n21} = 0, 3$ ,  $\zeta_{n22} = 0, 7$  em CL.

Da tabela acima, pode-se verificar que a diferença média entre os resultados obtidos através desse trabalho, e os obtidos via equação de Boltzmann propriamente dita [27], são de

- 47, 7% e 41, 8%, respectivamente, para a taxa do fluxo de partículas para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno difuso-especular (Maxwell).
- 51, 2% e 41, 4%, respectivamente, para a taxa do fluxo de partículas para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno generalizadas (Cecignani-Lampis).
- 57, 3% e 40, 7%, respectivamente, para a taxa do fluxo de calor para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno difuso-especular (Maxwell).
- 66, 9% e 57, 1%, respectivamente, para a taxa do fluxo de calor para o gás 1 e gás 2, considerando as condições de contorno generalizadas (Cecignani-Lampis).

Observa-se graficamente o comportamento das soluções obtidas na tabela acima, nas figuras que seguem abaixo. Nota-se que a partir que o canal aumenta, os resultados numéricos obtidos para cada espécie nos 3 casos (DE , CL e LBE), tendem ao mesmo valor.

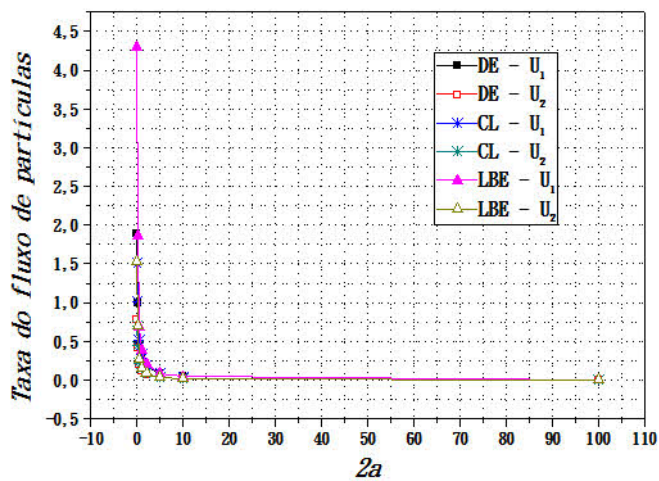


Figura 7.18: Taxa do fluxo de partículas - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ .

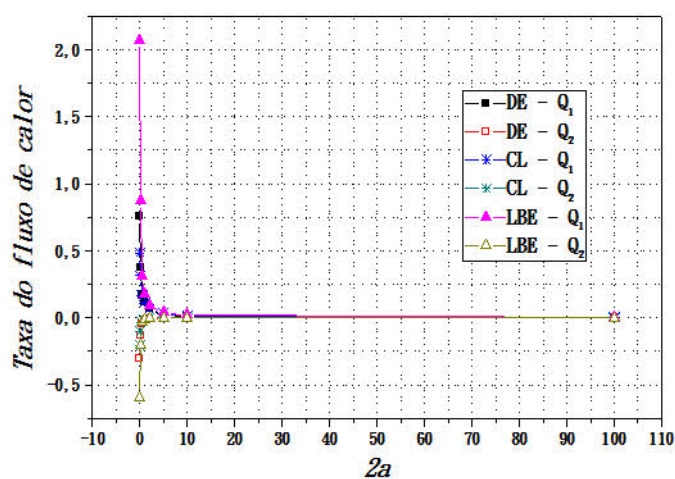


Figura 7.19: Taxa do fluxo de calor - Mistura He-Xe -  $\zeta_{11} = 0,2$ ,  $\zeta_{12} = 0,6$ ,  $\zeta_{21} = 0,4$ ,  $\zeta_{22} = 0,8$  e  $C = 0,4$ .

# Capítulo 8

## Conclusão

Um estudo dos fenômenos de transporte no escoamento de misturas binárias de gases rarefeitos monoatômicos através de duas placas paralelas infinitas foi realizado. Os perfis de velocidade, fluxo de calor, tensão de cisalhamento, assim como as taxas do fluxo de partículas e fluxo de calor foram calculados numericamente para três misturas de gases nobres (Nêonio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio) no regime de escoamento de transição. O ponto de partida para a determinação desses resultados foi a equação cinética de McCormack cuja solução foi obtida através da versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) assumindo-se as condições de contorno difuso-especular (Maxwell) e as condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis).

Os resultados numéricos, obtidos pelo método ADO em problemas de dinâmica de gases rarefeitos com condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis), apresentados neste trabalho, estão em conformidade com os resultados disponíveis nos artigos [27, 79], com outras condições de contorno.

Observou-se através da implementação computacional que, atribuindo os mesmos valores para os coeficientes de acomodação, o sistema de ordem  $8N$  gera os mesmos resultados obtidos quando se considera a condição de simetria nas placas, onde o sistema de equações gerado é de ordem  $4N$ . Desta forma, conseguimos validar os resultados obtidos analiticamente e computacionalmente no presente trabalho.

Cabe salientar que os objetivos desse trabalho foram alcançados, uma vez que:

- Obteve-se de maneira unificada no sentido de uma formulação matemática e computacional, soluções para os problemas de fluxo de massa (Poiseuille, Creep-Térmico e Difuso) entre duas placas paralelas infinitas utilizando o método ADO.

- Conseguiu-se gerar resultados mais eficientes em termos de esforço computacional e com excelente convergência para  $N = 60$  pontos de quadratura, através da aplicação da versão analítica do método de ordenadas discretas.

- Contribuiu-se com resoluções de problemas que não se encontra na literatura, segundo o Modelo de McCormack com condições de contorno generalizadas e difuso-especular.

Consequentemente, o presente trabalho gerou resultados como os apresentados das

Refs.[38, 87, 88], que servirão de comparação entre outros modelos cinéticos e novos métodos computacionais.

Para projetos futuros, os conhecimentos adquiridos durante a realização deste trabalho de mestrado servirão para o estudo de diversos problemas relacionados à Dinâmica de Gases Rarefeitos em fluxo de gases. Como exemplos de tais problemas podemos citar o estudo de fenômenos de transporte em:

- Fluxo de gases em problemas de evaporação forte (não linear) para o caso do modelo cinético S;
- Fluxo de gases em problemas bidimensionais;
- Análise de diferentes esquemas de quadratura multidimensionais para formulações de soluções em ordenadas discretas para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann.

# Referências Bibliográficas

- [1] Aubert, C., **Ecoulements compressibles de gaz dans les microcanaux: effets de raréfaction, effets instationnaires**, Doctour these, Université Paul Sebateir, Soutenue, France, 1999.
- [2] Aoki, K., Takata, S., Aikawa, H., and Golse, F. A Rarefied Gas Flow Caused by a Discontinuous Wall Temperature, **Physics of Fluids**, vol. 13, p. 2645, 2001.
- [3] Baal, T., Biomicrotechnology, **MST News**, vol.1, p. 05, 2004.
- [4] Barichello, L. B. and Siewert, C. E. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 62, p. 665, 1999.
- [5] Barichello, L. B. and Siewert, C. E. The Temperature-Jump Problem in Rarefied-Gas Dynamics, **European Journal of Applied Mathematics**, vol. 11, p. 353, 2000.
- [6] Barichello, L. B., and Siewert, C. E. Some Comments on Modeling the Linearized Boltzmann Equations, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 77, p. 43, 2003.
- [7] Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., and Krook, M. A. A model for collision processes in gases, **Physics Review**, vol.94, p. 511, 1954.
- [8] Bird, G. A., **Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows**, Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [9] Burden, R. L., and Faires, J. D. **Numerical Analysis**. Brooks/Cole Publishing Company, Boston, 1997.
- [10] Boltzmann, L., Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen. **Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften**, vol.66, p. 275, 1872.
- [11] Cabrera, L. C. **Solução Espectral para Modelos Bidimensionais da Equação Linear de Boltzmann**, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2009.

- [12] Cercignani, C. Method of Elementary Solutions for Kinetic Models With Velocity-Dependent Collision Frequency, **Annals of Physics**, vol. 40, p. 469, 1966.
- [13] Cercignani, C., and Lampis, M. Kinetic model for gas-surface interaction, **Transport Theory and Statistical Physics**, vol.1, p. 101, 1971.
- [14] Cercignani, C., **Theory and Application of the Boltzmann Equation**, Scottish Academic Press, Edinburgh, 1975.
- [15] Cercignani, C., **The Boltzmann Equation and Application**, Springer-Verlag, New York, 1988.
- [16] Cercignani, C. **Rarefied Gas Dynamics**, From Basic Concepts to Actual Calculations. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [17] Chapman, S., and Cowling, T. G., **The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases**, University Press, Cambridge, 1952.
- [18] Chandrasekhar, S. Radiative Transfer. Oxford University Press, London, 1950.
- [19] Davis, P. J., and Polonsky, I. **Numerical Interpolation, Differentiation and Integration**, Handbook of Mathematical Function, M. Abramowitz and I. A. Stegun, Eds., National Bureau of Standards, Washington, 1964.
- [20] Dongarra, J. J., Bunch, J. R., Moler, C. B., and Stewart, G. W. **LINPACK User's Guide**, Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM, Philadelphia, 1979.
- [21] Duderstadt, J. J., and Hamilton, L. J. **Nuclear Reactor Analysis**, John Wiley, New York, 1976.
- [22] Ferziger, J. H., and Kaper, H. G., **Mathematical Theory of Transport Processes in Gases**, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [23] Frankowski, k., Alterman, Z., and Pekeris, C. L. Heat Transport Between Parallel Plates in a Rarefied Gas of Rigid Sphere Molecules, **Physics of Fluids**, vol. 8, p. 245, 1965.
- [24] Gad-el-Hak, M., **Handbook of MEMS**, CRC Press, Boca Raton, 2006.
- [25] Garcia, R. D. M., and Siewert, C. E. The McCormack Model for Gas Mixture: Plane Couette Flow, **Physics of Fluids**, vol. 17, p. 037102(1), 2005.
- [26] Garcia, R. D. M., and Siewert, C. E. The Linearized Boltzmann Equation: Sound-Wave Propagation in a Rarefied Gas, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 57, p. 94, 2006.



- [27] Garcia, R. D. M., and Siewert, C. E. Channel Flow of a Binary Mixture of Rigid Spheres Described by the Linearized Boltzmann Equation and Driven by Temperature, Pressure and Density Gradients, **SIAM Journal on Applied Mathematics**, vol. 67, p. 1041, 2007.
- [28] Garcia, R. D. M., and Siewert, C. E. Couette Flow of a Binary Mixture of Rigid-Sphere Gases Described by the Linearized Boltzmann Equation, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 27, p. 823, 2008.
- [29] Gross, E. P., and Jackson, E. A., Kinetic Models and the Linearized Boltzmann Equation, **Physics of Fluids**, vol. 2, p. 432, 1959.
- [30] Hamel, B. B. Kinetic model for binary gas mixture. **Physics of Fluids**, vol.8, p. 418, 1965.
- [31] Hahn, O., Raether, F., ArduiniSchuster, M. C., and Fricke, J. Transient Coupled Conductive/Radiative Heat Transfer in Absorbing, Emitting and Scattering Media. Application to Loser-Flash Measurements on Ceramic Materials, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 40, p. 689, 1997.
- [32] Hendi, A. A., and Abulwafa, E. M. Heat Transfer in a Spherical Turbid Medium with Conduction and Radiation. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 75, p. 647, 2002.
- [33] Kalempa, D. **Fenômenos de Transporte no escoamento de Misturas de Gases Rarefeitos**, Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Física, Setor de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná, 2005.
- [34] Kennard, E. H., **Kinetic Theory of Gases**, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1938.
- [35] Kestin, J., Knierim, K., Mason, E. A., Najafi, B., Ro, S. T., and Waldman, M. Equilibrium and Transport Properties of the noble gases and their mixture at low densities, **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, vol. 13, p. 229, 1984.
- [36] Kogan, M. N., **Rarefied Gas Dynamics**, Plenum, New York, 1969.
- [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**, vol.25, p. 113, 2006.
- [38] Knackfuss, R. F., and Tres, A. **Uso de Condições de Contorno Generalizadas no Fluxo de Uma Mistura Binária de Gases Rarefeitos** Proceedings of the

XXXI Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CD-Rom, Buenos Aires, Argentina, 2010.

- [39] Kremer, G. M., **Uma introdução á equação de Boltzmann**, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, 2005.
- [40] Krueger, S., Sensors for Mobility, **MST News**, vol.3, p. 6, 2007.
- [41] Lazard, M., Andre, S., and Maillet, D. Transient Coupled Radiative-Conductive Heat Transfer in a Gray Planar Medium with Anisotropic Scattering, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 69, p. 23, 2001.
- [42] Li, D., **Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics**, Springer-Verlag, 2008.
- [43] Liu, L., Cao, W., Wu, J., Wen, W., Chang, D. C., and Sheng, P., Desing and Integration of an all-in-one Biomicrofluid, **Biomicrofluidics**, vol.2, p. 034103(1), 2008.
- [44] Loyalka, S. K. Temperature Jump and Thermal Creep Slip: Rigid Sphere Gas, **Physics of Fluids A**, vol. 1, p. 403, 1989.
- [45] Loyalka, S. K., and Ferziger, J. H. Model Dependence of the Temperature Slip Coefficient, **Physics of Fluids**, vol. 11, p. 1668, 1968.
- [46] Luo, X., Malyshev, O. B., Day, C. H., Hauer, V., Reid, R. J., and Sharipov, F., Monte Carlo Simulation of Gas Flow Through the KATRIN DPS2-F Differential Pumping System, **Vacuum**, vol.80, p. 864, 2006.
- [47] Malyshev, O. B., Day, C. H., Luo, X., and Sharipov, F., Tritium Gas flow Dynamics Through the Source and Transport Systems of the Katrin Experiment, **Journal of Vacuum Science and Technology A**, vol.27, p. 73, 2008.
- [48] McClury, R. G., and Adair III, T. W. Thermomagnetic torque in deuterium gas, **Journal of Chemical Physics**, vol.54, p. 1678, 1971.
- [49] McCormack, F. J. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases. **Physics of Fluids**, vol.16, p. 2095, 1973.
- [50] Morse, T. F. Kinetic model equations for a gas mixture, **Physics of Fluids**, vol.7, p. 2012, 1964.
- [51] Müller-Fiedler, R., Axten, E., Ernest, P., and Schie, J., Inertial Sensors for Automotive Safety Systems, **MST News**, vol. 3, p. 10, 2007.

- [52] Onishi, Y. On the behaviour of a slightly rarefied gas mixture over plane boundaries. **Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)**, vol.37, p. 573, 1986.
- [53] Onishi, Y. Kinetic theory analysis for temperature and density fields of a slightly rarefied binary gas mixture over a solid wall. **Physics of Fluids**, vol.9, p. 226, 1997.
- [54] Onsager, L. Reciprocal relations in irreversible processes.II, **Physics Review**, vol.38, p. 2265, 1931.
- [55] Pan, S., and Storvick, S. Kinetic theory calculations of pressure effects of diffusion, **Journal of Chemical Physics**, vol.97, p. 2671, 1992.
- [56] Pekeris, C. L. **Solutions of the Boltzmann-Hilbert Integral Equation**, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, vol. 41, p. 661, 1955.
- [57] Pekeris, C. L., and Alterman, Z. **Solutions of the Boltzmann-Hilbert Integral Equation II. The Coefficients of Viscosity and Heat Conduction**, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, vol. 43, p. 998, 1957.
- [58] 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, p. 417, 1974.
- [59] Porodnov, B. T., Kulev, A. N., and Tukhvetov, F. T. Thermal transpiration in a circular capillary with a small temperature difference, **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 88, p. 609, 1978.
- [60] Reichert, T. J. **Abordagens Analíticas Para Problemas de Transporte de Radiação com Dependência Espectral**, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2009.
- [61] Rodrigues, P. **Dinâmica de Gases Rarefeitos e Transferência Radiativa: Aplicações em Geometria Cilíndrica**, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2003.
- [62] Schaaf, S. A. and Chambre, P. L. **Flow of Rarefied Gases**, Princeton University Press, 1961.
- [63] Scherer, C. S. **Efeitos de Evaporação em Gases Rarefeitos**, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2009.

- [64] Scherer, C. S., and Barichello, L. B. A Heat Transfer Problem in Rarefied Gas Dynamics, **Heat Transfer Engineering**, vol. 30, p. 282, 2009.
- [65] Shakhov, E. M. **Method of investigation of rarefield gas flows**, Nauka, Moscow, 1974.
- [66] Sharipov, F. Non-Isothermal Gas Flow Through Rectangular Microchanel, **Journal of Micromechanics Microengineering**, vol. 9, pp. 394, 1999.
- [67] Sharipov, F. Application of Cercignani-Lampis Scattering Kernel to Calculations of Rarefied Gas Flows. II. Slip and jump coefficients, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 22, p. 133, 2003.
- [68] Sharipov, F. Onsanger-Casimir reciprocity relations for opengaseous systems at arbitrary rarefaction. III. Application of the theory for single gas, **Physica A**, vol. 209, p. 457, 1994.
- [69] Sharipov, F. Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice, **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 518, p. 35, 2004.
- [70] Sharipov, F., and Kalempa, D. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures I, **Physics of Fluids**, vol.15, p. 1800, 2003.
- [71] Sharipov, F., and Kalempa, D. Oscillatory Couette Flow at Arbitrary Oscillation Frequency Over the Whole Range of the Knudsen Number, **Microfluid Nanofluid**, vol. 4, p. 363, 2008.
- [72] Sharipov, F. and Seleznev, V. Data on Internal Rarefied Gas Flows. **Journal Physical and Chemical Reference Data**, vol. 27, p. 657, 1998.
- [73] Sharipov, F. and Seleznev, V. Rarefied gas flow through a long tube at any pressure ratio, **Journal of Vacuum Science and Technology A**, vol. 12, p. 2933, 1994.
- [74] Sharipov, F. and Seleznev, V. Rarefied gas flow through a long tube at any temperature difference, **Journal of Vacuum Science and Technology A**, vol. 14, p. 2627, 1996.
- [75] Siewert, C. E. Generalizes Boundary Conditions for the S-Model Kinetic Equations Basic to Flow in a Plane Channel, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol.72, p. 75, 2002.
- [76] Siewert, C. E. Heat Transfer and Evaporation/Condensation Problems Based on the Linearized Boltzmann equation, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 22, p. 391, 2003.

- [77] Siewert, C. E. The Linearized Boltzmann Equation: a Concise and Accurate Solution of the Temperature-Jump Problem, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 77, p. 417, 2003.
- [78] Siewert, C. E. The Linearized Boltzmann Equation: a Concise and Accurate Solution to Basic Flow Problems, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)**, vol. 77, p. 417, 2003.
- [79] Siewert, C. E., and Valougeorgis, D. The McCormack model: Channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and density gradients. **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol.23, p. 645, 2004.
- [80] Sirovich, L. Kinetic modeling of gas mixture, **Physics of Fluids**, vol.5, p. 908, 1962.
- [81] 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.
- [82] Sone, Y., Ohwada, T., and Aoki, K. Temperature Jump and Knudsen Layer in a Rarefied Gas Over a Plane Wall: Numerical Analysis of the Linearized Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules, **Physics of Fluids A**, vol. 1, p. 363, 1989.
- [83] Takata, S. **Diffusion slip for a binary mixture of hard-sphere molecular gases: Numerical analysis based on the linearized Boltzmann equation**, In T J Bartel and M A Gallis, editors, Rarefied Gas Dynamics, New York, 22nd Int. Symp., AIP Conference Proc. vol.585, p. 22, 2001.
- [84] Takata, S., Yasuda, S., Kosuge, S., and Aoki, K. Numerical analysis of thermal-slip and diffusion-slip flows of a binary mixture of hard-sphere molecular gases, **Physics of Fluids**, vol.15, p. 3745, 2003.
- [85] Thomas, J. R., Chang, T. S., and Siewert, C. E. Heat Transfer Between Parallel Plates with Arbitrary Surface Accommodation, **Physics of Fluids**, vol. 16, p. 2116, 1973.
- [86] Thomas, J. R. The  $F_N$  Method in Kinetic Theory I. Half-Space Problems, **Transport Theory and Statistical Physics**, vol. 14, p. 485, 1985.
- [87] Tres, A., and Knackfuss, R. F. **Fluxo de uma mistura gasosa binária: Modelo de McCormack** Proceedings of the XXXI Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CD-Rom, Buenos Aires, Argentina, 2010.
- [88] Tres, A. **O Modelo de McCormack Para Uma Mistura Gasosa Binária: O Problema Difuso** Proceedings do I CICPG - I Congresso de Iniciação Científica e Pós-Graduação, Florianópolis, SC, 2010.

- [89] Valougeorgis, D., and Thomas, J. R. The  $F_N$  Method in Kinetic Theory II: Heat Transfer Between Parallel Plates, **Transport Theory and Statistical Physics**, vol. 14, p. 497, 1985.
- [90] Vargas, R., and de Vilhena, M. T. A Closed-Form Solution for the One-Dimensional Radiative Conductive Problem by the Decomposition and LTSN Methods, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 75, p. 647, 1999.
- [91] Weng, H. C. and Chen, C. On the Importance of Thermal Creep in Natural Convective Gas Microflow with Wall Heat Fluxes, **Journal of Physics D: Applied Physics**, vol. 41, p. 115501(1), 2008.
- [92] Wick, G. C. "Uber Ebene Diffusions Problem, **Zeitschrift Fur Physik**, vol. 120, p.702, 1943.
- [93] Williams, M. M. R. **Mathematical methods in particle transport theory**, Butterworth, London, 1971.
- [94] Williams, M. M. R. A Review of the Rarefied Gas Dynamics Theory Associated with Some Classical Problems in Flow and Heat Transfer, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)**, vol. 52, p. 500, 2001.
- [95] Wood, J. **Computational Methods in Reactor Shielding**, Oxford: Pergamon Press, 1982.