

FLUXO DE UMA MISTURA GASOSA BINÁRIA: MODELO DE MCCORMACK

Anderson Tres^a e Rosenei Fellipe Knackfuss^b

^a*Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Universidade Federal de Santa Maria, Departamento de Matemática, 97105-900, Santa Maria, Brasil, andersontres.mat@gmail.com*

^b*Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Universidade Federal de Santa Maria, Departamento de Matemática, 97105-900, Santa Maria, Brasil, rfknackfuss@gmail.com*

Palavras Chave: Dinâmica de gás rarefeito, modelo de McCormack, núcleo difuso-especular, método ADO.

Resumo. Neste trabalho, estuda-se três problemas de mistura gasosa binária confinada entre duas placas infinitas paralelas com constituições químicas diferentes, ou seja, não considera-se a condição de simetria nas placas. O fluxo dos gases entre as placas é impulsionado pelo gradiente de pressão (Fluxo de Poiseuille), gradiente de densidade (Problema Difuso) e gradiente de temperatura (Problema Creep Térmico). Para encontrar as grandezas físicas de interesse dos problemas, encontra-se a solução dos mesmos através do modelo de McCormack, o qual é determinado através da linearização da equação de transporte de Boltzmann. A metodologia utilizada para a solução é a versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) e a interação gás-superfície é baseada no modelo de Maxwell. A avaliação dos resultados numéricos é desenvolvida através da implementação computacional de programas na linguagem FORTRAN.

1 INTRODUÇÃO

O estudo dos fenômenos de transporte é indispensável para projeto, operação e otimização de processos e equipamentos em várias áreas. Sendo que o mesmo estuda o transporte de calor, transporte de quantidade de movimento e transporte de massa.

Na Dinâmica de Gases Rarefeitos, a maioria dos trabalhos consistem na resolução da equação de transporte de Boltzmann (Boltzmann, 1872) ou na simulação direta de Monte Carlo (Bird, 1994), os quais abrangem todo intervalo do número de Knudsen (Williams, 1971; Sharipov e Seleznev, 1998). O número de Knudsen Kn é um parâmetro que caracteriza a rarefação de um gás, sendo representado pela razão entre o livre caminho médio e o tamanho característico do escoamento. O mesmo costuma ser caracterizado por três regimes:

- Regime de moléculas livres ($Kn \geq 10$): o livre caminho médio molecular é muito maior que o comprimento característico do escoamento, logo ocorre poucas colisões entre as partículas gasosas. Portanto, a interação entre as partículas pode ser desprezada, a solução da equação cinética é obtida analiticamente.

- Regime hidrodinâmico ($Kn \leq 10^{-2}$): 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.

- Regime de transição ($10^{-2} < Kn < 10$): o livre caminho médio e o tamanho característico do escoamento possuem a mesma ordem de grandeza. Não podemos desprezar a interação entre as partículas e também não podemos considerar o meio como um contínuo. Nesse regime, a equação de Boltzmann deve ser resolvida.

A equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial não linear muito complexa de ser resolvida mesmo com o grande avanço computacional. A dificuldade de resolução está na presença de uma integral de colisão. Para simplificar a integral de colisão utiliza-se um modelo matemático. Assim, a equação de Boltzmann é linearizada através de uma função de distribuição Maxwelliana local e, após é simplificada em equações modelo.

Referindo-se a um único gás, os modelos mais conhecidos são o modelo BGK (Bhatnagar et al., 1954) e o modelo de S (Shakhov, 1974). Para misturas gasosas, entre os modelos propostos por Sirovich (Sirovich, 1962), Morse (Morse, 1964), Hamel (Hamel, 1965) e McClury (McClury e W., 1971), o modelo de McCormack (McCormack, 1973) é considerado como uma alternativa válida para a equação de Boltzmann linear para as misturas de gases, pois o mesmo fornece corretamente todos os coeficientes de transporte (viscosidade, condutividade térmica, etc).

O interesse pelo estudo de mistura de gases rarefeitos tem frequentemente aumentado pelo fato de terem poucos trabalhos relacionados ao mesmo dentro de um amplo intervalo do número de Knudsen, o contrário do caso de um único gás, onde a literatura apresenta vários trabalhos (Siewert, 2002; Camargo e Barichello, 2004; Cabrera e Barichello, 2006; Knackfuss e Barichello, 2006).

No presente trabalho considera-se uma mistura de gases confinados entre duas placas paralelas infinitas com constituições físicas diferentes e separadas por uma distância $2a(x = a)$. O fluxo dos gases no capilar ocorre devido a gradientes de pressão, temperatura e densidade.

Objetiva-se determinar numericamente as quantidades físicas: perfil de velocidade, perfil de tensão de cisalhamento e perfil do fluxo de calor para os coeficientes cinéticos que descrevem o fluxo de massa causados pelo gradiente de pressão X_P (Fluxo de Poiseuille), temperatura X_T (creep térmico), e densidade X_C (problema difuso).

Os problemas serão desenvolvidos utilizando-se as condições de contorno propostas por Maxwell sem a condição de simetria das placas onde a mistura gasosa está confinada.

Será utilizado a versão analítica do Método de Ordenadas Discretas (ADO) (Barichello e Siewert, 1999). Para resolver de forma eficiente e precisa a equação do modelo de McCormack aplicado ao fluxo de misturas gasosas no regime de transição, utiliza-se as misturas de gases monoatômicos Neônio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio.

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

$$v \nabla_r f(r, v) = Q(f_\alpha, f_\beta), \quad (1)$$

onde

$$Q(f_\alpha, f_\beta) = \int \int \int w(v_\alpha, v_\beta; v'_\alpha, v'_\beta) (f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta) dv'_\alpha dv'_\beta dv_\beta. \quad (2)$$

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

$$S_\alpha(\mathbf{c}) + c_x \frac{\partial}{\partial x^*} h_\alpha(x^*, \mathbf{c}) + \omega_\alpha \gamma_\alpha h_\alpha(x^*, \mathbf{c}) = \omega_\alpha \gamma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(x^*, \mathbf{c}), \quad (3)$$

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

$$\omega_\alpha = \left[\frac{m_\alpha}{2kT_0} \right]^{1/2}. \quad (4)$$

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 pelas expressões

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

e

$$S_2(c) = c_z [(c^2 - 5/2)X_T + X_P - (n_1/n)X_C], \quad (6)$$

onde n_α é a densidade de equilíbrio para as duas espécies de gases e 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.

Nota-se 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 (Fluxo de Poiseuille).

A frequência de colisão γ_α será definida posteriormente.

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

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

onde os núcleos de espalhamento $\mathbf{K}_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ segundo McCormack (McCormack, 1973) são dados pela expressão

$$\mathbf{K}_{\alpha,\beta}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = \mathbf{K}_{\alpha,\beta}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \mathbf{K}_{\alpha,\beta}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \mathbf{K}_{\alpha,\beta}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + \mathbf{K}_{\alpha,\beta}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad \alpha = 1, 2 \quad (8)$$

onde

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{1,2}^{(1)}] - \eta_{1,2}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (9)$$

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (10)$$

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_1[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (11)$$

$$\mathbf{K}_{1,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\beta_1(c'^2 - 5/2) - \eta_{1,2}^{(2)}](c^2 - 5/2) \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (12)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = r\{2\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(2)}[r^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (13)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)r^* \eta_{1,2}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (14)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{1,2}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (15)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)] \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (16)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{2,1}^{(1)}] - \eta_{2,1}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (17)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2s^* \eta_{2,1}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (18)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_2[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \quad (19)$$

$$\mathbf{K}_{2,2}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\beta_2(c'^2 - 5/2) - \eta_{2,1}^{(2)}](c^2 - 5/2) \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (20)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = s\{2\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(2)}[s^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\}\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \quad (21)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)s^*\eta_{2,1}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \quad (22)$$

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{2,1}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2] \quad (23)$$

e

$$\mathbf{K}_{2,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2)]\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}. \quad (24)$$

Aqui, usa-se

$$r = (m_1/m_2)^{1/2}, \quad s = (m_2/m_1)^{1/2}, \quad r^* = \frac{r^2}{1+r^2} \quad \text{e} \quad s^* = \frac{s^2}{1+s^2}, \quad (25)$$

além disso,

$$\varpi_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(4)} - \eta_{1,1}^{(3)} - \eta_{1,2}^{(3)}, \quad (26)$$

$$\varpi_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(4)} - \eta_{2,2}^{(3)} - \eta_{2,1}^{(3)}, \quad (27)$$

$$\beta_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(6)} - \eta_{1,1}^{(5)} - \eta_{1,2}^{(5)}, \quad (28)$$

e

$$\beta_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(6)} - \eta_{2,2}^{(5)} - \eta_{2,1}^{(5)}, \quad (29)$$

onde

$$\eta_{i,j}^{(k)} = \nu_{i,j}^{(k)} / \gamma_i. \quad (30)$$

De acordo com McCormack (McCormack, 1973), escreve-se

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha} n_\beta \Omega_{\alpha,\beta}^{11}, \quad (31)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^2 n_\beta (\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha,\beta}^{11}), \quad (32)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha,\beta}^{22}\right), \quad (33)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \Omega_{\alpha,\beta}^{22}\right), \quad (34)$$

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^3 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} \quad (35)$$

e

$$\nu_{\alpha,\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^3 \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta}\right)^{3/2} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)}, \quad (36)$$

com

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} = \Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \left(\frac{15m_\alpha}{4m_\beta} + \frac{25m_\beta}{8m_\alpha}\right) \Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \left(\frac{m_\beta}{2m_\alpha}\right) (5\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \Omega_{\alpha,\beta}^{13}), \quad (37)$$

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

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)} = -\Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \frac{55}{8}\Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \frac{5}{2}\Omega_{\alpha,\beta}^{12} + \frac{1}{2}\Omega_{\alpha,\beta}^{13}. \quad (38)$$

Aqui,

$$m_{\alpha,\beta} = m_{\alpha}m_{\beta}/(m_{\alpha} + m_{\beta}) \quad (39)$$

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

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{ij} = \frac{(j+1)!}{8} \left[1 - \frac{1+(-1)^i}{2(i+1)} \right] \left(\frac{\pi kT}{2m_{\alpha,\beta}} \right) (d_{\alpha} + d_{\beta})^2, \quad (40)$$

onde d_{α} é o diâmetro molecular da espécie α .

Segundo Siewert (Siewert e Valougeorgis, 2004b), introduz-se na Eq.(3) a variável espacial adimensional

$$\tau = \frac{x}{l_0}, \quad (41)$$

onde

$$l_0 = \frac{\mu v_0}{P_0} \quad (42)$$

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

$$v_0 = (2kT_0/m)^{1/2}, \quad (43)$$

onde

$$m = \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 + n_2} \quad (44)$$

representa a massa molecular média da mistura.

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

$$\mu = \frac{P_1}{\gamma_1} + \frac{P_2}{\gamma_2}, \quad (45)$$

onde

$$\frac{P_{\alpha}}{P_0} = \frac{n_{\alpha}}{n_1 + n_2}, \quad (46)$$

$$\gamma_1 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}}{\Psi_2 + \nu_{1,2}^{(4)}} \quad (47)$$

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

$$\gamma_2 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - \nu_{1,2}^{(4)} \nu_{2,1}^{(4)}}{\Psi_1 + \nu_{2,1}^{(4)}}. \quad (48)$$

Aqui,

$$\Psi_{\alpha} = \nu_{\alpha,\alpha}^{(3)} - \nu_{\alpha,\alpha}^{(4)} + \nu_{\alpha,\beta}^{(3)}, \quad \alpha = 1, 2, \quad \beta = 1, 2 \quad \text{e} \quad \beta \neq \alpha. \quad (49)$$

Por fim, por questão de notação introduz-se

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \omega_\alpha l_0 \quad (50)$$

ou, mais explicitamente,

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \frac{n_1/\gamma_1 + n_2/\gamma_2}{n_1 + n_2} (m_\alpha/m)^{1/2} \quad (51)$$

e reescreve-se a Eq.(3) em termos da variável τ como

$$S_\alpha(c) + c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) + \sigma_\alpha h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) = \sigma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(\tau, \mathbf{c}), \quad (52)$$

onde

$$S_1(c) = c_z [(c^2 - 5/2)x_T + x_P + (n_2/n)x_C] \quad (53)$$

e

$$S_2(c) = c_z [(c^2 - 5/2)x_T + x_P - (n_1/n)x_C], \quad (54)$$

com

$$x_A = l_0 X_A, \quad A = P, T, C. \quad (55)$$

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:

$$|v_{\alpha n}| f_\alpha(\mathbf{r}', \mathbf{v}) = \int_{v'_{\alpha n} < 0} |v'_{\alpha n}| R(\mathbf{v}'_\alpha : \mathbf{v}_\alpha) f_\alpha(\mathbf{r}', \mathbf{v}') d\mathbf{v}'_\alpha, \quad v_{\alpha n} \geq 0, \quad (56)$$

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, 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).

Na interação gás-superfície desse trabalho, utiliza-se o núcleo de espalhamento difuso-especular proposto por Maxwell (Sharipov e Seleznev, 1998), cuja expressão do α -ésimo constituinte da mistura é dado por:

$$R_{de}(\mathbf{v}'_\alpha : \mathbf{v}_\alpha) = \zeta_\alpha R_d + (1 - \zeta_\alpha) \delta(\mathbf{v}'_\alpha - \mathbf{v}_\alpha + 2\mathbf{n}v_{\alpha n}). \quad (57)$$

Aqui, δ é a função de Dirac, ζ_α conhecido como coeficiente de acomodação, representa a fração das partículas gasosas refletida difusamente e $(1 - \zeta_\alpha)$ corresponde a fração de partículas

refletidas especularmente, ambas do α -ésimo constituinte da mistura gasosa. Em uma versão linearizada da condição de contorno difuso-especular para problemas de fluxo de gases em um canal definido por $\tau \in [-a, a]$ em coordenadas cartesianas, é dada pela expressão

$$h_\alpha(-a, c_x, c_y, c_z) = (1 - \zeta_\alpha)h_\alpha(-a, -c_x, c_y, c_z) + \frac{2\zeta_\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(-a, -c'_x, c'_y, c'_z) dc'_x dc'_y dc'_z \quad (58)$$

e

$$h_\alpha(a, -c_x, c_y, c_z) = (1 - \zeta_\alpha)h_\alpha(a, c_x, c_y, c_z) + \frac{2\zeta_\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(a, c'_x, c'_y, c'_z) dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (59)$$

onde ζ_α é o coeficiente de acomodação e a expressão

$$\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(\mp a, \mp c'_x, c'_y, c'_z) dc'_x dc'_y dc'_z \quad (60)$$

denota o termo de difusidade.

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:

$$v_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) c_x dc_x dc_y dc_z. \quad (61)$$

Perfil de tensão de cisalhamento:

$$p_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) c_x c_z dc_x dc_y dc_z. \quad (62)$$

Perfil de fluxo de calor:

$$q_\alpha(y) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\alpha(y, c_x, c_y, c_z) (c^2 - 5/2) c_x dc_x dc_y dc_z. \quad (63)$$

4 DESENVOLVIMENTO

Conhecendo-se a definição das quantidades físicas de interesse em termos de momentos da função h , multiplica-se a Eq. (52), respectivamente, por

$$\phi_1(c_y, c_z) = \frac{1}{\pi} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} c_z \quad \text{e} \quad \phi_2(c_y, c_z) = \frac{1}{\pi} (c_y^2 + c_z^2 - 2) c_z e^{-(c_y^2 + c_z^2)}, \quad (64)$$

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

$$g_{2\alpha-1}(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z) h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) dc_y dc_z \quad (65)$$

e

$$g_{2\alpha}(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_z, \quad (66)$$

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

$$S(\xi) + \xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \mathbf{\Sigma} \mathbf{G}(\tau, \xi) = \mathbf{\Sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}_s(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (67)$$

com

$$\mathbf{\Sigma} = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_2\} \quad \text{e} \quad \psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2}. \quad (68)$$

Para a parte não homogênea tem-se:

$$S(\xi) = \begin{bmatrix} (1/2)[x_P + (n_2/n)x_C + x_T(\xi^2 - 1/2)] \\ x_T \\ (1/2)[x_P - (n_1/n)x_C + x_T(\xi^2 - 1/2)] \\ x_T \end{bmatrix}. \quad (69)$$

As componentes $K_{i,j}(\xi', \xi)$ do núcleo $K_s(\xi', \xi)$ são definidas como

$$k_{1,1}(\xi', \xi) = 2\varpi_1 \xi' \xi + 1 - \eta_{1,2}^{(1)} - \eta_{1,2}^{(2)}(\xi'^2 + \xi^2 - 1)/2 + 2\beta_1(\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (70)$$

$$k_{1,2}(\xi', \xi) = -(1/2)\eta_{1,2}^{(2)} + 2\beta_1(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (71)$$

$$k_{1,3}(\xi', \xi) = 2\eta_{1,2}^{(4)} \xi' \xi + r\{\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(2)}[r^2(\xi'^2 - 1/2) + \xi^2 - 1/2]/2\} + 2\eta_{1,2}^{(6)}(\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (72)$$

$$k_{1,4}(\xi', \xi) = (1/2)r^3\eta_{1,2}^{(2)} + 2\eta_{1,2}^{(6)}(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (73)$$

$$k_{2,1}(\xi', \xi) = -\eta_{1,2}^{(2)} + 4\beta_1(\xi'^2 - 1/2)/5, \quad (74)$$

$$k_{2,2}(\xi', \xi) = (4/5)\beta_1, \quad (75)$$

$$k_{2,3}(\xi', \xi) = r\eta_{1,2}^{(2)} + 4\eta_{1,2}^{(6)}(\xi'^2 - 1/2)/5, \quad (76)$$

$$k_{2,4}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}, \quad (77)$$

$$k_{3,1}(\xi', \xi) = 2\eta_{1,2}^{(4)} \xi' \xi + s\{\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(2)}[s^2(\xi'^2 - 1/2) + \xi^2 - 1/2]/2\} + 2\eta_{2,1}^{(6)}(\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (78)$$

$$k_{3,2}(\xi', \xi) = (1/2)s^3\eta_{2,1}^{(2)} + 2\eta_{2,1}^{(6)}(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (79)$$

$$k_{3,3}(\xi', \xi) = 2\varpi_2 \xi' \xi + 1 - \eta_{2,1}^{(1)} - \eta_{2,1}^{(2)}(\xi'^2 + \xi^2 - 1)/2 + 2\beta_2(\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (80)$$

$$k_{3,4}(\xi', \xi) = -(1/2)\eta_{2,1}^{(2)} + 2\beta_2(\xi^2 - 1/2)/5, \quad (81)$$

$$k_{4,1}(\xi', \xi) = s\eta_{2,1}^{(2)} + 4\eta_{2,1}^{(6)}(\xi'^2 - 1/2)/5, \quad (82)$$

$$k_{4,2}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}, \quad (83)$$

$$k_{4,3}(\xi', \xi) = \eta_{2,1}^{(2)} + 4\beta_2(\xi'^2 - 1/2)/5 \quad (84)$$

e

$$k_{4,4}(\xi', \xi) = (4/5)\beta_2. \quad (85)$$

A metodologia usada na obtenção da Eq. (67) é também aplicada nas condições de contorno Eqs. (58-59), obtendo-se

$$G(-a, \xi) = S_1 G(-a, -\xi) \quad e \quad G(a, -\xi) = S_2 G(a, \xi) \quad (86)$$

onde

$$S_\alpha = \text{diag}\{1 - \zeta_{\beta 1}, 1 - \zeta_{\beta 1}, 1 - \zeta_{\beta 2}, 1 - \zeta_{\beta 2}\}. \quad (87)$$

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

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

$$v_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) g_{2\alpha-1}(y, \xi) d\xi, \quad (88)$$

$$p_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) g_{2\alpha-1}(y, \xi) \xi d\xi \quad (89)$$

e

$$q_\alpha(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) [(\xi^2 - 1/2)g_{2\alpha-1}(y, \xi) + g_{2\alpha}(y, \xi)] d\xi. \quad (90)$$

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

$$U_\alpha = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a u_\alpha(\tau) d\tau \quad e \quad Q_\alpha = \frac{1}{2a^2} \int_{-a}^a q_\alpha(\tau) d\tau. \quad (91)$$

5 SOLUÇÃO DO PROBLEMA

Como a Eq.(67) 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,

$$G(\tau, \xi) = G_p(\tau, \xi) + G_h(\tau, \xi). \quad (92)$$

Para a solução particular propõem-se

$$G_p(\tau, \xi) = G_p^{(1)}(\tau, \xi) + G_p^{(2)}(\tau, \xi), \quad (93)$$

onde

$$G_p^{(1)}(\tau, \xi) = A\tau^2 + B\tau\xi + C\xi^2 + D \tag{94}$$

e

$$G_p^{(2)}(\tau, \xi) = \begin{bmatrix} E(\xi^2 - 1/2 - sw) \\ 2E \\ F(\xi^2 - 1/2 - rw) \\ 2F \end{bmatrix}. \tag{95}$$

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

$$A = \begin{bmatrix} a_1\sigma_1^2 \\ 0 \\ \lambda a_1\sigma_2^2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -2a_1\sigma_1 \\ 0 \\ -2\lambda a_1\sigma_2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad C = \begin{bmatrix} c_1 \\ 0 \\ c_2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad D = \begin{bmatrix} d_1 \\ 2c_1 - 4a_1 \\ 0 \\ 2c_3 - 4\lambda a_1 \end{bmatrix}, \tag{96}$$

onde as constantes estão definidas no sistema linear

$$M \begin{bmatrix} a_1 \\ c_1 \\ c_3 \\ d_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x_P + (n_2/n)x_C)/\sigma_1 \\ (x_P - (n_1/n)x_C)/\sigma_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{97}$$

Aqui,

$$M = \begin{bmatrix} 2 + 4\eta_{1,2}^{(2)}(1 - r^3\lambda) & -\eta_{1,2}^{(1)} - (5/2)\eta_{1,2}^{(2)} & r\eta_{1,2}^{(1)} + (5/2)r^3\eta_{1,2}^{(2)} & -2\eta_{1,2}^{(1)} \\ 2\lambda + 4\eta_{2,1}^{(2)}(\lambda - s^3) & s\eta_{2,1}^{(1)} + (5/2)s^3\eta_{2,1}^{(2)} & -\eta_{2,1}^{(1)} - (5/2)\eta_{2,1}^{(2)} & 2s\eta_{2,1}^{(1)} \\ -4 + (16/5)(\beta_1 + \lambda\eta_{1,2}^{(6)}) & 2(1 - \beta_1) + (1/2)\eta_{1,2}^{(2)} & -2\eta_{1,2}^{(6)} - (r/2)\eta_{1,2}^{(2)} & \eta_{1,2}^{(2)} \\ (16/5)\eta_{2,1}^{(6)} + [(16/5)\beta_2 - 4]\lambda & -2\eta_{2,1}^{(6)} - (s/2)\eta_{2,1}^{(2)} & 2(1 - \beta_2) + (1/2)\eta_{2,1}^{(2)} & -s\eta_{2,1}^{(2)} \end{bmatrix}, \tag{98}$$

sendo

$$\lambda = s(\sigma_1/\sigma_2)^2 \quad \text{e} \quad w = (5/4)r \frac{\nu_{1,2}^{(2)}}{\nu_{1,2}^{(1)}}. \tag{99}$$

As constantes E e F dadas na Eq.(95) são soluções do sistema linear

$$\begin{bmatrix} -\rho_1 + (5/8)[\eta_{1,2}^{(2)}]^2/\eta_{1,2}^{(1)} & \eta_{1,2}^{(6)} - (5/8)r^3[\eta_{1,2}^{(2)}]^2/\eta_{1,2}^{(1)} \\ \eta_{2,1}^{(6)} - (5/8)s^3[\eta_{2,1}^{(2)}]^2/\eta_{2,1}^{(1)} & -\rho_2 + (5/8)[\eta_{2,1}^{(2)}]^2/\eta_{2,1}^{(1)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = \frac{x_T}{2} \begin{bmatrix} 1/\sigma_1 \\ 1/\sigma_2 \end{bmatrix}, \tag{100}$$

onde

$$\rho_1 = \eta_{1,1}^{(5)} + \eta_{1,2}^{(5)} - \eta_{1,1}^{(6)} \quad \text{e} \quad \rho_2 = \eta_{2,2}^{(5)} + \eta_{2,1}^{(5)} - \eta_{2,2}^{(6)}. \tag{101}$$

Agora, encontra-se a solução homogênea da Eq.(92), 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. Propõe-se como solução para o problema homogêneo

$$G_h(\tau, \xi) = \Phi(\nu, \xi)e^{-\tau/\nu}, \quad (102)$$

onde ν é a constante de separação.

Substitui-se a Eq. (102) na Eq. (67), obtendo-se

$$(\nu\Sigma - \xi I)\Phi(\nu, \xi) = \nu\Sigma \int_0^\infty \psi(\xi')[K(\xi', \xi)\Phi(\nu, \xi) + K(-\xi', \xi)\Phi(\nu, -\xi)]d\xi' \quad (103)$$

e

$$(\nu\Sigma + \xi I)\Phi(\nu, -\xi) = \nu\Sigma \int_0^\infty \psi(\xi')[K(\xi', -\xi)\Phi(\nu, \xi) + K(-\xi', -\xi)\Phi(\nu, -\xi)]d\xi'. \quad (104)$$

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

$$V(\nu, \xi) = \frac{\nu}{\xi}\Sigma \left[U(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi')U(\nu, \xi')K_+(\xi', \xi)d\xi' \right] \quad (105)$$

e

$$U(\nu, \xi) = \frac{\nu}{\xi}\Sigma \left[V(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi')V(\nu, \xi')K_-(\xi', \xi)d\xi' \right], \quad (106)$$

onde

$$U(\nu, \xi) = \Phi(\nu, \xi) + \Phi(\nu, -\xi) \quad , \quad V(\nu, \xi) = \Phi(\nu, \xi) - \Phi(\nu, -\xi) \quad (107)$$

e

$$K_+(\xi', \xi) = K(\xi', \xi) + K(-\xi', \xi) \quad , \quad K_-(\xi', \xi) = K(\xi', \xi) - K(-\xi', \xi). \quad (108)$$

Substituindo a Eq.(106) na Eq.(105) obtém-se

$$\frac{1}{\xi^2} \left[\Sigma^2 V(\nu, \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi')\mathfrak{K}(\xi', \xi)V(\nu, \xi')d\xi' \right] = \lambda V(\nu, \xi), \quad (109)$$

onde

$$\lambda = \frac{1}{\nu^2} \quad (110)$$

e

$$\mathfrak{K}(\xi', \xi) = \frac{\xi}{\xi'}\Sigma^2 K_+(\xi', \xi) + \Sigma^2 K_-(\xi', \xi) - \int_0^\infty \psi(\xi'')\frac{\xi}{\xi''}\Sigma^2 K_+(\xi'', \xi)K_-(\xi', \xi'')d\xi''. \quad (111)$$

Aproxima-se o termo integral das Eqs.(106) e (109) pela fórmula de quadratura de Legendre, reescreve-se as equações como um problema de autovalores e autovetores

$$\frac{1}{\xi_i^2} \left[\Sigma^2 V(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k)\mathfrak{K}(\xi_k, \xi_i)V(\nu_j, \xi_k) \right] = \lambda_j V(\nu_j, \xi_i) \quad (112)$$

e

$$U(\nu_j, \xi_i) = \frac{\nu_j}{\xi_i}\Sigma \left[V(\nu_j, \xi_i) - \sum_{k=1}^N \omega_k \Psi(\xi_k)K_-(\xi_k, \xi_i)V(\nu_j, \xi_k) \right], \quad (113)$$

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

Com o problema de autovalores resolvido, encontra-se o valor de

$$\Phi(\nu_j, \xi_j) = \frac{1}{2}[U(\nu_j, \xi_i) + V(\nu_j, \xi_i)] \quad \text{e} \quad \Phi(\nu_j, -\xi_j) = \frac{1}{2}[U(\nu_j, \xi_i) - V(\nu_j, \xi_i)], \quad (114)$$

e das constantes ν_j de separação.

Tem-se como solução geral em ordenadas discretas para a Eq. (67) o seguinte

$$G_h(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-(a-\tau)/\nu_j}], \quad (115)$$

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

$$\mathbf{G}_h(\tau, \pm\xi_i) = A_1 \mathbf{G}_+ + B_1 \mathbf{G}_-(\tau, \pm\xi_i) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-(a-\tau)/\nu_j}], \quad (116)$$

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

$$\mathbf{G}_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ s \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{G}_-(\tau, \pm\xi) = \begin{bmatrix} \sigma_1 \tau \mp \xi \\ 0 \\ \sigma_1 s (\tau \mp \xi / \sigma_2) \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (117)$$

Para completar a solução substitui-se a Eq. (92) nas condições de contorno dadas pela Eq. (86) obtendo-se um sistema com $8N$ equações algébricas lineares e $8N$ incógnitas

$$A_1 G_+(I - S) + B_1 G_-(-a, \xi_i) - S B_1 G_-(-a, -\xi_i) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j [\Phi(\nu_j, \xi_i) - S \Phi(\nu_j, -\xi_i)] + B_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_i) - S \Phi(\nu_j, \xi_i)]] = -R_1^*(\xi) \quad (118)$$

e

$$A_1 G_+(I - S) + B_1 G_-(a, -\xi_i) - S B_1 G_-(a, \xi_i) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-2a/\nu_j} [\Phi(\nu_j, -\xi_i) - S \Phi(\nu_j, \xi_i)] + B_j [\Phi(\nu_j, \xi_i) - S \Phi(\nu_j, -\xi_i)]] = -R_2^*(\xi), \quad (119)$$

onde

$$R_1^*(\xi) = \begin{bmatrix} \zeta_{11} \sigma_1^2 a^2 a_1 + (2a_1 \sigma_1 a \xi_i)(2 - \zeta_{11}) + c_1 \xi_i^2 \zeta_{11} + d_1 \zeta_{11} + E(\xi_i^2 - 1/2 - sw) \zeta_{11} \\ (2c_1 - 4a_1) \zeta_{11} + 2E \zeta_{11} \\ \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 \zeta_{12} + 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_i (2 - \zeta_{12}) + c_3 \xi_i^2 \zeta_{12} + F \xi_i^2 - 1/2 - rw) \zeta_{12} \\ (2c_3 - 4\lambda a_1) \zeta_{12} + 2F \zeta_{12} \end{bmatrix} \quad (120)$$

e

$$R_2^*(\xi) = \begin{bmatrix} \zeta_{21}\sigma_1^2 a^2 a_1 + (2a_1\sigma_1 a \xi_i)(2 - \zeta_{21}) + c_1 \xi_i^2 \zeta_{21} + d_1 \zeta_{21} + E(\xi_i^2 - 1/2 - sw)\zeta_{21} \\ (2c_1 - 4a_1)\zeta_{21} + 2E\zeta_{21} \\ \lambda a_1 \sigma_2^2 a^2 \zeta_{22} + 2\lambda a_1 \sigma_2 a \xi_i (2 - \zeta_{22}) + c_3 \xi_i^2 \zeta_{22} + F \xi_i^2 - 1/2 - rw)\zeta_{22} \\ (2c_3 - 4\lambda a_1)\zeta_{22} + 2F\zeta_{22} \end{bmatrix} \quad (121)$$

Nota-se que, G possui quatro equações balanço com $i = 1, 2, \dots, N$ 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 desejadas, reescreve-se na versão de ordenadas discretas para os dois gases ($\alpha = 1, 2$), o perfil de velocidade, respectivamente,

$$u_1(\tau) = A_1 + B_1 \sigma_1 \tau + a_1 (\sigma_1 \tau)^2 + \frac{1}{2} c_1 + d_1 - swE + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{u,1}(\nu_j) \quad (122)$$

e

$$u_2(\tau) = A_1 s + B_1 s \sigma_1 \tau + \lambda a_1 (\sigma_2 \tau)^2 + \frac{1}{2} c_3 - rwF + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{u,2}(\nu_j) \quad (123)$$

o perfil de tensão de cisalhamento, respectivamente

$$p_1(\tau) = -a_1 \sigma_1 \tau - \frac{1}{2} B_1 + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} - B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{p,1}(\nu_j) \quad (124)$$

e

$$p_2(\tau) = -\lambda a_1 \sigma_2 \tau - B_1 \frac{s \sigma_1}{2 \sigma_2} + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} - B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{p,2}(\nu_j) \quad (125)$$

e o perfil do fluxo de calor, respectivamente

$$q_1(\tau) = -4a_1 + \frac{5}{2}(c_1 + E) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{q,1}(\nu_j) \quad (126)$$

e

$$q_2(\tau) = -4a_1 \lambda + \frac{5}{2}(c_3 + F) + \sum_{j=2}^{4N} [A_j e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j}] N_{q,2}(\nu_j). \quad (127)$$

Nas Eqs. (122)-(127) tem-se

$$N_{v,\alpha}(\nu_j) = \mathbf{F}_\alpha^T \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (128)$$

$$N_{p,\alpha}(\nu_j) = \mathbf{F}_\alpha^T \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \xi_k [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (129)$$

e

$$N_{q,\alpha}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \mathbf{F}_{q,\alpha}^T(\xi_k) [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)], \quad (130)$$

onde o sobrescrito T significa a operação transposta,

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_{q,1} = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (131)$$

e

$$\mathbf{F}_{q,2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (132)$$

6 RESULTADOS NUMÉRICOS

A implementação computacional, para avaliar os resultados numéricos, foi desenvolvida através de programas na linguagem FORTRAN. Segue-se os seguintes passos para implementar as soluções. Inicialmente, para calcular integrais no intervalo $[0, \infty)$, usa-se a transformação não-linear

$$u(\xi) = e^{-\xi} \quad (133)$$

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

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

Nas tabelas abaixo os resultados são encontrados com os coeficientes de acomodação de cada gás da placa 2 diferentes aos da placa 1, onde por sua vez, segundo o conhecimento dos autores não apresenta-se trabalhos relacionados ao mesmo na literatura. Apresenta-se nas tabelas, duas misturas de gases nobres, obtidos com $N = 60$ pontos de quadratura e em termos da concentração molar, é definida em relação a primeira partícula como

$$C = \frac{n_1/n_2}{1 + n_1/n_2}. \quad (134)$$

Nas tabelas 1 e 2 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 $d_2/d_1 = 1,406$. 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, impulsionado pelo gradiente de pressão (Problema de Poiseuille), temperatura (Creep térmico) e densidade (Problema difuso). Vale ressaltar que os coeficientes de acomodação são todos diferentes, ou seja, as placas possuem constituições químicas diferentes. Pode-se ver graficamente o comportamento das soluções, para o perfil de velocidade na Fig. 1 e o perfil do fluxo de calor na Fig. 2.

Já nas tabelas 3 e 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, impulsionado pelo gradiente

de pressão (Problema de Poiseuille), temperatura (Creep térmico) e densidade (Problema difuso). Os resultados foram obtidos nessas tabelas com os coeficientes de acomodação nas placas iguais. Pode-se ver graficamente o comportamento das soluções, para o perfil de velocidade na Fig. 3 e o perfil do fluxo de calor na Fig. 4.

Por fim, faz-se uma comparação dos resultados obtidos com o sistema para placas com constituições químicas diferentes com os resultados obtidos para placas com constituições químicas iguais encontrado por Siewert (Siewert e Valougeorgis, 2004b). Para isso, assume-se os coeficientes de acomodação em cada placa iguais, e compara-se os resultados, veja tabela 5.

7 FIGURAS

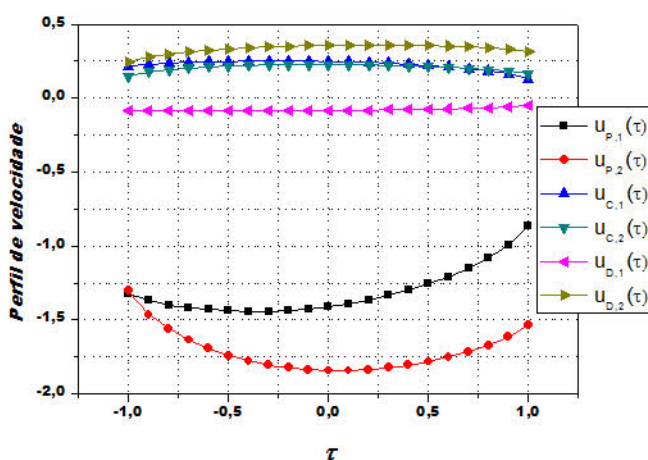


Figura 1: Perfil de velocidade para os problemas: Poiseuille, Creep térmico e Difuso, onde $2a = 1, 0$, $\zeta_{11} = 0, 3$, $\zeta_{12} = 0, 9$, $\zeta_{21} = 0, 7$, $\zeta_{22} = 0, 4$ e $C = 0, 8$ para uma mistura de gases Ne-Ar.

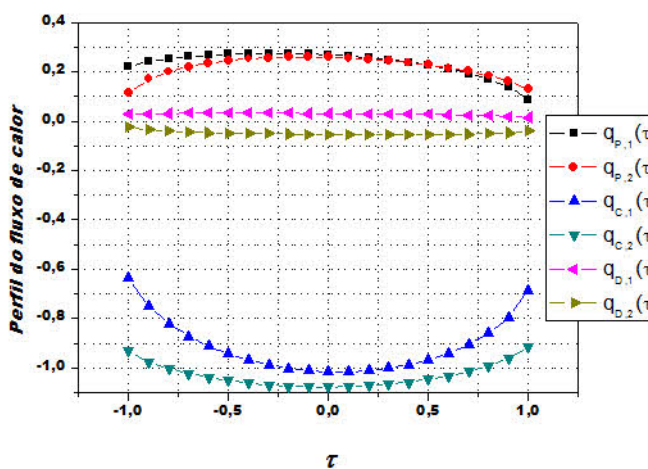


Figura 2: Perfil do fluxo de calor para os problemas: Poiseuille, Creep térmico e Difuso, onde $2a = 1, 0$, $\zeta_{11} = 0, 3$, $\zeta_{12} = 0, 9$, $\zeta_{21} = 0, 7$, $\zeta_{22} = 0, 4$ e $C = 0, 8$ para uma mistura de gases Ne-Ar.

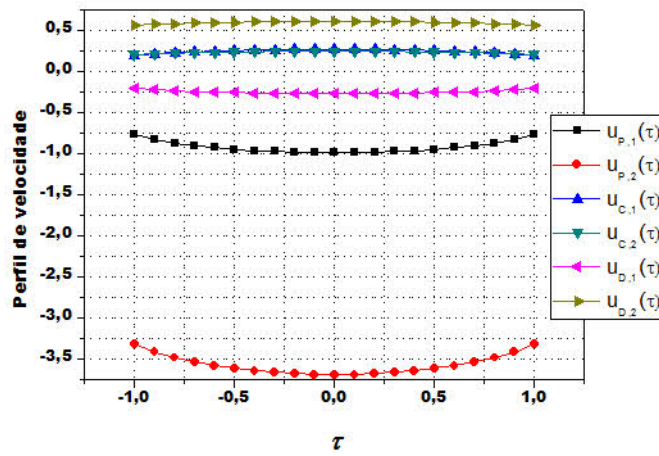


Figura 3: Perfil de velocidade para os problemas: Poiseuille, Creep térmico e Difuso, onde $2a = 1, 0$, $\zeta_{11} = 0, 7$, $\zeta_{12} = 0, 7$, $\zeta_{21} = 0, 3$, $\zeta_{22} = 0, 3$ e $C = 0, 5$ para uma mistura de gases He-Xe.

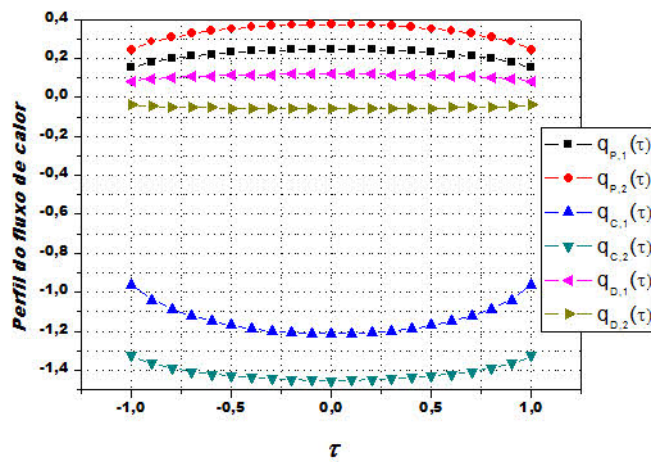


Figura 4: Perfil do fluxo de calor para os problemas: Poiseuille, Creep térmico e Difuso, onde $2a = 1, 0$, $\zeta_{11} = 0, 7$, $\zeta_{12} = 0, 7$, $\zeta_{21} = 0, 3$, $\zeta_{22} = 0, 3$ e $C = 0, 5$ para uma mistura de gases He-Xe.

8 TABELAS

τ/a	$u_{P,1}(\tau)$	$u_{P,2}(\tau)$	$u_{C,1}(\tau)$	$u_{C,2}(\tau)$	$u_{D,1}(\tau)$	$u_{D,2}(\tau)$
0,0	-1,40985	-1,84289	0,24897	0,22816	-0,08357	0,35713
0,1	-1,38999	-1,84268	0,24587	0,22697	-0,0822	0,35911
0,2	-1,36516	-1,83633	0,24166	0,22488	-0,08059	0,36013
0,3	-1,33504	-1,82399	0,23624	0,22188	-0,07872	0,36016
0,4	-1,29922	-1,80574	0,22948	0,21798	-0,07659	0,35914
0,5	-1,25708	-1,78153	0,22119	0,21313	-0,07412	0,35698
0,6	-1,20772	-1,7512	0,21108	0,20726	-0,07128	0,3535
0,7	-1,14968	-1,71431	0,19869	0,20025	-0,06794	0,34842
0,8	-1,08041	-1,6699	0,18321	0,19183	-0,06392	0,34124
0,9	-0,99431	-1,61538	0,16291	0,18141	-0,05883	0,33089
1,0	-0,86325	-1,53466	0,12902	0,16556	-0,05076	0,31233

Tabela 1: Perfil de velocidade para os problemas: Poiseuille, Creep térmico e Difuso, onde $2a = 1, 0$, $\zeta_{11} = 0, 3$, $\zeta_{12} = 0, 9$, $\zeta_{21} = 0, 7$, $\zeta_{22} = 0, 4$ e $C = 0, 8$ para uma mistura de gases Ne-Ar.

τ/a	$q_{P,1}(\tau)$	$q_{P,2}(\tau)$	$q_{C,1}(\tau)$	$q_{C,2}(\tau)$	$q_{D,1}(\tau)$	$q_{D,2}(\tau)$
0,0	0,26867	0,25836	-1,01509	-1,07675	0,03097	-0,05322
0,1	0,26373	0,25544	-1,01509	-1,07526	0,03046	-0,0536
0,2	0,2572	0,25089	-1,01053	-1,07158	0,02984	-0,05382
0,3	0,24894	0,24471	-1,00122	-1,06563	0,0291	-0,05388
0,4	0,23874	0,23685	-0,98677	-1,05724	0,02823	-0,05375
0,5	0,22633	0,22721	-0,9666	-1,04617	0,0272	-0,05339
0,6	0,21124	0,21561	-0,93976	-1,03204	0,02596	-0,05272
0,7	0,19279	0,2017	-0,90468	-1,01425	0,02445	-0,05162
0,8	0,16972	0,18487	-0,85858	-0,99173	0,02255	-0,04985
0,9	0,13927	0,16363	-0,79538	-0,96214	0,02001	-0,04688
1,0	0,08738	0,12951	-0,6853	-0,91372	0,01554	-0,04004

Tabela 2: Perfil do fluxo de calor para os problemas: Poiseuille, Creep térmico e Difuso, onde $2a = 1, 0$, $\zeta_{11} = 0, 3$, $\zeta_{12} = 0, 9$, $\zeta_{21} = 0, 7$, $\zeta_{22} = 0, 4$ e $C = 0, 8$ para uma mistura de gases Ne-Ar.

τ/a	$u_{P,1}(\tau)$	$u_{P,2}(\tau)$	$u_{C,1}(\tau)$	$u_{C,2}(\tau)$	$u_{D,1}(\tau)$	$u_{D,2}(\tau)$
0,0	-0,99062	-3,68866	0,26151	0,23917	-0,27173	0,60518
0,1	-0,98908	-3,68573	0,261	0,23889	-0,27132	0,6048
0,2	-0,98442	-3,6769	0,25947	0,23806	-0,27011	0,60365
0,3	-0,97653	-3,66206	0,25687	0,23665	-0,26805	0,60169
0,4	-0,96523	-3,64097	0,25311	0,23463	-0,26508	0,59888
0,5	-0,95019	-3,61329	0,24808	0,23195	-0,2611	0,59513
0,6	-0,93094	-3,57842	0,24157	0,22854	-0,25598	0,5903
0,7	-0,90666	-3,5354	0,23326	0,22425	-0,24946	0,58417
0,8	-0,87594	-3,48242	0,22255	0,21884	-0,24112	0,57636
0,9	-0,83565	-3,41535	0,20816	0,21176	-0,23002	0,566
1,0	-0,77049	-3,312	0,18377	0,20006	-0,21165	0,54892

Tabela 3: Perfil de velocidade para os problemas: Poiseuille, Creep térmico e Difuso, onde $2a = 1, 0$, $\zeta_{11} = 0, 7$, $\zeta_{12} = 0, 7$, $\zeta_{21} = 0, 3$, $\zeta_{22} = 0, 3$ e $C = 0, 5$ para uma mistura de gases He-Xe.

τ/a	$q_{P,1}(\tau)$	$q_{P,2}(\tau)$	$q_{C,1}(\tau)$	$q_{C,2}(\tau)$	$q_{D,1}(\tau)$	$q_{D,2}(\tau)$
0,0	0,24588	0,37428	-1,21202	-1,45205	0,11913	-0,0573
0,1	0,24529	0,37341	-1,2104	-1,45122	0,1189	-0,05722
0,2	0,24349	0,37078	-1,20549	-1,44871	0,11822	-0,05695
0,3	0,24043	0,36632	-1,19715	-1,44445	0,11705	-0,05649
0,4	0,23601	0,35993	-1,18512	-1,4383	0,11537	-0,05582
0,5	0,23007	0,3514	-1,16895	-1,43008	0,11311	-0,05489
0,6	0,22237	0,34045	-1,14799	-1,41946	0,11018	-0,05364
0,7	0,2125	0,32657	-1,12115	-1,40592	0,1064	-0,05196
0,8	0,19973	0,30884	-1,08647	-1,38854	0,10152	-0,04966
0,9	0,18245	0,28516	-1,03975	-1,36528	0,09489	-0,04632
1,0	0,15263	0,24431	-0,9606	-1,32618	0,08348	-0,03984

Tabela 4: Perfil do fluxo de calor para os problemas: Poiseuille, Creep térmico e Difuso, onde $2a = 1, 0$, $\zeta_{11} = 0, 7$, $\zeta_{12} = 0, 7$, $\zeta_{21} = 0, 3$, $\zeta_{22} = 0, 3$ e $C = 0, 5$ para uma mistura de gases He-Xe.

τ/a	$u_1(\tau)$	$u_2(\tau)$	$S - u_1(\tau)$	$S - u_2(\tau)$
0,0	-0,80065	-0,96144	-0,80065	-0,96144
0,1	-0,79828	-0,95832	-0,79828	-0,95832
0,2	-0,79114	-0,94893	-0,79114	-0,94893
0,3	-0,77909	-0,9331	-0,77909	-0,9331
0,4	-0,76189	-0,91053	-0,76189	-0,91053
0,5	-0,73916	-0,88077	-0,73916	-0,88077
0,6	-0,71028	-0,84306	-0,71028	-0,84306
0,7	-0,67425	-0,79617	-0,67425	-0,79617
0,8	-0,62924	-0,73784	-0,62924	-0,73784
0,9	-0,5712	-0,66308	-0,5712	-0,66308
1,0	-0,47977	-0,54631	-0,47977	-0,54631

Tabela 5: Fluxo de Poiseuille: perfil de velocidade para o caso $2a = 1, 0$, $\zeta_{11} = 1, 0$, $\zeta_{12} = 1, 0$, $\zeta_{21} = 1, 0$, $\zeta_{22} = 1, 0$ e $C = 0, 5$ para uma mistura de gases He-Xe. Aqui $S - u_{1,2}(\tau)$ são as velocidades obtidas por Siewert.

9 CONCLUSÃO

Considera-se que o objetivo deste trabalho foi alcançado, pois encontrou-se resultados numéricos para as grandezas macroscópicas dos três problemas de transferência de massa em um canal plano, que segundo o conhecimento dos autores, ainda não estão disponíveis na literatura. Além disso, este trabalho tem relevante contribuição para o prosseguimento de estudos na dinâmica de gases rarefeito.

Os resultados obtidos analiticamente e numericamente estão corretos, pois utilizando-se os mesmos valores para os coeficientes de acomodação, ou apenas os valores relacionados a cada placa (placas com constituição químicas iguais), obtém-se os mesmos resultados dos encontrados na Ref. (Siewert e Valougeorgis, 2004b).

10 AGRADECIMENTOS

Os autores A. Tres e R. F. Knackfuss agradecem, respectivamente, a CAPES e ao FIPE/UFMS 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, 1999.
- Bhatnagar P.L., Gross E.P., e Krook M.A. A model for collision processes in gases. *Physical Review*, 94:511–525, 1954.
- Bird G.A. *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, volume I. Oxford University Press, Oxford, 1994.
- Boltzmann L. *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen*, volume I. Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften, 1872.
- Cabrera L.C. e Barichello L.B. Unified solutions to some classical problems in rarefied gas dynamic based on the one-dimensional linearized s-model equations. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, 57:285–312, 2006.
- Camargo M. e Barichello L.B. Unified approach for variable collision frequency models in rarefied gas dynamic. *Transport Theory and Statistical Physics*, 33:227–260, 2004.

- Cercignani C. *The Boltzmann equation and its application*, volume I. Springer-Verlag New York Inc., 1988.
- 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.
- Hamel B.B. Kinetic model for binary gas mixture. *Physics of Fluids*, 8:418–425, 1965.
- 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.
- McClury R.G. e W. A.I.T. Thermomagnetic torque in deuterium gas. *Journal of Chemical Physics*, 54:1678–1682, 1971.
- McCormack F.J. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases. *Physics of Fluids*, 16:2095–2105, 1973.
- Morse T.F. Kinetic model equations for a gas mixture. *Physics of Fluids*, 7:2012–2013, 1964.
- Pan S. e Storvick S. Kinetic theory calculations of pressure effects of diffusion. *Journal of Chemical Physics*, 97:2671–2681, 1992.
- Shakhov E.M. *Method of investigation of rarefield gas flows*. Nauka, Moscow, 1974.
- 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. Poiseuille, thermal creep and couette flow: results based on the ces model of the linearized boltzmann equation. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 21:579–597, 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.
- Sirovich L. Kinetic modeling of gas mixture. *Physics of Fluids*, 5:908–918, 1962.
- Williams M.M.R. *Mathematical methods in particle transport theory*, volume I. Butterworth, London, 1971.