

USO DE CONDIÇÕES DE CONTORNO GENERALIZADAS NO FLUXO DE UMA MISTURA BINÁRIA DE GASES RAREFEITOS

Rosenei F. Knackfuss e Anderson Tres

*Programa de Pós-Graduação em Matemática, Departamento de Matemática, CCNE, Universidade
Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS, Brasil,
rfknackfuss@gmail.com, andersontres.mat@gmail.com*

Palavras Chave: Fluxo de Poiseuille, modelo de McCormack, núcleo de Cercignani-Lampis, método de ordenadas discretas.

Resumo. Neste trabalho, apresenta-se resultados numéricos para quantidades físicas de interesse relativas ao fluxo de uma mistura binária de rarefação arbitrária em microcanais planos, definido por duas placas paralelas com constituições químicas diferentes (placas diferentes). O movimento da mistura dos gases ocorre devido a um gradiente constante de pressão na direção paralela a superfície que cerca os gases (Problema de Poiseuille). A teoria cinética para o fluxo da mistura gasosa é descrita por um modelo linearizado da equação de Boltzmann, Modelo de McCormack. Para melhor descrever o processo de interação entre o gás e a parede utiliza-se o núcleo de Cercignani-Lampis definido em termos dos coeficientes de acomodação normal e de acomodação tangencial, 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 resultados numéricos são desenvolvidos através do programa computacional FORTRAN.

1 INTRODUÇÃO

O interesse de pesquisadores em fenômenos que envolvem a dinâmica de gases tem aumentado nos últimos anos em função das várias aplicações nesta área, principalmente no fluxo de gases em microcanais. Historicamente, os primeiros resultados analíticos sobre o fluxo de um gás estável ao longo de um canal foi publicado na década de 30. Como um exemplo, Kennard (Kennard, 1938) desenvolveu uma expressão simples para a taxa do fluxo de massa num longo tubo circular e através de um canal de placas paralelas. A literatura apresenta muitos trabalhos relacionados ao fluxo de um gás monoatômico em um canal plano, por exemplo (Siewert, 1999, 2000a,b; Barichello e Siewert, 1999b; Knackfuss e Barichello, 2006). Em relação a uma mistura gasosa, a literatura apresenta um número reduzido de trabalhos. O comportamento de um gás, isto é, o perfil de velocidade, perfil de fluxo de calor, desvio de temperatura, desvio de densidade, dependem das propriedades do gás através das leis de forças interatômicas e também interações gás-superfície na parede. Em geral, a resolução dos problemas de dinâmica de gases é baseada no estado de rarefação do gás (Sharipov e Seleznev, 1998; Williams, 1971). Este estado pode ser classificado pelo valor do número de Knudsen (K_n), definido como a 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) (Schaaf e Chambre, 1961).

$$K_n = \frac{l}{a_*} \quad (1)$$

Se o número de Knudsen é muito pequeno ($K_n \leq 10^{-2}$), então o livre caminho médio molecular é pequeno, e assim, o fluxo do gás pode ser considerado como meio contínuo e as equações clássicas da hidrodinâmica, equações de Navier-Stokes, podem ser aplicadas no escoamento do gás (regime hidrodinâmico). Quando o número de Knudsen é muito grande ($K_n \geq 10$), as colisões das moléculas do gás com a superfície que o delimita ocorrem mais frequentemente do que as colisões entre as próprias moléculas, e pode-se considerar o movimento das moléculas independentes umas das outras (regime molecular livre). Quando o número de Knudsen tem um valor intermediário ($10^{-2} < K_n < 10$), não pode-se desprezar a interação entre as partículas como no regime de moléculas livres e também não pode-se considerar o meio como um contínuo como no regime hidrodinâmico. Este é o chamado regime de transição. Assim, quando o gás está no regime de transição, as equações de Navier-Stokes não podem ser usadas, necessitando-se então, de outras formulações baseadas na equação de Boltzmann ou equações cinéticas (modelos).

Uma função de distribuição contém informação sobre a distribuição espacial e a velocidade das partículas gasosas de um gás monoatômico num determinado instante de tempo, possibilitando-se a determinação de propriedades macroscópicas (pressão, temperatura, densidade, etc) desse gás. A função de distribuição satisfaz um sistema de equações acopladas baseadas na equação de Boltzmann, que é a base da teoria cinética dos gases, estabelecida em 1872 por Ludwig Boltzmann (Boltzmann, 1872). A equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial não linear, sua resolução é de extrema dificuldade devido a presença da integral de colisão, que é uma função das frequências de colisões entre os constituintes e uma função de distribuição de referência. Mesmo com o grande avanço computacional, resolver a equação de Boltzmann original exige muito esforço, para facilitar cálculos numéricos, lineariza-se a equação de Boltzmann com a utilização de uma função de distribuição Maxwelliana local. Após a linearização, faz-se algumas simplificações resultando-se nas chamadas equações modelo ou cinética.

Fisicamente, 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 $l \gg a$. (veja Fig. 1).

Aqui, P_χ, T_χ e C_χ representam respectivamente, a pressão, a temperatura e a concentração molar da mistura confinada no reservatório χ , onde $\chi = 1, 2$. O fluxo da mistura gasosa através desse capilar 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 tubo existem fenômenos de transferência de massa, calor e difusão. Neste trabalho, dentro dos fenômenos de transferência de massa, encontra-se o perfil de velocidade, perfil do fluxo de calor e perfil de tensão de cisalhamento para o fluxo de massa de uma mistura gasosa causado pelo gradiente de pressão (Fluxo de Poiseuille). Utiliza-se o modelo proposto por McCormack para uma mistura binária de gases. A interação do gás com a superfície que delimita seu fluxo é baseada no núcleo proposto por Cercignani e Lampis (Cercignani e Lampis, 1971). Considera-se que as placas possuem contituições químicas diferentes, isto é, não há condição de simetria ou anti-simetria nas placas.

Em relação ao método de resolução, utiliza-se a versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) (Barichello e Siewert, 1999a), que tem como base, a aproximação da integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma fórmula de quadratura numérica arbitrária e encontrar as constantes de separação através de um problema de autovalores e autovetores.

Por fim, faz-se, uma comparação de resultados obtidos em outros trabalhos realizados com núcleos diferentes.

2 O PROBLEMA

Na teoria cinética dos gases, um gás ou n gases monoatômicos são descritos em termos de uma função de distribuição $f(x, z, v)$ que contém informações sobre a distribuição espacial e de velocidades das partículas gasosas num determinado instante de tempo, possibilitando-se a determinação de propriedades macroscópicas (pressão, temperatura, densidade, etc) desse gás. A função de distribuição satisfaz a equação de transporte de Boltzmann

$$v \nabla_r f(r, v) = Q(f_\alpha, f_\beta), \quad (2)$$

onde

$$Q(f_\alpha, f_\beta) = \int \int \int w(v_\alpha, v_\beta; v'_\alpha, v'_\beta) (f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta) dv'_\alpha dv'_\beta dv_\beta. \quad (3)$$

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}'_α e \mathbf{v}'_β terem velocidades pós-colisionais \mathbf{v}_α e \mathbf{v}_β após uma colisão binária entre duas partículas.

Como a grande dificuldade em resolver a equação de Boltzmann está na presença da integral de colisões $Q(f_\alpha, f_\beta)$, é conveniente linearizar a equação em torno de uma função de distribuição Maxwelliana. Após a linearização, simplifica-se a equação de Boltzmann, que para uma mistura de gases, segundo McCormack (McCormack, 1973), tem-se

$$S_\alpha(\mathbf{c}) + c_x \frac{\partial}{\partial x^*} h_\alpha(x^*, \mathbf{c}) + \omega_\alpha \gamma_\alpha h_\alpha(x^*, \mathbf{c}) = \omega_\alpha \gamma_\alpha \mathfrak{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(x^*, \mathbf{c}), \quad (4)$$

onde $\alpha = 1, 2$ representa as espécies de gases. 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 (Siewert e Valougeorgis, 2004b), 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 $\mathbf{c} = \omega_2 \mathbf{v}$ onde $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ é a velocidade da partícula com magnitude v e

$$\omega_\alpha = \left[\frac{m_\alpha}{2kT_0} \right]^{1/2}. \quad (5)$$

Aqui, k é a constante de Boltzmann, m_α é a massa molecular para as duas espécies de gases, x é a variável espacial na transversal e T_0 é a temperatura de referência. O termo $S(\mathbf{c})$, o qual é chamado de termo não homogêneo da equação, é dado pela expressão

$$S_\alpha(c) = c_z X_P, \quad (6)$$

onde a constante X_P define a medida para o gradiente de pressão que impulsiona o fluxo do gás no canal.

A frequência de colisão γ_α será definida posteriormente.

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

$$\mathfrak{L}_\alpha\{h_1, h_2\}(x^*, \mathbf{c}) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_{\beta=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\beta(x^*, \mathbf{c}') \mathbf{K}_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) d c'_x d c'_y d c'_z, \quad (7)$$

onde os núcleos de espalhamento $\mathbf{K}_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ podem ser encontrados na Ref. (McCormack, 1973).

Seguindo Siewert (Siewert e Valougeorgis, 2004b), introduz-se na Eq.(4) a variável espacial adimensional

$$\tau = \frac{x}{l_0}, \quad (8)$$

onde

$$l_0 = \frac{\mu v_0}{P_0} \quad (9)$$

representa o livre caminho médio (baseado na viscosidade) da mistura introduzido por Sharipov e Kalempa (Sharipov e Kalempa, 2003), escreve-se então, a velocidade molecular característica da mistura como

$$v_0 = (2kT_0/m)^{1/2}, \quad (10)$$

onde

$$m = \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 + n_2} \quad (11)$$

representa a massa molecular média da mistura e n_α é a densidade de equilíbrio para as duas espécies de gases.

As expressões que definem a viscosidade da mistura em termos das pressões parciais P_α e a frequência de colisão γ_α são dadas, respectivamente, por

$$\mu = \frac{P_1}{\gamma_1} + \frac{P_2}{\gamma_2}, \quad (12)$$

onde

$$\frac{P_\alpha}{P_0} = \frac{n_\alpha}{n_1 + n_2}, \quad (13)$$

$$\gamma_1 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}}{\Psi_2 + \nu_{1,2}^{(4)}} \quad (14)$$

e

$$\gamma_2 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}}{\Psi_1 + \nu_{2,1}^{(4)}}. \quad (15)$$

Aqui,

$$\Psi_\alpha = \nu_{\alpha,\alpha}^{(3)} - \nu_{\alpha,\alpha}^{(4)} + \nu_{\alpha,\beta}^{(3)}, \quad \alpha = 1, 2, \quad \beta = 1, 2 \quad \text{e} \quad \beta \neq \alpha, \quad (16)$$

onde, de acordo com McCormack (McCormack, 1973), escreve-se

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} n_\beta \Omega_{\alpha,\beta}^{11}, \quad (17)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 n_\beta (\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{11}), \quad (18)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha,\beta}^{22} \right), \quad (19)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \Omega_{\alpha,\beta}^{22} \right), \quad (20)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} \quad (21)$$

e

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{3/2} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)}, \quad (22)$$

com

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} = \Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \left(\frac{15m_\alpha}{4m_\beta} + \frac{25m_\beta}{8m_\alpha} \right) \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \left(\frac{m_\beta}{2m_\alpha} \right) (5\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \Omega_{\alpha,\beta}^{13}), \quad (23)$$

e após uma correção por Pan e Storvick (Pan e Storvick, 1992)

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)} = -\Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{12} + \frac{1}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{13}. \quad (24)$$

Aqui,

$$m_{\alpha,\beta} = m_\alpha m_\beta / (m_\alpha + m_\beta) \quad (25)$$

e as funções Ω são integrais de Chapman-Cowling (Chapman e Cowling, 1952; Ferziger e Kaper, 1972), as mesmas são integrais que dependem do potencial de interação intermolecular. Para o caso do modelo de esferas rígidas tem-se

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{ij} = \frac{(j+1)!}{8} \left[1 - \frac{1+(-1)^i}{2(i+1)} \right] \left(\frac{\pi kT}{2m_{\alpha,\beta}} \right) (d_\alpha + d_\beta)^2, \quad (26)$$

onde d_α é o diâmetro molecular da espécie α .

Por fim, por questão de notação introduz-se

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \omega_\alpha l_0 \quad (27)$$

ou, mais explicitamente,

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \frac{n_1/\gamma_1 + n_2/\gamma_2}{n_1 + n_2} (m_\alpha/m)^{1/2} \quad (28)$$

e reescreve-se a Eq.(4) em termos da variável τ como

$$S_\alpha(c) + c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) + \sigma_\alpha h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) = \sigma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(\tau, \mathbf{c}), \quad (29)$$

onde

$$S_\alpha(c) = c_z x_P, \quad (30)$$

com

$$x_P = l_0 X_P. \quad (31)$$

3 INTERAÇÃO GÁS-SUPERFÍCIE

A fim de descrever matematicamente a interação do gás com a superfície sólida que o delimita, estabelece-se 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, 1988) para uma mistura de N gases essa relação é escrita do seguinte modo:

$$|v_{\alpha n}| f_\alpha(\mathbf{r}', \mathbf{v}) = \int_{v'_{\alpha n} < 0} |v'_{\alpha n}| R(\mathbf{v}'_\alpha : \mathbf{v}_\alpha) f_\alpha(\mathbf{r}', \mathbf{v}') d\mathbf{v}'_\alpha, \quad v_{\alpha n} \geq 0, \quad (32)$$

onde $\alpha = 1, \dots, N$, $v_{\alpha n} = \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n}$ é a componente normal da velocidade do α -ésimo constituinte da mistura, $R(v'_\alpha : v_\alpha)$ é o núcleo de espalhamento, o qual fornece a densidade de probabilidade de que a velocidade de uma molécula seja alterada de v' , imediatamente antes da colisão com a parede, para v , imediatamente após a colisão (veja Fig. 2), 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 da espécie gasosa em estudo, da composição química e temperatura da superfície sólida, da estrutura mecânica da superfície, etc. O núcleo deve satisfazer algumas propriedades que podem ser encontradas em Cercignani (Cercignani, 1988).

Utiliza-se o núcleo de espalhamento proposto por Cercignani e Lampis (Cercignani e Lampis, 1971), cuja expressão para o α -ésimo constituinte da mistura é dada por

$$R_{cl}(\mathbf{v}'_\alpha : \mathbf{v}_\alpha) = \frac{m_\alpha^2 v_{\alpha n}}{2\pi \zeta_{\alpha n} \zeta_{\alpha t} (2 - \zeta_{\alpha t}) (kT_w)^2} \exp \left\{ -\frac{m_\alpha [v_{\alpha n}^2 + (1 - \zeta_{\alpha n}) v_{\alpha n}'^2]}{2kT_w \zeta_{\alpha n}} \right\} \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{\zeta_{\alpha t} (2 - \zeta_{\alpha t})} \frac{m_\alpha [v_{\alpha t} - (1 - \zeta_{\alpha t}) v_{\alpha t}']^2}{2kT_w} \right\} \mathcal{J}_0 \left(\frac{\sqrt{1 - \zeta_{\alpha n}} m_\alpha v_{\alpha n} v_{\alpha n}'}{\zeta_{\alpha n} kT_w} \right), \quad (33)$$

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

$$\mathcal{J}_0(l) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{l \cos \phi} d\phi, \quad (34)$$

ζ_α conhecido como coeficiente de acomodação, representa a fração das partículas gasosas refletidas difusamente e $(1 - \zeta_\alpha)$ corresponde à fração de partículas refletidas especularmente,

ambas do α -ésimo constituinte da mistura gasosa. Para uma mistura de N gases rarefeitos, cada espécie gasosa possui um coeficiente de acomodação definido como:

$$\zeta_\alpha(\varphi) = \frac{\Theta^-(\varphi) - \Theta^+(\varphi)}{\Theta^-(\varphi) - \Theta_{dif}^+(\varphi)} \quad (35)$$

onde

$$\Theta^-(\varphi) = \int_{v'_{\alpha n} < 0} |v'_{\alpha n}| \varphi(\mathbf{v}'_\alpha) f_\alpha(\mathbf{v}'_\alpha) d\mathbf{v}'_\alpha \quad , \quad \Theta^+(\varphi) = \int_{v_{\alpha n} > 0} |v_{\alpha n}| \varphi(\mathbf{v}_\alpha) f_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha. \quad (36)$$

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

O núcleo proposto por Cercignani e Lampis, 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}_α .

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 (Sharipov, 2002) 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, consequentemente, troca-se a sua direção.

Em termos da velocidade adimensional c escreve-se as condições de contorno, em coordenadas retangulares segundo Siewert (Siewert, 2002) como

$$h_\alpha(-a, c_x, c_y, c_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} h_\alpha(-a, -c'_x, c'_y, c'_z) R_{cl}(-c'_x, c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) dc'_x dc'_y dc'_z \quad (37)$$

e

$$h_\alpha(a, -c_x, c_y, c_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} h_\alpha(a, c'_x, c'_y, c'_z) R_{cl}(c'_x, c'_y, c'_z : -c_x, c_y, c_z) dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (38)$$

onde

$$R_{cl}(c'_x, c'_y, c'_z : c_x, c_y, c_z) = \frac{2c'_x}{\pi \zeta_{\alpha n} \zeta_{\alpha t} (2 - \zeta_{\alpha t})} T(c'_y : c_y) S(c'_x : c_x) T(c'_z : c_z) \quad (39)$$

com

$$T(y : z) = \exp \left[-\frac{[(1 - \zeta_{\alpha t})z - y]^2}{\zeta_{\alpha t} (2 - \zeta_{\alpha t})} \right] \quad (40)$$

e

$$S(y : z) = \exp \left[-\frac{[(1 - \zeta_{\alpha n})^{1/2}z - y]^2}{\zeta_{\alpha n}} \right] \mathcal{J}_0 \left[\frac{2(1 - \zeta_{\alpha n})^{1/2}|zy|}{\zeta_{\alpha n}} \right]. \quad (41)$$

As quantidades físicas de interesse para cada gás ($\alpha = 1, 2$), em termos da função de perturbação h_α é definida segundo Siewert (Siewert e Valougeorgis, 2004a) como:

Perfil de velocidade:

$$v_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) c_x \, dc_x \, dc_y \, dc_z. \quad (42)$$

Perfil de tensão de cisalhamento:

$$p_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) c_x c_z \, dc_x \, dc_y \, dc_z. \quad (43)$$

Perfil de fluxo de calor:

$$q_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) (c^2 - 5/2) c_x \, dc_x \, dc_y \, dc_z. \quad (44)$$

4 DESENVOLVIMENTO

Conhecendo-se a definição das quantidades físicas de interesse em termos de momentos da função h , multiplica-se a Eq. (29), respectivamente, por

$$\phi_1(c_y, c_z) = \frac{1}{\pi} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} c_z \quad \text{e} \quad \phi_2(c_y, c_z) = \frac{1}{\pi} (c_y^2 + c_z^2 - 2) c_z e^{-(c_y^2 + c_z^2)}, \quad (45)$$

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

$$g_{2\alpha-1}(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) \, dc_y \, dc_z \quad (46)$$

e

$$g_{2\alpha}(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) \, dc_x \, dc_z, \quad (47)$$

para $\alpha = 1, 2$. Assim, obtém-se quatro equações balanço, que são escritas na forma vetorial $G(\tau, \xi)$ como

$$S(\xi) + \xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \Sigma \mathbf{G}(\tau, \xi) = \Sigma \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}_s(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') \, d\xi', \quad (48)$$

com

$$\Sigma = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_2\} \quad \text{e} \quad \psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2}. \quad (49)$$

Para a parte não homogênea tem-se:

$$S(\xi) = \begin{bmatrix} (1/2)x_P \\ 0 \\ (1/2)x_P \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (50)$$

As componentes $K_{i,j}(\xi', \xi)$ do núcleo $K_s(\xi', \xi)$ são encontradas na Ref. (Siewert e Valougeorgis, 2004a).

A metodologia usada na obtenção da Eq. (48) é também aplicada nas condições de contorno Eqs. (37-38), obtendo-se

$$G(-a, \xi) = S_1^* \int_0^\infty G(-a, -\xi') F_1(\xi', \xi) \, d\xi', \quad (51)$$

$$G(a, -\xi) = S_2^* \int_0^\infty G(a, \xi') F_2(\xi', \xi) d\xi' \tag{52}$$

com

$$S_\beta^* = \text{diag}\{(1 - \zeta_{\beta 1}), (1 - \zeta_{\beta 1})^3, (1 - \zeta_{\beta 2})(1 - \zeta_{\beta 2})^3\} \tag{53}$$

e

$$F_\beta(\xi', \xi) = \text{diag}\{f_{\beta 1}(\xi', \xi), f_{\beta 1}(\xi', \xi), f_{\beta 2}(\xi', \xi), f_{\beta 2}(\xi', \xi)\}, \tag{54}$$

onde

$$f_{\beta l}(\xi', \xi) = \frac{2\xi'}{\zeta_{\beta l}} \exp\left[-\frac{[(1 - \zeta_{\beta l})^{1/2}\xi - \xi']^2}{\zeta_{\beta l}}\right] \mathcal{J}_0\left[\frac{2(1 - \zeta_{\beta l})^{1/2}|\xi'\xi|}{\zeta_{\beta l}}\right]. \tag{55}$$

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

Baseado na notação vetorial, expressa-se as grandezas físicas de interesse para cada gás ($\alpha = 1, 2$) como

$$v_\alpha(y) = \int_{-\infty}^\infty \psi(\xi) g_{2\alpha-1}(y, \xi) d\xi, \tag{56}$$

$$p_\alpha(y) = \int_{-\infty}^\infty \psi(\xi) g_{2\alpha-1}(y, \xi) \xi d\xi \tag{57}$$

e

$$q_\alpha(y) = \int_{-\infty}^\infty \psi(\xi) [(\xi^2 - 1/2)g_{2\alpha-1}(y, \xi) + g_{2\alpha}(y, \xi)] d\xi. \tag{58}$$

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

$$U_\alpha = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a u_\alpha(\tau) d\tau \quad \text{e} \quad Q_\alpha = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a q_\alpha(\tau) d\tau. \tag{59}$$

5 SOLUÇÃO DO PROBLEMA

Como a Eq.(48) é uma equação não homogênea, a solução para o problema é dada pela soma da solução do problema homogêneo e uma solução do problema particular, ou seja

$$G(\tau, \xi) = G_p(\tau, \xi) + G_h(\tau, \xi). \tag{60}$$

Para a solução particular propõem-se

$$G_p(\tau, \xi) = A\tau^2 + B\tau\xi + C\xi^2 + D. \tag{61}$$

As constantes A, B, C e D são determinadas através do sistema algébrico

$$A = \begin{bmatrix} a_1\sigma_1^2 \\ 0 \\ \lambda a_1\sigma_2^2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -2a_1\sigma_1 \\ 0 \\ -2\lambda a_1\sigma_2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad C = \begin{bmatrix} c_1 \\ 0 \\ c_2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad D = \begin{bmatrix} d_1 \\ 2c_1 - 4a_1 \\ 0 \\ 2c_3 - 4\lambda a_1 \end{bmatrix}, \tag{62}$$

onde as constantes estão definidas no sistema linear

$$M \begin{bmatrix} a_1 \\ c_1 \\ c_3 \\ d_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_P/\sigma_1 \\ x_P/\sigma_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{63}$$

Aqui,

$$M = \begin{bmatrix} 2 + 4\eta_{1,2}^{(2)}(1 - r^3\lambda & -\eta_{1,2}^{(1)} - (5/2)\eta_{1,2}^{(2)} & r\eta_{1,2}^{(1)} + (5/2)r^3\eta_{1,2}^{(2)} & -2\eta_{1,2}^{(1)} \\ 2\lambda + 4\eta_{2,1}^{(2)}(\lambda - s^3) & s\eta_{2,1}^{(1)} + (5/2)s^3\eta_{2,1}^{(2)} & -\eta_{2,1}^{(1)} - (5/2)\eta_{2,1}^{(2)} & 2s\eta_{2,1}^{(1)} \\ -4 + (16/5)(\beta_1 + \lambda\eta_{1,2}^{(6)}) & 2(1 - \beta_1) + (1/2)\eta_{1,2}^{(2)} & -2\eta_{1,2}^{(6)} - (r/2)\eta_{1,2}^{(2)} & \eta_{1,2}^{(2)} \\ (16/5)\eta_{2,1}^{(6)} + [(16/5)\beta_2 - 4]\lambda & -2\eta_{2,1}^{(6)} - (s/2)\eta_{2,1}^{(2)} & 2(1 - \beta_2) + (1/2)\eta_{2,1}^{(2)} & -s\eta_{2,1}^{(2)} \end{bmatrix}, \tag{64}$$

sendo

$$r = (m_1/m_2)^{1/2}, \quad s = (m_2/m_1)^{1/2}, \quad \lambda = s(\sigma_1/\sigma_2)^2 \quad e\eta_{i,j}^{(k)} = \nu_{i,j}^{(k)}/\gamma_i. \tag{65}$$

Agora, encontra-se a solução homogênea da Eq.(60), para isso utiliza-se a versão analítica do Método de Ordenadas Discretas (ADO), que tem como base, a aproximação da integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma fórmula de quadratura numérica. Para isso, propõe-se como solução para o problema homogêneo

$$G_h(\tau, \xi) = \Phi(\nu, \xi)e^{-\tau/\nu}, \tag{66}$$

onde ν é a constante de separação.

Substitui-se a Eq. (66) na Eq. (48), obtendo-se

$$(\nu\Sigma - \xi I)\Phi(\nu, \xi) = \nu\Sigma \int_0^\infty \psi(\xi') [K(\xi', \xi)\Phi(\nu, \xi) + K(-\xi', \xi)\Phi(\nu, -\xi)] d\xi' \tag{67}$$

e

$$(\nu\Sigma + \xi I)\Phi(\nu, -\xi) = \nu\Sigma \int_0^\infty \psi(\xi') [K(\xi', -\xi)\Phi(\nu, \xi) + K(-\xi', -\xi)\Phi(\nu, -\xi)] d\xi'. \tag{68}$$

A seguir, soma-se e subtrai-se as equações resultantes obtendo-se

$$V(\nu, \xi) = \frac{\nu}{\xi}\Sigma \left[U(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi')U(\nu, \xi')K_+(\xi', \xi)d\xi' \right] \tag{69}$$

e

$$U(\nu, \xi) = \frac{\nu}{\xi}\Sigma \left[V(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi')V(\nu, \xi')K_-(\xi', \xi)d\xi' \right], \tag{70}$$

onde

$$U(\nu, \xi) = \Phi(\nu, \xi) + \Phi(\nu, -\xi) \quad , \quad V(\nu, \xi) = \Phi(\nu, \xi) - \Phi(\nu, -\xi) \tag{71}$$

e

$$K_+(\xi', \xi) = K(\xi', \xi) + K(-\xi', \xi) \quad , \quad K_-(\xi', \xi) = K(\xi', \xi) - K(-\xi', \xi). \quad (72)$$

Substituindo a Eq.(70) na Eq.(69) obtém-se

$$\frac{1}{\xi^2} \left[\Sigma^2 V(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi') \mathfrak{K}(\xi', \xi) V(\nu, \xi') d\xi' \right] = \lambda V(\nu, \xi), \quad (73)$$

onde

$$\lambda = \frac{1}{\nu^2} \quad (74)$$

e

$$\mathfrak{K}(\xi', \xi) = \frac{\xi}{\xi'} \Sigma^2 K_+(\xi', \xi) + \Sigma^2 K_-(\xi', \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi'') \frac{\xi}{\xi''} \Sigma^2 K_+(\xi'', \xi) K_-(\xi', \xi'') d\xi''. \quad (75)$$

Aproxima-se o termo integral das Eqs.(70) e (73) pela fórmula de quadratura de Legendre, reescreve-se as equações como um problema de autovalores e autovetores

$$\frac{1}{\xi_i^2} \left[\Sigma^2 V(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k) \mathfrak{K}(\xi_k, \xi_i) V(\nu_j, \xi_k) \right] = \lambda_j V(\nu_j, \xi_i) \quad (76)$$

e

$$U(\nu_j, \xi_i) = \frac{\nu_j}{\xi_i} \Sigma \left[V(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k) K_-(\xi_k, \xi_i) V(\nu_j, \xi_k) \right], \quad (77)$$

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

Com o problema de autovalores resolvido, encontra-se a solução dada pela Eq.(66).

Pelo princípio da superposição de soluções, tem-se que a combinação linear de soluções também é solução, logo obtém-se como solução geral em ordenadas discretas para a Eq. (48) o que segue

$$G_h(\tau, \pm \xi_i) = \sum_{j=1}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm \xi_i) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp \xi_i) e^{-(a-\tau)/\nu_j}], \quad (78)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$. No problema de autovalores tem-se que um dos autovalores tende a zero, logo uma constante de separação (ν) tende para o infinito, levando em conta este fato negligencia-se o maior dos ν_j computados obtendo-se a solução

$$\mathbf{G}_h(\tau, \pm \xi_i) = A_1 \mathbf{G}_+ + B_1 \mathbf{G}_-(\tau, \pm \xi_i) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm \xi_i) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp \xi_i) e^{-(a-\tau)/\nu_j}], \quad (79)$$

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

$$\mathbf{G}_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ s \\ 0 \end{bmatrix} \quad e \quad \mathbf{G}_-(\tau, \pm \xi) = \begin{bmatrix} \sigma_1 \tau \mp \xi \\ 0 \\ \sigma_1 s(\tau \mp \xi/\sigma_2) \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (80)$$

Para completar a solução substitui-se a Eq. (60) nas condições de contorno dadas pela Eq. (85), obtendo-se um sistema com $8N$ equações algébricas lineares e $8N$ incógnitas, dado por

$$A_1 G_+ [I - S_1^* \sum_{k=1}^N w_k F_1(\xi_k, \xi_i)] + B_1 [G_-(-a, \xi_i) - S_1^* \sum_{k=1}^N w_k F_1(\xi_k, \xi_i) G_-(-a, -\xi_k)] + \sum_{j=2}^{4N} [A_j [\Phi(v_j, \xi_i) - S_1^* \Xi] + B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(v_j, -\xi_i) - S_1^* \Lambda]] = -R_1^*(\xi) \quad (81)$$

e

$$A_1 G_+ [I - S_2^* \sum_{k=1}^N w_k F_2(\xi_k, \xi_i)] + B_1 [G_-(a, -\xi_i) - S_2^* \sum_{k=1}^N w_k F_2(\xi_k, \xi_i) G_-(a, \xi_k)] + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(v_j, -\xi_i) - S_2^* \Lambda] + B_j [\Phi(v_j, \xi_i) - S_2^* \Xi]] = -R_2^*(\xi), \quad (82)$$

onde

$$\Xi = \sum_{k=1}^N w_k F_\beta(\xi_k, \xi_i) \Phi(v_j, -\xi_k), \quad (83)$$

$$\Lambda = \sum_{k=1}^N w_k F_\beta(\xi_k, \xi_i) \Phi(v_j, \xi_k), \quad (84)$$

$$R_1^*(\xi) =$$

$$\begin{bmatrix} (1 - \zeta_{11}) \sum_{k=1}^N w_k f_{11}(\xi_k, \xi_i) (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_k^2 + d_1 - 2a_1 \sigma_1 a \xi_k) \\ (1 - \zeta_{11})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{11}(\xi_k, \xi_i) (2c_1 - 4a_1) \\ (1 - \zeta_{12}) \sum_{k=1}^N w_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 - 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_k + c_3 \xi_k^2 \\ (1 - \zeta_{12})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{12}(\xi_k, \xi_i) (2c_3 - 4\lambda a_1) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} (1 - \zeta_{11}) (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_i^2 + d_1 - 2a_1 \sigma_1 a \xi_i) \\ (1 - \zeta_{11})^3 (2c_1 - 4a_1) \\ (1 - \zeta_{12}) \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 - 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_i + c_3 \xi_i^2 \\ (1 - \zeta_{12})^3 (2c_3 - 4\lambda a_1) \end{bmatrix} \quad (85)$$

e

$$R_2^*(\xi) =$$

$$\begin{bmatrix} (1 - \zeta_{21}) \sum_{k=1}^N w_k f_{21}(\xi_k, \xi_i) (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_k^2 + d_1 - 2a_1 \sigma_1 a \xi_k) \\ (1 - \zeta_{21})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{21}(\xi_k, \xi_i) (2c_1 - 4a_1) \\ (1 - \zeta_{22}) \sum_{k=1}^N w_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 - 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_k + c_3 \xi_k^2 \\ (1 - \zeta_{22})^3 \sum_{k=1}^N w_k f_{22}(\xi_k, \xi_i) (2c_3 - 4\lambda a_1) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} (1 - \zeta_{21}) (\sigma_1^2 a^2 a_1 + c_1 \xi_i^2 + d_1 - 2a_1 \sigma_1 a \xi_i) \\ (1 - \zeta_{21})^3 (2c_1 - 4a_1) \\ (1 - \zeta_{22}) \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 - 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_i + c_3 \xi_i^2 \\ (1 - \zeta_{22})^3 (2c_3 - 4\lambda a_1) \end{bmatrix}. \quad (86)$$

Nota-se que, G possui quatro equações balanço, $i = 1, 2, \dots, N$ e $j = 1, 2, \dots, 4N$. Com o sistema pronto, encontra-se, então, os valores para A_j e B_j .

Como o objetivo é encontrar as grandezas físicas desejadas, reescreve-se na versão de ordenadas discretas para os dois gases ($\alpha = 1, 2$), o perfil de velocidade, respectivamente,

$$u_1(\tau) = A_1 + B_1\sigma_1\tau + a_1(\sigma_1\tau)^2 + \frac{1}{2}c_1 + d_1 + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{u,1}(\nu_j) \quad (87)$$

e

$$u_2(\tau) = A_1s + B_1s\sigma_1\tau + \lambda a_1(\sigma_2\tau)^2 + \frac{1}{2}c_3 + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{u,2}(\nu_j), \quad (88)$$

o perfil de tensão de cisalhamento, respectivamente

$$p_1(\tau) = -a_1\sigma_1\tau - \frac{1}{2}B_1 + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} - B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{p,1}(\nu_j) \quad (89)$$

e

$$p_2(\tau) = -\lambda a_1\sigma_2\tau - B_1 \frac{s\sigma_1}{2\sigma_2} + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} - B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{p,2}(\nu_j), \quad (90)$$

e o perfil do fluxo de calor, respectivamente

$$q_1(\tau) = -4a_1 + \frac{5}{2}c_1 + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{q,1}(\nu_j) \quad (91)$$

e

$$q_2(\tau) = -4a_1\lambda + \frac{5}{2}c_3 + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{q,2}(\nu_j). \quad (92)$$

Nas Eq.(87)-(92) tem-se

$$N_{v,\alpha}(\nu_j) = \mathbf{F}_\alpha^T \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (93)$$

$$N_{p,\alpha}(\nu_j) = \mathbf{F}_\alpha^T \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \xi_k [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (94)$$

e

$$N_{q,\alpha}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \mathbf{F}_{q,\alpha}^T(\xi_k) [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (95)$$

onde o sobrescrito T significa a operação transposta,

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_{q,1} = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (96)$$

e

$$\mathbf{F}_{q,2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (97)$$

6 RESULTADOS NUMÉRICOS

A implementação computacional, para avaliar os resultados numéricos, foi desenvolvida através de programas na linguagem FORTRAN. Para implementar as soluções, inicialmente define-se o esquema de quadratura associado ao método de ordenadas discretas analítico (ADO). Logo após, objetivando-se calcular integrais no intervalo $[0, \infty)$, usa-se a transformação não-linear

$$u(\xi) = e^{-\xi} \quad (98)$$

e, após, utiliza-se o esquema de quadratura de Gauss-Legendre.

O próximo passo é a determinação dos autovalores (constantes de separação) e autovetores. A seguir, encontra-se as constantes arbitrárias A_j , B_j resolvendo-se o sistema linear, e assim, as quantidades físicas de interesse são encontradas.

Apresenta-se nas tabelas, duas misturas de gases nobres, obtidos com $N = 60$ pontos de quadratura e a concentração molar é definida em relação a primeira partícula dada por

$$C = \frac{n_1/n_2}{1 + n_1/n_2}. \quad (99)$$

Nas tabelas 1, 2 e 3 considera-se a mistura de gases Nêonio (Ne) e Argônio (Ar), onde suas massas são, respectivamente, $m_1 = 20,183$, $m_2 = 39,948$, e a razão dos diâmetros $d_2/d_1 = 1,406$. Especificamente na tabela 1 encontra-se, o perfil de velocidade para o fluxo da mistura gasosa no canal de diâmetro 0,5 para diferentes coeficientes de acomodação tangencial. Assume-se a concentração de 0,5 e coeficientes de acomodação de energia cinética fixos, cujos valores são $\zeta_{n11} = \zeta_{n12} = 0,5$ e $\zeta_{n21} = \zeta_{n22} = 1,0$. Segue os valores dos coeficientes de acomodação tangencial usados para obtenção de cada velocidade a seguir:

- Para as velocidades $u_\alpha^{(1)}(\tau)$ considera-se $\zeta_{11} = 0,5$, $\zeta_{12} = 1,0$, $\zeta_{21} = 0,4$ e $\zeta_{22} = 0,8$.
- Para as velocidades $u_\alpha^{(2)}(\tau)$ considera-se $\zeta_{11} = 0,3$, $\zeta_{12} = 0,5$, $\zeta_{21} = 0,8$ e $\zeta_{22} = 0,2$.
- Para as velocidades $u_\alpha^{(3)}(\tau)$ considera-se $\zeta_{11} = 0,5$, $\zeta_{12} = 0,5$, $\zeta_{21} = 0,5$ e $\zeta_{22} = 0,5$.

Os mesmos dados utilizados na tabela 1 é utilizado para a obtenção do perfil de fluxo de calor $q_{(1,2)}^{(1,2,3)}$ na tabela 2. Pode-se observar o comportamento das soluções graficamente, para o perfil de velocidade e perfil do fluxo de calor, respectivamente, nas Fig. (3-4).

Na tabela 3 encontra-se o perfil do fluxo de calor com a utilização dos coeficientes de acomodação todos iguais a 1,0, tanto os coeficientes de acomodação tangencial quanto os de acomodação de energia cinética. Com a utilização desses coeficientes, assume-se que as placas possuem mesma constituição química, logo se comparar os resultados obtidos nesse trabalho cuja condições de contorno são propostas por Cercignani-Lampis e os resultados obtidos por Siewert (Siewert e Valougeorgis, 2004b) cuja interação gás-superfície é difuso-especular, observa-se que houve convergência nos resultados. Pode-se observar o comportamento das soluções graficamente na Fig. 5.

Na tabela 4 considera-se a mistura de gases Hélio (He) e Xenônio (Xe), onde suas massas são, respectivamente, $m_1 = 4,0026$, $m_2 = 131,30$ e a razão dos diâmetros $d_2/d_1 = 2,226$. Encontra-se, respectivamente, o perfil de velocidade e o perfil do fluxo de calor para o fluxo da mistura gasosa no canal de diâmetro 0,5. Os dados para a obtenção dos resultados na tabela 4 são os mesmos utilizados na obtenção das tabelas 1 e 2, porém nesse caso utiliza-se a mistura gasosa He-Xe. Pode-se observar o comportamento das soluções graficamente na Fig. 6.

7 FIGURAS

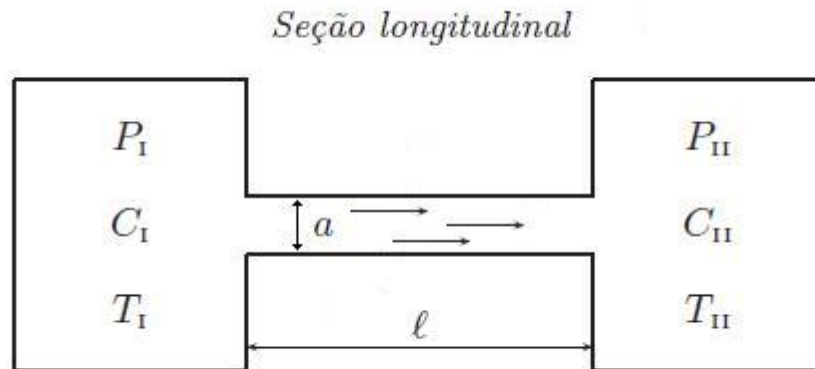


Figura 1: Escoamento da mistura gasosa em um canal plano

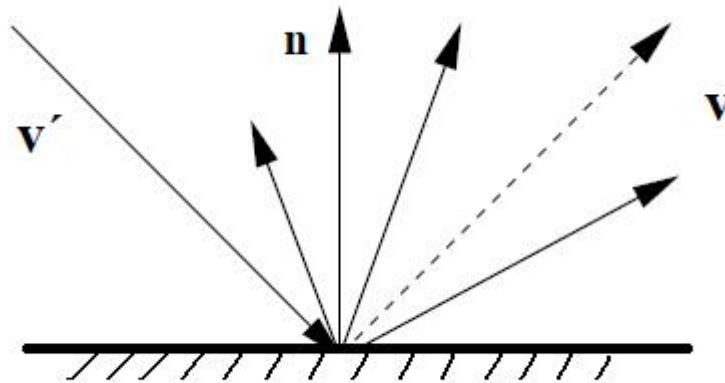


Figura 2: Interação gás-superfície

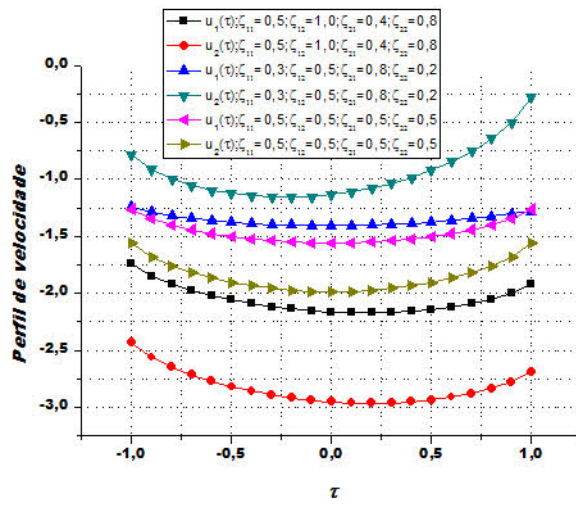


Figura 3: Perfil de velocidade para a mistura gasosa Ne-Ar

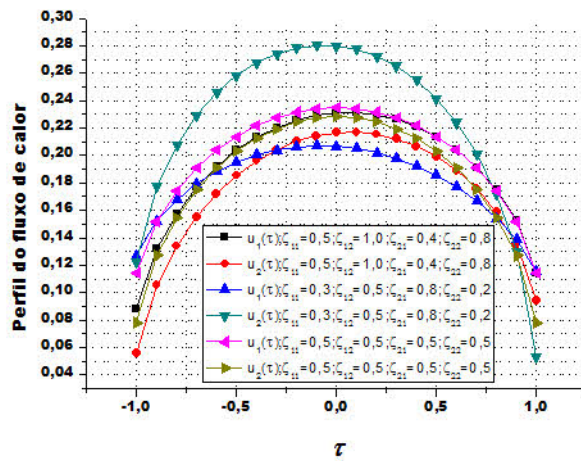


Figura 4: Perfil do fluxo de calor para a mistura gasosa Ne-Ar

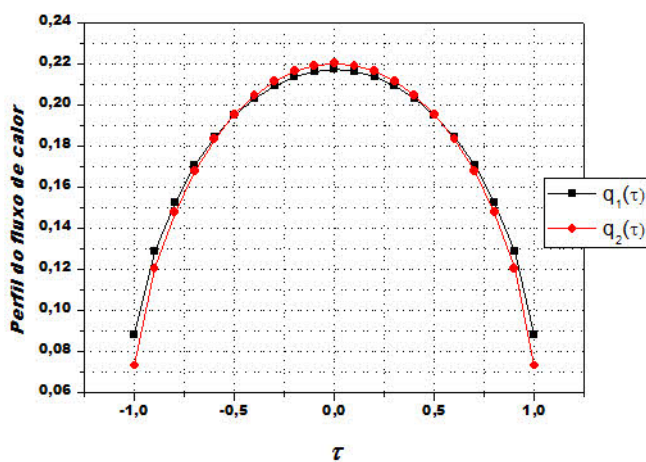


Figura 5: Perfil do fluxo de calor para a mistura gasosa Ne-Ar

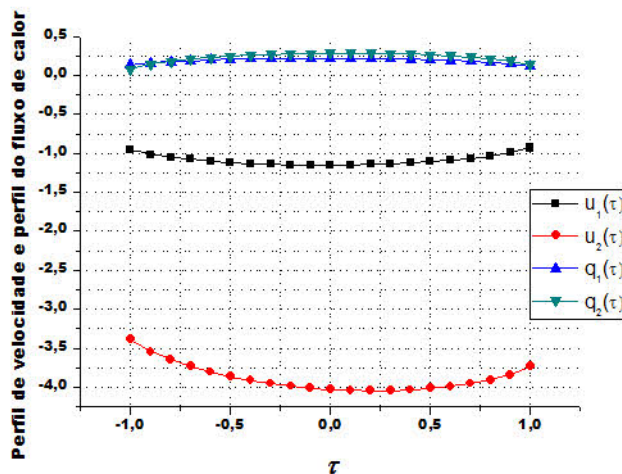


Figura 6: Perfil de velocidade e perfil do fluxo de calor para a mistura gasosa He-Xe

8 TABELAS

τ/a	$u_1^{(1)}(\tau)$	$u_2^{(1)}(\tau)$	$u_1^{(2)}(\tau)$	$u_2^{(2)}(\tau)$	$u_1^{(3)}(\tau)$	$u_2^{(3)}(\tau)$
0,0	-2,16352	-2,95417	-1,40649	-1,13620	-1,56079	-1,98636
0,1	-2,16905	-2,96244	-1,40466	-1,11217	-1,55855	-1,98318
0,2	-2,16965	-2,96475	-1,40037	-1,07924	-1,55178	-1,97357
0,3	-2,16521	-2,96101	-1,39367	-1,03697	-1,54038	-1,95738
0,4	-2,15551	-2,95100	-1,38464	-0,98466	-1,52412	-1,93430
0,5	-2,14017	-2,93435	-1,37331	-0,92126	-1,50266	-1,90383
0,6	-2,11860	-2,91045	-1,35975	-0,84515	-1,47545	-1,86518
0,7	-2,08983	-2,87830	-1,34395	-0,75377	-1,44158	-1,81706
0,8	-2,05206	-2,83606	-1,32590	-0,64257	-1,39942	-1,75710
0,9	-2,00136	-2,77959	-1,30531	-0,50160	-1,34531	-1,68007
1,0	-1,91803	-2,68779	-1,27956	-0,28158	-1,26085	-1,55925

Tabela 1: Perfil de velocidade, onde $2a = 1.0$ e $C = 0.5$ para uma mistura de gases Ne-Ar.

τ/a	$q_1^{(1)}(\tau)$	$q_2^{(1)}(\tau)$	$q_1^{(2)}(\tau)$	$q_2^{(2)}(\tau)$	$q_1^{(3)}(\tau)$	$q_2^{(3)}(\tau)$
0,0	0,23111	0,21652	0,20665	0,28005	0,23493	0,22812
0,1	0,23121	0,21689	0,20500	0,27748	0,23414	0,22717
0,2	0,22961	0,21544	0,20209	0,27258	0,23173	0,22431
0,3	0,22625	0,21209	0,19790	0,26517	0,22764	0,21946
0,4	0,22102	0,20674	0,19239	0,25495	0,22176	0,21244
0,5	0,21371	0,19917	0,18545	0,24147	0,21389	0,20301
0,6	0,20402	0,18907	0,17697	0,22402	0,20374	0,19078
0,7	0,19145	0,17588	0,16669	0,20144	0,19082	0,17507
0,8	0,17508	0,15864	0,15423	0,17168	0,17425	0,15470
0,9	0,15286	0,13516	0,13865	0,13009	0,15207	0,12699
1,0	0,11456	0,09428	0,11523	0,05335	0,11442	0,07837

Tabela 2: Perfil do fluxo de calor, onde $2a = 1, 0$ e $C = 0, 5$ para uma mistura de gases Ne-Ar.

τ/a	$CL - q_1(\tau)$	$CL - q_2(\tau)$	$DE - q_1(\tau)$	$DE - q_2(\tau)$
0,0	0,21714	0,22002	0,21714	0,22002
0,1	0,21629	0,21908	0,21629	0,21908
0,2	0,21374	0,21625	0,21374	0,21625
0,3	0,20940	0,21144	0,20940	0,21144
0,4	0,20315	0,20449	0,20315	0,20449
0,5	0,19479	0,19517	0,19479	0,19517
0,6	0,18400	0,18309	0,18400	0,18309
0,7	0,17023	0,16762	0,17023	0,16762
0,8	0,15253	0,14760	0,15253	0,14760
0,9	0,12878	0,12048	0,12878	0,12048
1,0	0,08825	0,07319	0,08825	0,07319

Tabela 3: Perfil do fluxo de calor onde, $2a = 1, 0$ e $C = 0, 5$ para uma mistura de gases Ne-Ar. CL = Condição de contorno de Cercignani-Lampis; DE = Condição de contorno difuso-especular.

τ/a	$u_1(\tau)$	$u_2(\tau)$	$q_1(\tau)$	$q_2(\tau)$
0,0	-1,15045	-4,02976	0,22026	0,28508
0,1	-1,14844	-4,04119	0,21916	0,28571
0,2	-1,14348	-4,04551	0,21679	0,28401
0,3	-1,13543	-4,04264	0,21306	0,27992
0,4	-1,12408	-4,03236	0,20787	0,27331
0,5	-1,10911	-4,01425	0,20105	0,26398
0,6	-1,09000	-3,98766	0,19230	0,25156
0,7	-1,06593	-3,95146	0,18119	0,23547
0,8	-1,03544	-3,90360	0,16689	0,21461
0,9	-0,99537	-3,83943	0,14764	0,18659
1,0	-0,93027	-3,73532	0,11471	0,13917

Tabela 4: Perfil de velocidade e perfil do fluxo de calor onde, $2a = 1, 0$ e $C = 0, 5$ para uma mistura de gases He-Xe.

9 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Considera-se que o objetivo deste trabalho foi alcançado, pois para o problema proposto, isto é, o problema de Poiseuille em um canal plano com a utilização das condições de contorno generalizadas (Cercignani-Lampis) sem condição de simetria entre as placas que delimitam o fluxo do gás, foi resolvido para o caso de uma mistura gasosa binária. A solução é baseada na versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO), que produziu resultados com alta precisão para as grandezas macroscópicas, tais como: perfil de velocidade, perfil de tensão de cisalhamento e perfil de fluxo de calor. Justifica-se, esta precisão, pois quando comparados os resultados obtidos neste trabalho, considerando-se os coeficientes de acomodação todos iguais a 1, 0, ou seja, as placas possuem mesma constituição química, com os resultados obtidos por Siewert (Siewert e Valougeorgis, 2004b), observa-se convergência nos resultados.

A facilidade de uso e, em particular, os resultados precisos obtidos justificam a confiança de que o método possa ser usado em outros problemas na dinâmica de gases rarefeitos.

Deve-se notar que os resultados específicos da espécie para o problema considerado são contínuos na variável τ e, portanto, são válidos para todos $\tau \in [-a, a]$.

Agradecimentos

Os autores R. F. Knackfuss e A. Tres agradecem, respectivamente, ao FIPE/UFSM e a CAPES pelo apoio financeiro dado a este trabalho.

REFERÊNCIAS

- Barichello L.B. e Siewert C.E. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62:665–675, 1999a.
- Barichello L.B. e Siewert C.E. A discrete-ordinates solution for poiseuille flow in a plane channel. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, 50:972–981, 1999b.
- Boltzmann L. *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen*, volume I. Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften, 1872.
- Cercignani C. *The Boltzmann equation and its application*, volume I. Springer-Verlag New York Inc., 1988.
- Cercignani C. e Lampis M. Kinetic model for gas-surface interaction. *Transport Theory and Statistical Physics*, 1:101–114, 1971.
- Chapman S. e Cowling T.G. *The mathematical theory of non-uniform gases*, volume I. Cambridge University Press, Cambridge, 1952.
- Ferziger J.H. e Kaper H.G. *Mathematical theory of transport processes in gases*, volume I. North-Holland, Amsterdam, 1972.
- Kennard E.H. *Kinetic theory of gases*, volume I. McGraw-Hill Book Company, New York, 1938.
- Knackfuss R.F. e Barichello L.B. Surface effects in rarefied gas dynamics: an analysis based on the cercignani-lampis boundary condition. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 25:113–129, 2006.
- McCormack F.J. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases. *Physics of Fluids*, 16:2095–2105, 1973.
- Pan S. e Storvick S. Kinetic theory calculations of pressure effects of diffusion. *Journal of Chemical Physics*, 97:2671–2681, 1992.
- Schaaf S.A. e Chambre P.L. *Flow of rarefied gases*, volume I. Princeton University Press, 1961.

- Sharipov F. Application of cercignani-lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. i. plane flow between two parallel plates. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 21:113–123, 2002.
- Sharipov F. e Kalempa D. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures i. *Physics of Fluids*, 15:1800–1806, 2003.
- Sharipov F. e Seleznev V. Data on internal rarefied gas flows. *Journal Physical and Chemical Reference Data*, 27:657–706, 1998.
- Siewert C.E. A discrete-ordinates solution for heat transfer in a plane channel. *Journal of Chemical Physics*, 152:251–263, 1999.
- Siewert C.E. Poiseuille and thermal-creep flow in cylindrical tube. *Journal of Chemical Physics*, 160:470–480, 2000a.
- Siewert C.E. Poiseuille, thermal creep and couette flow: results based on the ces model for the linearized boltzmann equation. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 160:470–480, 2000b.
- Siewert C.E. Generalized boundary conditions for the s-model kinetic equations basic to flow in a plane channel. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 72:75–88, 2002.
- Siewert C.E. e Valougeorgis D. Concise and accurate solution to half-space binary gas flow problems defined by the mccormack model and specular-diffuse wall conditions. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 23:709–726, 2004a.
- Siewert C.E. e Valougeorgis D. The mccormack model: Channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and concentration gradients. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 23:645–664, 2004b.
- Williams M.M.R. *Mathematical methods in particle transport theory*, volume I. Butterworth, London, 1971.