

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

GUILHERME BERTOLDO

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE BOLTZMANN
LINEARIZADA COM BASE NO POTENCIAL DE LENNARD-JONES.
ESCOAMENTO DE POISEUILLE E RASTEJO TÉRMICO.

CURITIBA

2009

GUILHERME BERTOLDO

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE BOLTZMANN
LINEARIZADA COM BASE NO POTENCIAL DE LENNARD-JONES.
ESCOAMENTO DE POISEUILLE E RASTEJO TÉRMICO.

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação
em Física do Setor de Ciências Exatas da Universi-
dade Federal do Paraná, como requisito parcial para
a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Felix Sharipov

CURITIBA

2009

Resumo

O escoamento de gases rarefeitos induzido por gradientes longitudinais de temperatura e pressão em um canal formado por placas planas paralelas foi determinado através da resolução da equação de Boltzmann linearizada com base no potencial de Lennard-Jones. O procedimento numérico aplicado foi elaborado de modo a permitir seu emprego a outros potenciais de interação molecular. Este procedimento também foi aplicado ao cálculo dos coeficientes de condutividade térmica e de viscosidade e seus resultados foram comparados com aqueles fornecidos pelo método de Chapman-Cowling. O desvio relativo entre os resultados dos métodos não excede 0,6%. A influência do potencial intermolecular no transporte de massa e energia pelo canal foi avaliada através da comparação entre os resultados fornecidos pelo potencial de esferas rígidas e de Lennard-Jones. Verificou-se que o desvio relativo destes resultados pode ultrapassar 19% em alguns regimes de rarefação e que os fenômenos de transporte dependem significativamente da espécie molecular que compõe o gás. Por fim, a incerteza introduzida pelos modelos S e BGK em relação à equação de Boltzmann foi determinada por comparação com os resultados referentes ao potencial de Lennard-Jones. Constatou-se que o modelo S é o mais apropriado para tratar problemas não-isotérmicos e que a incerteza introduzida por este modelo tem a mesma ordem de grandeza daquela introduzida pela própria equação de Boltzmann com base no potencial de esferas rígidas.

Abstract

The flow of a rarefied gas driven by longitudinal temperature and pressure gradients in a channel formed by parallel plates was determined through the solution of the linearized Boltzmann equation based on the Lennard-Jones potential. A numerical procedure was elaborated in such a way to allow its application to other intermolecular potentials. The procedure was also applied to calculation of the thermal conductivity and viscosity coefficients and its results were compared with those given by the Chapman-Cowling method. The relative deviation of the results obtained by these methods do not exceed 0.6%. The influence of the intermolecular potential on the mass and energy transfer through the channel was studied through a comparison of the results given by the hard spheres and the Lennard-Jones potential. It was verified that the relative deviation of these results can be greater than 19% in some rarefaction regimes and that the transport phenomena depend significantly on the gas molecular species. Finally, the uncertainty introduced by the S and BGK models, relatively to the Boltzmann equation, was determined through the comparison with the results for the Lennard-Jones potential. It was confirmed that the S model is the most appropriate to deal with non-isothermal problems and that the uncertainty introduced by this model has the same magnitude of that introduced by the Boltzmann equation based on the hard sphere potential.

AGRADECIMENTOS

À minha família e em especial à minha mãe Vera Maria Zanella.

Ao professor Dr. Felix Sharipov pela orientação.

A todos os contribuintes brasileiros e ao CNPq pela bolsa de pesquisa.

Sumário

1	Introdução	1
2	Conceitos básicos em Dinâmica dos Gases Rarefeitos	4
2.1	A função de distribuição	4
2.2	A equação de Boltzmann	5
2.3	Dinâmica de colisões binárias	6
2.4	Energia potencial de interação	7
2.5	Interação gás-superfície	9
2.6	Solução no estado de equilíbrio	10
2.7	A equação de Boltzmann linearizada	11
2.8	Operador de colisões	14
2.9	Coefficientes de transporte	14
2.9.1	Coefficiente de condutividade térmica	15
2.9.2	Coefficiente de viscosidade	16
2.9.3	A aproximação de Chapman-Cowling	17
2.10	Modelos para a equação de Boltzmann	19
3	Revisão bibliográfica	21
3.1	Coefficientes de transporte	21
3.2	Escoamentos unidimensionais e de simetria axial	24
4	O operador de colisões	27
4.1	A seção de choque diferencial	27
4.1.1	Parametrização	27
4.1.2	Ângulo de espalhamento	28
4.1.3	Cálculo da seção de choque diferencial	36

4.2	Cálculo do operador de colisões	40
4.2.1	Parametrização	40
4.2.2	Metodologia de cálculo do núcleo	41
4.2.3	Metodologia de cálculo do operador de colisões	42
5	Coefficientes de transporte	43
5.1	Método de Chapman-Cowling	43
5.1.1	Parametrização	43
5.1.2	Cálculo das integrais $\Omega^{(l,r)*}$	44
5.1.3	Resultados	45
5.2	Solução numérica direta	47
5.2.1	Parametrização	47
5.2.2	Redução de variáveis	49
5.2.3	Procedimento numérico	52
5.2.4	Aplicação ao potencial de esferas rígidas	55
5.2.5	Aplicação ao potencial de Lennard-Jones	56
6	Escoamento entre placas planas paralelas induzido por gradientes de pressão e temperatura	58
6.1	Descrição do problema	58
6.2	Parametrização	61
6.3	Procedimento numérico	62
6.4	Aplicação ao potencial de esferas rígidas	64
6.5	Aplicação ao potencial de Lennard-Jones	65
7	Conclusão	73
	Bibliografia	75
A	Linearização	80
A.1	Linearização da equação de Boltzmann	80
A.2	Linearização dos momentos da função de distribuição	81
A.2.1	Densidade numérica	81
A.2.2	Velocidade hidrodinâmica	82

A.2.3	Tensor tensão	82
A.2.4	Pressão	83
A.2.5	Temperatura	83
A.2.6	Fluxo de calor	84
A.3	Linearização das condições de contorno	85
A.4	Linearização em torno da maxwelliana de referência	87

Capítulo 1

Introdução

Em 1872, L. Boltzmann publicou um artigo [1] (cap. 1) no qual derivara uma equação capaz de descrever estatisticamente a evolução temporal do estado de um gás fora do equilíbrio. Esta equação, atualmente conhecida como equação de Boltzmann, completava e consolidava os trabalhos iniciados por Maxwell [1] (cap. 1) e tornou-se a base da Teoria Cinética dos Gases.

Embora a teoria estivesse consolidada, o problema de encontrar as soluções para a equação de Boltzmann ainda estava em aberto. A dificuldade, de cunho matemático, estava associada ao fato desta equação ser uma equação integro-diferencial-parcial não-linear. No limiar do século XX, Hilbert, Chapman e Enskog [1] (cap. 5), independentemente, desenvolveram métodos de sucessivas aproximações para resolver a equação de Boltzmann. A aproximação de primeira ordem do método de Chapman-Enskog fornecia as equações da hidrodinâmica e estabelecia uma relação entre a Teoria Cinética dos Gases e os coeficientes de transporte (coeficientes de viscosidade, de condutividade térmica e de difusão).

Não obstante os métodos de Hilbert, Chapman e Enskog pudessem fornecer a solução da equação de Boltzmann, o número de aproximações necessárias para resolver certos problemas de maneira satisfatória poderia ser grande o suficiente para tornar suas aplicações inexecutáveis. Era então necessário um método alternativo. Posto que o principal entrave à resolução da equação de Boltzmann é a integral de colisões, alguns modelos foram propostos com o intuito de substituí-la por uma expressão simplificada. Devido à sua simplicidade em relação à equação de Boltzmann, os modelos tornaram-se amplamente utilizados.

Ainda que os modelos tornem a resolução de numerosos problemas factível, os resultados fornecidos por eles podem divergir daqueles esperados pela equação de Boltzmann, visto que tratam a integral de colisões de maneira aproximada. A avaliação de quão grande é a desconcordância só pode ser feita se a solução da equação de Boltzmann for conhecida. Por este motivo as pesquisas em métodos de resolução da equação de Boltzmann continuaram. Alguns pesquisadores [2, 3] dedicaram-se a procurar soluções para a equação de Boltzmann linearizada. Os primeiros avanços na resolução da equação de Boltzmann linearizada foram feitos quase simultaneamente, e de maneira independente, pelos grupos liderados por Loyalka [3] nos EUA e Sone [2] no Japão no fim da década de 1980. Estes grupos resolveram numericamente diversos problemas unidimensionais assumindo que as moléculas comportavam-se como esferas rígidas.

Alguns fatos, contudo, sugerem que os fenômenos de transporte em gases podem depender significativamente do potencial intermolecular. Loyalka [4] calculou os coeficientes de deslizamento e de salto de temperatura através do cálculo variacional e mostrou que o potencial intermolecular era capaz de induzir uma diferença de até 15% nos resultados. Além disso, mostrou que o potencial de Lennard-Jones [1] (cap. 8) fornecia resultados em boa concordância com os dados experimentais. Sharipov [5] ao avaliar a influência da interação gás-superfície nos mesmos coeficientes observou que a incompatibilidade entre os resultados teóricos e experimentais talvez pudesse ser explicada com base na equação de Boltzmann para um potencial mais realístico, como o potencial de Lennard-Jones. Exceto por alguns artigos [4, 6] baseados no cálculo variacional, não existem trabalhos dedicados a este fim.

Atualmente existem poucos grupos de pesquisa no mundo que dominam as técnicas de resolução da equação de Boltzmann. Mas por que é importante dominá-las? A resposta pode ser vista sob dois aspectos. O primeiro é puramente acadêmico. Talvez fenômenos físicos inusitados possam ser descobertos com a resolução da equação de Boltzmann. O segundo aspecto é tecnológico. A equação de Boltzmann tem uma ampla faixa de aplicação. É possível usá-la na descrição da dinâmica de gases em microcanais, em escoamentos em equipamentos de vácuo, em aerodinâmica, entre outros.

Tendo em vista a importância da equação de Boltzmann, este trabalho objetiva desenvolver um procedimento numérico que permita resolvê-la com base em qualquer potencial intermolecular. Este procedimento será restrito aos casos em que tal equação possa

ser linearizada. Além disso, uma vez elaborado o referido procedimento, o problema de escoamento de um gás rarefeito através de um canal formado por placas planas paralelas (escoamento de Poiseuille e rastejo térmico planos) será determinado através da resolução da equação de Boltzmann linearizada com base no potencial de Lennard-Jones. Os resultados deste problema permitirão analisar a influência da lei de força intermolecular no transporte de massa e energia induzidos por gradientes de pressão e temperatura. Além disso, os desvios de certos modelos da equação de Boltzmann em relação à própria serão determinados. A metodologia empregada será avaliada com a obtenção dos coeficientes de viscosidade e de condutividade térmica.

A estrutura deste trabalho está organizada da seguinte maneira. No capítulo 2 a fundamentação teórica acerca da equação de Boltzmann é descrita. O capítulo 3 apresenta de modo mais detalhado os principais avanços realizados na resolução desta equação até o momento. Nos capítulos 4, 5 e 6 as metodologias e resultados propostos para este trabalho são apresentados. O capítulo 7 encerra a dissertação com as conclusões deste e perspectivas para próximos trabalhos.

Capítulo 2

Conceitos básicos em Dinâmica dos Gases Rarefeitos

2.1 A função de distribuição

De acordo com a Mecânica Clássica, o estado de um sistema de partículas é determinado em qualquer instante t se a posição e a velocidade de cada partícula que o compõe for conhecida neste instante. O estado posterior é, então, obtido pela evolução temporal do estado inicial através das equações de movimento. Ocorre que em um gás o número de partículas que o compõem é tão grande (da ordem de 10^{25}m^{-3} nas condições normais de temperatura (0°C) e pressão (1 atm)) que, apesar de formalmente possível, é inviável tratar o problema através dos métodos da Mecânica Clássica. Um tratamento alternativo consiste em estudar apenas de maneira estatística a dinâmica do gás. Neste caso o estado do sistema é descrito pela função de distribuição de velocidades $f(t, \mathbf{r}', \mathbf{v})$. Esta função é definida de maneira que no instante t o número provável de partículas dN no elemento de volume $d\mathbf{r}'$ em torno de \mathbf{r}' e com velocidade no elemento de volume $d\mathbf{v}$ em torno de \mathbf{v} , seja dado por

$$dN = f(t, \mathbf{r}', \mathbf{v})d\mathbf{r}'d\mathbf{v}. \quad (2.1)$$

Se a função de distribuição de velocidades for conhecida, então as grandezas termodinâmicas do gás podem ser obtidas como momentos apropriados desta função [1, 7, 8].

Por exemplo:

- Densidade numérica (número de partículas por unidade de volume):

$$n(t, \mathbf{r}') = \int f(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad (2.2)$$

- Velocidade hidrodinâmica:

$$\mathbf{u}'(t, \mathbf{r}') = \frac{1}{n} \int \mathbf{v} f(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad (2.3)$$

- Pressão:

$$P(t, \mathbf{r}') = \frac{m}{3} \int V^2 f(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad (2.4)$$

- Tensor tensão:

$$P_{ij}(t, \mathbf{r}') = m \int V_i V_j f(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad (2.5)$$

- Temperatura:

$$T(t, \mathbf{r}') = \frac{m}{3nk} \int V^2 f(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad (2.6)$$

- Fluxo de calor:

$$\mathbf{q}'(t, \mathbf{r}') = \frac{m}{2} \int V^2 \mathbf{V} f(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad (2.7)$$

onde m é a massa molecular, k é a constante de Boltzmann e \mathbf{V} é a velocidade peculiar, dada por

$$\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}'. \quad (2.8)$$

As equações (2.2), (2.4) e (2.6) satisfazem a equação de estado de um gás ideal

$$P = nkT. \quad (2.9)$$

2.2 A equação de Boltzmann

A descrição estatística do problema somente fica completa se a função de distribuição for especificada. L. Boltzmann [1] (cap. 3), em 1872, derivou uma equação para a evolução temporal de f , a partir da qual a função de distribuição pode ser determinada.

Para gases monoatômicos a equação de Boltzmann é escrita como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}'} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = Q(ff_*), \quad (2.10)$$

onde \mathbf{F} é uma força externa impressa sobre uma partícula do gás e $Q(ff_*)$ é a integral de colisões, a qual expressa a taxa de variação temporal da função de distribuição devido às

colisões moleculares e, portanto, depende de como as moléculas interagem. A expressão para $Q(ff_*)$ será apresentada na próxima seção, juntamente com a discussão sobre a dinâmica de colisões moleculares.

2.3 Dinâmica de colisões binárias

Para gases monoatômicos é plausível supor que as moléculas interajam por uma força central e conservativa. A dinâmica de uma colisão binária sob tais condições pode ser reduzida ao clássico problema de “movimento num campo de força central”, veja por exemplo a ref. [9]. De acordo com os resultados deste problema, as velocidades finais de duas partículas colidentes, denotadas pelo par ordenado $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_*)$, dependem apenas de suas velocidades iniciais $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_*)$ e de dois ângulos, o ângulo de espalhamento χ e o ângulo que determina o plano de colisão ϵ . Estes ângulos relacionam o vetor velocidade relativa pré-colisional $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_*$ ao vetor velocidade relativa pós-colisional $\mathbf{g}' = \mathbf{v}' - \mathbf{v}'_*$. O esquema do movimento relativo das moléculas é ilustrado na fig. 2.1, onde um referencial não-inercial é definido sobre uma das partículas -denominada “partícula-alvo”- enquanto a outra, -a “partícula-bala”-, aproxima-se à primeira com velocidade relativa \mathbf{g} . Se as partículas não interagissem, a menor distância entre elas seria b' , o chamado parâmetro de impacto. Devido à interação, a trajetória retilínea inicial é alterada, as partículas alcançam uma distância crítica de máxima aproximação ρ_m , para a qual a velocidade radial da partícula-bala é nula, e então se afastam de modo que a trajetória tende assintoticamente a uma reta caracterizada pelo ângulo de espalhamento χ .

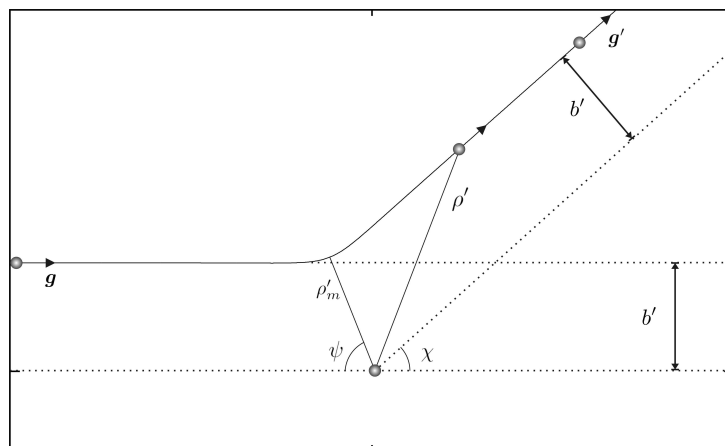


Figura 2.1: Esquema do movimento relativo numa colisão binária.

O ângulo de espalhamento χ é definido no intervalo $[0, \pi]$, ao passo que o ângulo de deflexão ψ , relacionado a χ por $\cos(2\psi) = \cos(\pi - \chi)$, pode assumir qualquer valor não-negativo. O ângulo de deflexão é calculado por

$$\psi = b' \int_{\rho_m}^{\infty} \frac{1}{\rho^2} \left[1 - \left(\frac{b'}{\rho} \right)^2 - \frac{4U(\rho)}{mg^2} \right]^{-1/2} d\rho, \quad (2.11)$$

onde $U(\rho)$ é a energia potencial de interação entre as moléculas, -ou apenas “potencial de interação”. Mais informações sobre este potencial serão dadas a seguir. A distância de maior aproximação ρ_m é a maior raiz da seguinte equação:

$$1 - \left(\frac{b'}{\rho} \right)^2 - \frac{4U(\rho)}{mg^2} = 0. \quad (2.12)$$

Para moléculas interagindo através de um potencial central, a integral de colisões é escrita como [1, 8, 10, 11]

$$Q(ff_*) = \int (f'_*f' - ff_*) g \sigma'(g, \chi) \text{sen } \chi d\chi d\epsilon d\mathbf{v}_*, \quad (2.13)$$

onde os índices em f denotam os índices da velocidade em seu argumento e $\sigma'(g, \chi)$ é a seção de choque diferencial.

Classicamente, a seção de choque diferencial $\sigma'(\boldsymbol{\Omega})$ é definida de maneira que $\sigma'(\boldsymbol{\Omega})d\boldsymbol{\Omega}$ seja a razão entre o número de partículas espalhadas no ângulo sólido $d\boldsymbol{\Omega}$, em torno da direção $\boldsymbol{\Omega}$, por unidade de tempo e intensidade incidente de partículas. Para partículas interagindo através de um campo de força central, esta definição se reduz a [9, 12]:

$$\sigma'(g, \chi) = \frac{1}{\text{sen } \chi} \sum_i b'_i \left| \frac{\partial \chi'(g, b')}{\partial b'} \right|_{b'_i}^{-1} \quad (2.14)$$

onde os b'_i são as raízes de $\chi'(g, b') = \chi$.

2.4 Energia potencial de interação

O potencial de interação molecular U é uma relação constitutiva em Teoria Cinética dos Gases. A rigor, a expressão para U deveria advir da Mecânica Quântica, entretanto, devido à complexidade do tratamento matemático necessário para se obter tal relação, alguns modelos teóricos e semi-empíricos são adotados. Alguns destes modelos são listados abaixo.

- **Esferas rígidas**

De acordo com este modelo, as moléculas comportam-se como esferas rígidas de diâmetro d . O potencial de interação escreve-se

$$U(\rho) = \begin{cases} 0 & \text{se } \rho > d, \\ \infty & \text{se } \rho \leq d. \end{cases} \quad (2.15)$$

Usualmente o parâmetro d é determinado de modo experimental através dos coeficientes de transporte.

- **Centro de repulsão**

O potencial “centro de repulsão” considera que a força de interação molecular é exclusivamente repulsiva e decai de acordo com uma lei de potência. A expressão matemática para este potencial é [1] (cap. 8)

$$U(\rho) = \left(\frac{\rho_r}{\rho} \right)^n, \quad (2.16)$$

onde ρ_r e n são parâmetros materiais, isto é, determinados experimentalmente para cada gás.

- **Lennard-Jones**

O potencial proposto por John Edward Lennard-Jones [1] (cap. 8), por outro lado, leva em conta tanto a repulsão intermolecular que ocorre de modo substancial quando as moléculas estão muito próximas, quanto a atração, causada pelas forças de dipolo elétrico, que se destaca quando as moléculas estão muito afastadas. A expressão para este potencial é

$$U(\rho) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{12} - \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^6 \right], \quad (2.17)$$

onde ρ_0 e ε são parâmetros materiais. Os parâmetros deste potencial para gases nobres, de acordo com a ref. [10], estão dispostos na tab. 2.1. Estes parâmetros foram obtidos através de medidas experimentais do coeficiente de viscosidade.

Um levantamento bibliográfico mais detalhado de modelos de potencial pode ser encontrado na ref. [1].

Tabela 2.1: Parâmetros materiais do potencial de Lennard-Jones para os gases nobres, ref. [10].

Gás	$\varepsilon/k(\text{K})$	ρ_0 (nm)
He	10,22	0,2576
Ne	35,7	0,2789
Ar	124	0,3418
Kr	190	0,361
Xe	229	0,4055

2.5 Interação gás-superfície

Freqüentemente os gases são limitados por superfícies, as quais impõem condições de contorno à função de distribuição. A fim de descrever matematicamente esta interação, considere um elemento diferencial de superfície localizado em \mathbf{r}'_s , cujo vetor normal \mathbf{n} aponta na direção do gás (vide fig. 2.2). Nesta seção assume-se que a parede está em repouso em relação ao sistema coordenado. A função de distribuição de velocidades $f(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v})$ das partículas que deixam a parede após a interação ($\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0$) está relacionada a função de distribuição de velocidade $f(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v}_*)$ das partículas incidentes ($\mathbf{v}_* \cdot \mathbf{n} < 0$) por [1, 7]:

$$f(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v}) = -\frac{1}{v_n} \int_{v_{*n} < 0} v_{*n} R(\mathbf{v}_* \rightarrow \mathbf{v}) f(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v}_*) d\mathbf{v}_*, \quad v_n > 0, \quad v_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}, \quad (2.18)$$

onde $R(\mathbf{v}_* \rightarrow \mathbf{v})$ é o núcleo de espalhamento, o qual fornece a densidade de probabilidade de que a velocidade de uma molécula seja alterada de \mathbf{v}_* , imediatamente antes da colisão com a parede, para \mathbf{v} , imediatamente após a colisão.

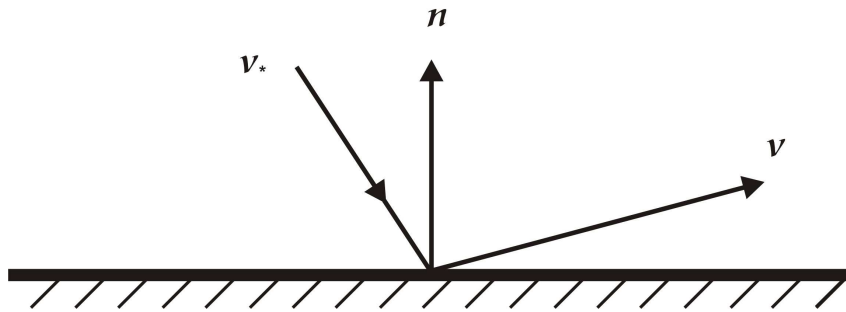


Figura 2.2: Esquema da interação gás-superfície.

O núcleo de espalhamento possui as seguintes propriedades [7]:

- *Normalização:*

$$\int_{v_n > 0} R(\mathbf{v}_* \rightarrow \mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1, \quad v_{*n} < 0; \quad (2.19)$$

- *Não-negatividade:*

$$R(\mathbf{v}_* \rightarrow \mathbf{v}) \geq 0; \quad (2.20)$$

- *Reciprocidade:*

$$\begin{aligned} & \mathcal{H}(-v_{*n}) |v_{*n}| \exp\left(-\frac{mv_*^2}{2kT_w}\right) R(\mathbf{v}_* \rightarrow \mathbf{v}) \\ = & \mathcal{H}(v_n) |v_n| \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT_w}\right) R(-\mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}_*), \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde \mathcal{H} é a função degrau de Heaviside.

A propriedade (2.21) é verdadeira se a superfície estiver em equilíbrio local com temperatura T_w .

O núcleo de espalhamento mais usado é o difuso:

$$R(\mathbf{v}_* \rightarrow \mathbf{v}) = \frac{m^2 v_n}{2\pi(kT_w)^2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT_w}\right). \quad (2.22)$$

Este núcleo não depende da velocidade das moléculas antes da colisão com a parede e estabelece que não existe direção preferencial para a velocidade das moléculas espalhadas.

Embora existam outros núcleos de espalhamento, as aplicações deste trabalho estarão limitadas ao uso do núcleo difuso.

2.6 Solução no estado de equilíbrio

No mesmo artigo de 1872 [1] (cap. 4), acerca da equação que descreve a evolução temporal da função de distribuição, Boltzmann demonstrou o teorema-H. Sob a hipótese de que a função de distribuição não depende das coordenadas espaciais e que não existem forças externas atuando sobre as moléculas, este teorema estabelece que a quantidade H , definida por

$$H = \int f \ln f d\mathbf{v}, \quad (2.23)$$

deve satisfazer

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \quad (2.24)$$

H é uma quantidade proporcional à entropia do sistema. A eq. (2.24) está de acordo com a segunda lei da Termodinâmica.

Sob as condições impostas acima, é possível mostrar [1] a partir do teorema-H que o sistema gasoso tende a um estado de equilíbrio quando $t \rightarrow \infty$. Supondo que tal estado de equilíbrio seja caracterizado por uma densidade de número n_0 , temperatura T_0 e velocidade hidrodinâmica \mathbf{u}'_0 uniformes, então a função de distribuição deste estado é dada por

$$f_0(\mathbf{v}) = \pi^{-3/2} \frac{n_0}{v_m^3} \exp \left[-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_m^2} \right], \quad v_m = \sqrt{\frac{2kT_0}{m}}, \quad (2.25)$$

denominada maxwelliana, em homenagem a Maxwell, quem primeiramente a derivou. A constante v_m é a velocidade molecular mais provável.

2.7 A equação de Boltzmann linearizada

Se o estado do gás é apenas fracamente removido do seu estado de equilíbrio, caracterizado pela função f_0 , eq. (2.25), é plausível expandir a função de distribuição f em torno da maxwelliana de equilíbrio. Em algumas situações, contudo, é conveniente expandir a função de distribuição em torno da maxwelliana de referência f_R , caracterizada por uma densidade de referência $n_R(\mathbf{r}')$, temperatura de referência $T_R(\mathbf{r}')$ e velocidade hidrodinâmica de referência $\mathbf{u}'_R(\mathbf{r}')$, *i.e.*,

$$f = f_R (1 + \xi h), \quad (2.26)$$

onde ξ é um parâmetro pequeno que caracteriza a perturbação, h é a função de perturbação a ser determinada e f_R é dada por

$$f_R(\mathbf{r}', \mathbf{v}) = n_R \left(\frac{m}{2\pi k T_R} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u}'_R)^2}{2k T_R} \right]. \quad (2.27)$$

O procedimento de linearização que conduz aos resultados apresentados nesta seção é apresentado com detalhes no apêndice A. Deve-se observar que nestas derivações é assumido que não existem forças externas sobre as moléculas.

De uma maneira formal n_R , T_R e \mathbf{u}'_R podem ser expressos, respectivamente, como desvios da densidade n_0 , da temperatura T_0 e da velocidade hidrodinâmica \mathbf{u}'_0 de equilíbrio, isto é,

$$n_R = n_0 [1 + \mathcal{O}(\xi)], \quad T_R = T_0 [1 + \mathcal{O}(\xi)], \quad \mathbf{u}'_R = \mathbf{u}'_0 + \mathcal{O}(\xi). \quad (2.28)$$

Levando-se em conta estes apontamentos e inserindo a expansão (2.26) na equação de Boltzmann (2.10), a seguinte equação para h , denominada equação de Boltzmann linearizada, é obtida

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}'} = \widehat{L}'(h) - \frac{\mathbf{v}}{\xi} \cdot \frac{\partial \ln f_R}{\partial \mathbf{r}'}, \quad (2.29)$$

onde

$$\widehat{L}'(h) = \int f_0(\mathbf{v}_*) (h'_* + h' - h - h_*) g \sigma' \sin \chi d\chi d\epsilon d\mathbf{v}_* \quad (2.30)$$

é a integral de colisões linearizada e novamente os índices em h denotam os índices da velocidade em seu argumento.

Note a partir da eq. (2.30) que, devido à conservação de massa ($\Psi = 1$), momentum linear ($\Psi = \mathbf{v}$) e energia ($\Psi = v^2$) numa colisão, o operador de colisão tem as seguintes propriedades:

$$\widehat{L}'(\Psi) = 0, \quad \Psi \in \{1, \mathbf{v}, v^2\}. \quad (2.31)$$

As grandezas sumarizadas por Ψ são chamadas invariantes de colisão.

O operador \widehat{L}' também satisfaz a seguinte propriedade [7, 13]:

$$\int f_0 \widehat{T} \left(\widehat{L}'(\varphi(\mathbf{r}', \mathbf{v})) \right) \psi(\mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v} = \int f_0 \widehat{T} \left(\widehat{L}'(\psi(\mathbf{r}', \mathbf{v})) \right) \varphi(\mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad (2.32)$$

onde $\varphi(\mathbf{r}', \mathbf{v})$ e $\psi(\mathbf{r}', \mathbf{v})$ são funções arbitrárias e \widehat{T} é o operador de inversão temporal, *i.e.*,

$$\widehat{T}(\varphi(\mathbf{r}', \mathbf{v})) = \varphi(\mathbf{r}', -\mathbf{v}). \quad (2.33)$$

A expressão linearizada dos momentos é obtida através da substituição de f pela expansão (2.26) nas equações (2.2)-(2.7). Em primeira ordem em ξ , os momentos escrevem-se:

- Densidade de numérica:

$$n = n_R + \int f_0 \xi h d\mathbf{v}; \quad (2.34)$$

- Velocidade hidrodinâmica:

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u}'_R + \frac{1}{n_0} \int f_0 \mathbf{v} \xi h d\mathbf{v}; \quad (2.35)$$

- Pressão:

$$P = P_R + \frac{m}{3} \int f_0 v^2 \xi h d\mathbf{v}; \quad (2.36)$$

- Tensor tensão:

$$P_{ij} = P_R \delta_{ij} + m \int f_0 v_i v_j \xi h \, d\mathbf{v}; \quad (2.37)$$

- Temperatura:

$$T = T_R + \frac{2T_0}{3n_0} \int f_0 \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{3}{2} \right) \xi h \, d\mathbf{v}; \quad (2.38)$$

- Fluxo de calor:

$$\mathbf{q}' = kT_0 \int f_0 \mathbf{v} \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{5}{2} \right) \xi h \, d\mathbf{v}, \quad (2.39)$$

onde δ_{ij} é a delta de Kronecker.

Devido à equação de estado (2.9) e levando-se em conta apenas termos de primeira ordem em ξ , a pressão de referência P_R é dada por

$$P_R = P_0 \left(1 + \frac{n_R - n_0}{n_0} + \frac{T_R - T_0}{T_0} \right). \quad (2.40)$$

Na linearização das condições de contorno assume-se que a temperatura T_w e a velocidade da superfície \mathbf{U}'_w possam ser escritas como

$$T_w = T_R (1 + \tau_w \xi), \quad \mathbf{U}'_w = \mathbf{u}'_R + \xi \mathbf{u}'_w, \quad \mathbf{U}'_w \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (2.41)$$

onde τ_w e \mathbf{u}'_w são funções conhecidas. Sob tais condições a função de perturbação nas vizinhanças da superfície em \mathbf{r}'_s , orientada na direção de \mathbf{n} , é dada por

$$h = \widehat{A}(h) + h_w - \widehat{A}(h_w), \quad v_n > 0, \quad (2.42)$$

onde \widehat{A} é o operador de espalhamento, definido como

$$\widehat{A}(h) = \int_{\mathbf{v}_* \cdot \mathbf{n} < 0} R_0(\mathbf{V}_* \rightarrow \mathbf{V}) \frac{|\mathbf{v}_* \cdot \mathbf{n}| f_0(\mathbf{v}_*)}{|\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}| f_0(\mathbf{v})} h_* \, d\mathbf{v}_*, \quad \mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}'_0, \quad (2.43)$$

R_0 é o núcleo de espalhamento calculado nas condições de equilíbrio e h_w é uma função contendo a perturbação das propriedades da parede:

$$h_w = \frac{2\mathbf{v}}{v_m^2 \xi} \cdot (\mathbf{U}'_w - \mathbf{u}'_R) + \frac{T_w - T_R}{T_0 \xi} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_m^2} - \frac{3}{2} \right]. \quad (2.44)$$

O operador \widehat{A} satisfaz a seguinte propriedade [7, 13]:

$$\begin{aligned} & \int_{v_n > 0} f_0(\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0) \cdot \mathbf{n} \widehat{T}(\varphi(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v})) \widehat{A}(\psi(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v})) \, d\mathbf{v} \\ &= \int_{v_n > 0} f_0(\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0) \cdot \mathbf{n} \widehat{T}(\psi(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v})) \widehat{A}(\varphi(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v})) \, d\mathbf{v}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde $\varphi(\mathbf{r}', \mathbf{v})$ e $\psi(\mathbf{r}', \mathbf{v})$ são funções arbitrárias e \widehat{T} é o operador de inversão temporal (2.33).

2.8 Operador de colisões

A integral de colisões linearizada (2.30) pode ser transformada num operador linear se a seção de choque total de espalhamento σ'_T , definida como

$$\sigma'_T = 2\pi \int_0^\pi \sigma'(g, \chi) \sin \chi d\chi, \quad (2.46)$$

for finita. Neste caso, $\widehat{L}'(h)$ é escrito como [1]

$$\widehat{L}'(h) = \int f_0(\mathbf{v}_*) K'(\mathbf{v}, \mathbf{v}_*) h(\mathbf{r}', \mathbf{v}_*) d\mathbf{v}_* - \nu'(v)h, \quad (2.47)$$

onde $K'(\mathbf{v}, \mathbf{v}_*)$ é o núcleo do operador integral e $\nu'(v)$ é a frequência de colisões. O núcleo é calculado por

$$\begin{aligned} K'(\mathbf{v}, \mathbf{v}_*) &= 2\pi g \int_0^\pi \exp \left[- \left(\frac{g \cot \frac{\chi}{2}}{v_m} \right)^2 \right] I_0 \left(\frac{2 |\mathbf{v} \times \mathbf{v}_*| \cot \frac{\chi}{2}}{v_m^2} \right) \\ &\times \left[\sigma' \left(\frac{g}{\sin \frac{\chi}{2}}, \chi \right) + \sigma' \left(\frac{g}{\sin \frac{\chi}{2}}, \pi - \chi \right) \right] \frac{\sin \chi}{\sin^4 \frac{\chi}{2}} d\chi - \sigma'_T g, \end{aligned} \quad (2.48)$$

onde I_0 é a função de Bessel modificada do primeiro tipo e ordem zero, dada por

$$I_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(x \cos \zeta) d\zeta. \quad (2.49)$$

Para o potencial de esferas rígidas, o núcleo K' pode ser determinado analiticamente [7] (pág. 179).

Se a seção de choque total além de finita não depender de g , então a frequência de colisões pode ser calculada para qualquer potencial de interação molecular [7]:

$$\nu'(v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} n_0 v_m \sigma'_T \left[\exp \left(- \frac{v^2}{v_m^2} \right) + \left(2 \frac{v}{v_m} + \frac{v_m}{v} \right) \int_0^{v/v_m} e^{-\eta^2} d\eta \right]. \quad (2.50)$$

2.9 Coeficientes de transporte

Haja vista que a descrição cinética é completa, uma vez fornecido o potencial de interação molecular é possível obter dela os coeficientes de transporte do gás, como os coeficientes de viscosidade e de condutividade térmica. As equações utilizadas na determinação destes coeficientes e um método para resolvê-las, proposto por Chapman e Cowling, são apresentados nas próximas subseções.

2.9.1 Coeficiente de condutividade térmica

De acordo com a lei de Fourier para a condução de calor, o coeficiente de condutividade térmica κ' é o coeficiente de proporção entre o fluxo de calor \mathbf{q}' e o gradiente de temperatura ∇T em um fluido:

$$\mathbf{q}' = -\kappa' \nabla T. \quad (2.51)$$

A fim de calcular κ' , suponha que existe um gradiente constante de temperatura no gás em repouso. Sem perdas de generalidade, é conveniente orientar um sistema de coordenadas retangulares de modo que a coordenada x' esteja na direção do gradiente de temperatura, o que reduz a eq. (2.51) a

$$q'_x = -\kappa' \frac{dT}{dx'}. \quad (2.52)$$

Além disso, é suposto que a pressão do gás seja uniforme e igual a P_0 .

É conveniente definir o gradiente de temperatura reduzido como

$$\xi = \frac{l}{T_0} \frac{dT}{dx'}, \quad (2.53)$$

onde l é um comprimento da ordem de grandeza do livre caminho médio molecular. Será assumido que $|\xi| \ll 1$, de modo que a teoria linear possa ser aplicada. A linearização é, então, feita conforme a eq. (2.26) em torno da maxwelliana de referência f_R , caracterizada pela temperatura de referência

$$T_R = T_0 \left(1 + \xi \frac{x'}{l} \right). \quad (2.54)$$

Levando-se em conta o fato de a pressão P_0 ser constante e a equação de estado $P_0 = n_R k T_R$, a densidade de referência n_R é dada até a primeira ordem em ξ por

$$n_R = n_0 \left(1 - \xi \frac{x'}{l} \right). \quad (2.55)$$

Devido ao fato de o fluxo de calor q'_x ser constante, segue que h deve depender apenas das velocidades, *i.e.*, $h = h(\mathbf{v})$. Como consequência disto e das equações (2.54) e (2.55), a eq. (2.29) se reduz a

$$\widehat{L}'(h) = \frac{v_x}{l} \left[\frac{mv^2}{2kT_0} - \frac{5}{2} \right]. \quad (2.56)$$

De acordo com a ref. [1], o operador \widehat{L}' é invariante sob rotação e, devido à presença do termo v_x no lado direito da eq. (2.56), é possível decompor h em

$$h = -\frac{\alpha_h}{l} v_x A, \quad (2.57)$$

onde α_h é uma constante livre e

$$A = A \left(\frac{v}{v_m} \right). \quad (2.58)$$

Por conveniência futura, α_h é definido como

$$\alpha_h = \frac{1}{n_0 v_m a_m^2}, \quad (2.59)$$

onde a_m é um parâmetro microscópico a ser designado. Inserindo a eq. (2.57) na eq. (2.56), obtém-se que A deve satisfazer a seguinte equação

$$\alpha_h \widehat{L}'(v_x A) = -v_x \left[\frac{mv^2}{2kT_0} - \frac{5}{2} \right]. \quad (2.60)$$

Observe que a última equação não determina A completamente, visto que, de acordo com a propriedade (2.31), A somado a uma constante arbitrária ainda é solução da eq. (2.60). Esta indeterminação é resolvida notando-se que o gás está em repouso, isto é, $\mathbf{u}' = 0$, o que de acordo com as equações (2.35) e (2.57) implica na restrição

$$\int f_0 v_x^2 A d\mathbf{v} = 0. \quad (2.61)$$

Uma vez conhecida a solução A , a condutividade térmica κ' é calculada a partir das equações (2.52) e (2.39), com h substituído pela expressão da eq. (2.57), o que fornece

$$\kappa' = \frac{k}{n_0 v_m a_m^2} \int f_0 v_x^2 \left(\frac{mv^2}{2kT_0} - \frac{5}{2} \right) A d\mathbf{v}. \quad (2.62)$$

2.9.2 Coeficiente de viscosidade

Sem prejuízo à solução do problema, supõe-se que o gás está em movimento unidimensional $u'_y(x')$, tal que

$$\frac{du'_y}{dx'} = \text{constante}. \quad (2.63)$$

A densidade numérica n_0 e a temperatura T_0 são mantidas uniformes.

De acordo com a lei de Newton para escoamentos lineares viscosos, a componente P_{xy} do tensor tensão está relacionada à velocidade do fluido u'_y por

$$P_{xy} = -\mu' \frac{du'_y}{dx'}, \quad (2.64)$$

onde μ' é o coeficiente de viscosidade.

Como o fluido está em desequilíbrio em decorrência da variação de sua velocidade, será adotado como parâmetro de perturbação a seguinte quantidade:

$$\xi = \frac{l}{v_m} \frac{du'_y}{dx'}, \quad (2.65)$$

a qual será suposta pequena o suficiente para que a equação de Boltzmann possa ser linearizada. A linearização é, então, feita em torno da seguinte maxwelliana de referência

$$f_R = n_0 \left(\frac{m}{2\pi kT_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m}{2kT_0} (v_x^2 + (v_y - u'_y)^2 + v_z^2) \right). \quad (2.66)$$

Com base na eq. (2.66) e observando-se que o tensor tensão é independente das coordenadas espaciais, a equação de Boltzmann linearizada torna-se

$$\widehat{L}'(h) = 2 \frac{v_x v_y}{v_m l}. \quad (2.67)$$

Além disso, baseando-se na invariância sob rotação do operador \widehat{L}' , h pode ser escrito como

$$h = -\alpha_h \frac{v_x v_y}{l v_m} B, \quad (2.68)$$

onde

$$B = B \left(\frac{v}{v_m} \right). \quad (2.69)$$

Após a inserção da eq. (2.68) na eq. (2.67), a seguinte equação integral para B é obtida:

$$\alpha_h \widehat{L}'(v_x v_y B) = -2v_x v_y. \quad (2.70)$$

O coeficiente de viscosidade é, então, calculado a partir das equações (2.64), (2.37) e (2.68) como

$$\mu' = \frac{m}{n_0 a_m^2 v_m^3} \int f_0 (v_x v_y)^2 B d\mathbf{v}. \quad (2.71)$$

2.9.3 A aproximação de Chapman-Cowling

Chapman e Cowling [1] (cap. 5) desenvolveram um método aproximativo para calcular os coeficientes de transporte, conhecido como aproximação de Chapman-Cowling. Este método será utilizado neste trabalho para validar os resultados obtidos numericamente das equações integrais. Nesta seção os resultados mais importantes do método serão destacados.

De acordo com a aproximação de Chapman-Cowling, o coeficiente de condutividade térmica pode ser determinado em sucessivas aproximações. A aproximação de n-ésima ordem é dada por

$$\kappa'^{(n)} = \kappa'^{(1)} f_{\kappa}^{(n)}, \quad (2.72)$$

onde

$$\kappa'^{(1)} = \frac{75}{32} \frac{k^2 T}{m} \frac{1}{\Omega^{(2,2)}} \quad (2.73)$$

e $f_{\kappa}^{(n)}$ são coeficientes relacionados às integrais- Ω .

As integrais- Ω são definidas como

$$\Omega^{(l,r)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{mg^2}{4kT}\right) \left(\frac{mg^2}{4kT}\right)^{\frac{2r+3}{2}} Q^{(l)}(g) dg, \quad (2.74)$$

onde $Q^{(l)}(g)$ são as seções de choque de transporte, determinadas por

$$Q^{(l)}(g) = 2\pi \int_0^{\pi} [1 - \cos^l \chi] \sigma'(g, \chi) \sin \chi d\chi. \quad (2.75)$$

As três primeiras expressões para $f_{\kappa}^{(n)}$ são

$$f_{\kappa}^{(1)} = 1, \quad (2.76)$$

$$f_{\kappa}^{(2)} = f_{\kappa}^{(1)} + \frac{(a_{12})^2}{a_{11}a_{22} - (a_{12})^2}, \quad (2.77)$$

e

$$f_{\kappa}^{(3)} = f_{\kappa}^{(2)} + \frac{a_{11}(a_{12}a_{23} - a_{22}a_{13})^2 / (a_{11}a_{22} - a_{12}^2)}{(a_{11}a_{22}a_{33} + 2a_{12}a_{13}a_{23} - a_{11}(a_{23})^2 - a_{22}(a_{13})^2 - a_{33}(a_{12})^2)}. \quad (2.78)$$

As relações entre os coeficientes $a_{l,r}$ que surgem nas equações (2.77)-(2.78) e as integrais- Ω são dadas abaixo:

$$a_{11} = 4\Omega^{(2,2)}, \quad (2.79)$$

$$a_{12} = 7\Omega^{(2,2)} - 2\Omega^{(2,3)}, \quad (2.80)$$

$$a_{22} = \frac{77}{4}\Omega^{(2,2)} - 7\Omega^{(2,3)} + \Omega^{(2,4)}, \quad (2.81)$$

$$a_{13} = \frac{63}{8}\Omega^{(2,2)} - \frac{9}{2}\Omega^{(2,3)} + \frac{1}{2}\Omega^{(2,4)}, \quad (2.82)$$

$$a_{23} = \frac{945}{32}\Omega^{(2,2)} - \frac{261}{16}\Omega^{(2,3)} + \frac{25}{8}\Omega^{(2,4)} - \frac{1}{4}\Omega^{(2,5)}, \quad (2.83)$$

$$a_{33} = \frac{14553}{256}\Omega^{(2,2)} - \frac{1215}{32}\Omega^{(2,3)} + \frac{313}{32}\Omega^{(2,4)} - \frac{9}{8}\Omega^{(2,5)} + \frac{1}{16}\Omega^{(2,6)} + \frac{1}{6}\Omega^{(4,4)}. \quad (2.84)$$

O método para o cálculo do coeficiente de viscosidade é análogo ao da condutividade térmica. A n -ésima aproximação para μ' é determinada por

$$\mu'^{(n)} = \mu'^{(1)} f_\mu^{(n)}, \quad (2.85)$$

onde

$$\mu'^{(1)} = \frac{5kT}{8\Omega^{(2,2)}} \quad (2.86)$$

e as três primeiras expressões para $f_\mu^{(n)}$ são

$$f_\mu^{(1)} = 1, \quad (2.87)$$

$$f_\mu^{(2)} = f_\mu^{(1)} + \frac{b_{12}^2}{b_{11}b_{22} - b_{12}^2}, \quad (2.88)$$

e

$$f_\mu^{(3)} = f_\mu^{(2)} + \frac{b_{11} (b_{12}b_{23} - b_{22}b_{13})^2}{(b_{11}b_{22} - b_{12}^2) (b_{11}b_{22}b_{33} + 2b_{12}b_{13}b_{23} - b_{11}b_{23}^2 - b_{22}b_{13}^2 - b_{33}b_{12}^2)}. \quad (2.89)$$

O vínculo entre os coeficientes b_{lr} das equações (2.88) e (2.89) e as integrais- Ω é dado a seguir:

$$b_{11} = 4\Omega^{(2,2)}, \quad (2.90)$$

$$b_{12} = 7\Omega^{(2,2)} - 2\Omega^{(2,3)}, \quad (2.91)$$

$$b_{22} = \frac{301}{12}\Omega^{(2,2)} - 7\Omega^{(2,3)} + \Omega^{(2,4)}, \quad (2.92)$$

$$b_{13} = \frac{63}{8}\Omega^{(2,2)} - \frac{9}{2}\Omega^{(2,3)} + \frac{1}{2}\Omega^{(2,4)}, \quad (2.93)$$

$$b_{23} = \frac{1365}{32}\Omega^{(2,2)} - \frac{321}{16}\Omega^{(2,3)} + \frac{25}{8}\Omega^{(2,4)} - \frac{1}{4}\Omega^{(2,5)}, \quad (2.94)$$

$$b_{33} = \frac{25137}{256}\Omega^{(2,2)} - \frac{1755}{32}\Omega^{(2,3)} + \frac{381}{32}\Omega^{(2,4)} - \frac{9}{8}\Omega^{(2,5)} + \frac{1}{16}\Omega^{(2,6)} + \frac{1}{2}\Omega^{(4,4)}. \quad (2.95)$$

2.10 Modelos para a equação de Boltzmann

A fim de simplificar o cálculo da integral de colisões, Bhatnagar, Gross e Krook [14], bem como Welanger [15] de maneira independente, propuseram um modelo para aproximá-la. O modelo, hoje conhecido como modelo BGK, foi construído de modo a satisfazer certos princípios que devem ser obedecidos pela integral de colisões original. A integral de colisões linearizada \hat{L}'_{BGK} , de acordo com o modelo BGK, é dada por

$$\hat{L}'_{BGK}(h) = \nu_{BGK} \left[v + 2 \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{v_m} + \tau \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{3}{2} \right) - h \right], \quad (2.96)$$

onde ν_{BGK} é a frequência de colisões (constante) e

$$v = \frac{n - n_R}{\xi n_0}, \quad \tau = \frac{T - T_R}{\xi T_0}, \quad \mathbf{u} = \frac{\mathbf{u}'}{\xi v_m}. \quad (2.97)$$

A frequência de colisões ν_{BGK} é ajustada pelo método de Chapman-Enskog a fim de fornecer os valores corretos dos coeficientes de viscosidade ou de condutividade térmica. Contudo, o modelo de BGK não permite ajustar a frequência de colisões de modo a obter simultaneamente ambos os coeficientes de transporte. Por este motivo um modelo mais aprimorado foi elaborado por Shakhov [16]. De acordo com este modelo, também conhecido como modelo S, a integral de colisões linearizada \widehat{L}'_S é dada por

$$\begin{aligned} \widehat{L}'_S(h) &= \nu_S \left[v + 2 \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{v_m} + \tau \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{3}{2} \right) \right. \\ &+ \left(1 - \frac{P_0}{\nu_S \mu'} \right) \left(\frac{2}{v_m^2} \sum_{i,j} v_i v_j \sigma_{ij} - (v + \tau) \frac{v^2}{v_m^2} \right) \\ &+ \left. \frac{4}{5} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{P_0}{\nu_S \mu'} \right) \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{5}{2} \right) \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}}{v_m} - h \right], \quad (i, j \in \{x, y, z\}). \end{aligned} \quad (2.98)$$

onde

$$\sigma_{ij} = \frac{P_{ij} - P_R \delta_{ij}}{\xi P_0}, \quad \mathbf{q} = \frac{\mathbf{q}'}{\xi v_m P_0}. \quad (2.99)$$

A frequência de colisões ν_S do modelo S é um parâmetro livre [16, 17]. Por este motivo é conveniente tomar

$$\nu_S = \frac{P_0}{\mu'}, \quad (2.100)$$

de modo que a eq. (2.98) torna-se

$$\widehat{L}'_S(h) = \frac{P_0}{\mu'} \left[v + 2 \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{v_m} + \tau \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{3}{2} \right) + \frac{4}{15} \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}}{v_m} \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{5}{2} \right) - h \right]. \quad (2.101)$$

Capítulo 3

Revisão bibliográfica

3.1 Coeficientes de transporte

Os coeficientes de viscosidade e de condutividade térmica foram calculados para o potencial de Lennard-Jones pela primeira vez por Kihara e Kotani em 1942 [18] através da aproximação de Chapman-Cowling. Sem saber destes resultados, em 1948 e 1949 mais três trabalhos foram publicados [18] sobre o mesmo assunto e com base no mesmo método por outros autores. O mais completo e mais conhecido destes foi o publicado por Hirschfelder *et al.* [6]. Neste trabalho, Hirschfelder *et al.* desenvolveram uma aproximação para o cálculo do ângulo de espalhamento χ a partir da qual calcularam as integrais- Ω e os coeficientes de transporte. Alguns destes resultados, referentes ao ângulo de espalhamento, são apresentados na tab. 3.1. Tais resultados estão expressos em termos do parâmetro de impacto reduzido

$$b = \frac{b'}{\rho_0} \quad (3.1)$$

e da energia reduzida E , definida como

$$E = \frac{T^* g^2}{2v_m^2}, \quad T^* = \frac{kT}{\varepsilon}, \quad (3.2)$$

onde ρ_0 e ε são os parâmetros do potencial de Lennard-Jones. Outros resultados, referentes às integrais- Ω , são apresentados na tab. 3.2 em termos das integrais- Ω reduzidas. As integrais- Ω reduzidas $\Omega^{(l,r)*}$ são definidas por

$$\Omega^{(l,r)*} = \frac{\Omega^{(l,r)}}{\Omega_{hs}^{(l,r)}}, \quad (3.3)$$

Tabela 3.1: Ângulo de espalhamento χ vs parâmetro de impacto reduzido b e energia de colisão reduzida E por Hirschfelder *et al.* [10].

$E = 0, 1$		$E = 1$		$E = 10$		$E = 100$	
b	χ	b	χ	b	χ	b	χ
2,838	0,323	1,894	0,369	1,477	0,110	1,244	0,020
2,696	0,543	1,768	0,768	1,334	0,179	1,109	0,013
2,643	0,706	1,721	1,207	1,259	0,206	1,035	0,018
2,598	0,945	1,698	1,689	1,205	0,192	0,9812	0,072
2,572	1,205	1,678	2,664	1,162	0,141	0,9376	0,145
2,544	1,998	1,668	3,105	1,123	0,060	0,8990	0,234
2,539	2,576	1,658	3,135	1,086	0,043	0,8630	0,336
2,538	2,346	1,643	2,784	1,049	0,163	0,8280	0,449
2,516	1,166	1,623	2,320	1,011	0,297	0,7931	0,570
2,503	1,944	1,596	1,871	0,9704	0,440	0,7576	0,699
2,470	2,867	1,563	1,470	0,9277	0,592	0,7206	0,835
2,456	3,106	1,522	1,109	0,8816	0,752	0,6818	0,978
2,400	2,509	1,473	0,775	0,8315	0,920	0,6403	1,129
2,328	1,943	1,415	0,458	0,7762	1,099	0,5954	1,289
2,171	1,124	1,348	0,148	0,7145	1,289	0,5461	1,460
1,996	0,491	1,270	0,161	0,6444	1,496	0,4908	1,646
1,881	0,150	1,178	0,474	0,5627	1,726	0,4272	1,854
1,593	0,542	0,9410	1,149	0,4632	1,993	0,3507	2,097
1,119	1,437	0,5588	2,027	0,3302	2,335	0,2493	2,407

onde $\Omega_{hs}^{(l,r)}$ são as integrais- Ω para esferas rígidas [8]:

$$\Omega_{hs}^{(l,r)} = \sqrt{\frac{\pi}{8}} (r+1)! \left[1 - \frac{1 + (-1)^l}{2(l+1)} \right] v_m d^2. \quad (3.4)$$

Alguns resultados concernentes aos coeficientes de condutividade térmica e de viscosidade obtidos por Hirschfelder *et al.* [6] com base na aproximação de Chapman-Cowling até a aproximação de terceira ordem são apresentados na tab. 3.3. Estes resultados estão expressos em termos dos coeficientes de condutividade térmica κ e viscosidade μ reduzidos, cuja definição é

$$\kappa = \frac{\kappa' \rho_0^2}{k v_m}, \quad \mu = \frac{\mu' \rho_0^2}{m v_m}. \quad (3.5)$$

Em 1955, Pekeris [19] mostrou que era possível reduzir as equações integrais referentes aos coeficientes de transporte para esferas rígidas a equações diferenciais ordinárias

Tabela 3.2: Integrais- Ω reduzidas $\Omega^{(l,r)*}$ com base no potencial de Lennard-Jones por Hirschfelder *et al.* [10].

	$T^* = 0,3$	$T^* = 1$	$T^* = 10$
$\Omega^{(1,1)*}$	2,662	1,439	0,7424
$\Omega^{(1,2)*}$	2,256	1,204	0,7013
$\Omega^{(1,3)*}$	1,962	1,076	0,6735
$\Omega^{(2,2)*}$	2,785	1,587	0,8242
$\Omega^{(2,3)*}$	2,535	1,387	0,7922
$\Omega^{(2,4)*}$	2,333	1,258	0,7690
$\Omega^{(2,5)*}$	2,152	1,172	0,7501
$\Omega^{(2,6)*}$	1,990	1,113	0,7345
$\Omega^{(4,4)*}$	2,557	1,377	0,7988

Tabela 3.3: Coeficientes de condutividade térmica e de viscosidade reduzidos referentes ao potencial de Lennard-Jones [6]. Aproximação de terceira ordem do método de Chapman-Cowling.

T^*	κ	μ
0,3	0,1589	0,04483
1	0,2946	0,07855
10	0,5736	0,1523

e integrou numericamente a equação diferencial de segunda ordem referente ao coeficiente de difusão. Alguns anos mais tarde, Pekeris juntamente com Alterman [20] completaram o cálculo dos coeficientes de transporte com a integração das equações diferenciais de quarta ordem referentes aos coeficientes de viscosidade e de condutividade térmica. Estes autores reportam os seguintes valores para os coeficientes de condutividade térmica e viscosidade

$$\kappa' = 0,479305 \frac{kv_m}{d^2}, \quad \mu' = 0,126668 \frac{mv_m}{d^2}. \quad (3.6)$$

Com o aperfeiçoamento dos computadores digitais, as equações integrais relacionadas aos coeficientes de transporte puderam ser resolvidas numericamente [21]. Desde então diversos métodos de resolução das equações integrais foram elaborados [22, 23, 24], todos eles restritos ao potencial de esferas rígidas.

3.2 Escoamentos unidimensionais e de simetria axial

Problemas unidimensionais baseados na equação de Boltzmann linearizada começaram a ser resolvidos no fim da década de 1980 pelos grupos independentes de Loyalka e Sone. Estes grupos resolveram problemas clássicos em Dinâmica de Gases Rarefeitos, tais como o cálculo dos coeficientes de deslizamento [25] e de salto de temperatura [2, 3], problemas de evaporação e condensação [26, 27], escoamento entre placas planas [28, 29, 30], escoamento em tubos [31], entre outros. Isto foi possível graças a uma simplificação que eliminava uma variável da função de distribuição. Posteriormente, Siewert [32, 33, 34, 35] reproduziu vários resultados obtidos por estes grupos utilizando métodos numéricos em conjunção com um tratamento analítico, o que lhe rendeu maior precisão e menor esforço computacional.

Recentemente, diversos métodos [36, 37, 38] foram desenvolvidos para o cálculo da integral de colisões. Estes métodos podem ser aplicados a qualquer potencial intermolecular, porém apresentam um inconveniente: a integral de colisões torna-se uma integral “octadimensional”. Para tornar tais métodos viáveis, a discretização do espaço de fase é pouco densa, pelo menos em comparação com a discretização feita pelos grupos de Loyalka e Sone citados acima, o que compromete a precisão dos resultados.

Como apontado na Introdução, um dos objetivos deste trabalho é a avaliação da influência do potencial intermolecular no transporte de massa e energia. Isto será feito através do estudo do escoamento de gás induzido por gradientes longitudinais de pressão e temperatura num canal formado por duas placas planas paralelas. É, portanto, conveniente apresentar neste ponto os principais aspectos deste tipo de escoamento já estudados com base na equação de Boltzmann.

Sabe-se da Mecânica dos Fluidos que gradientes de pressão e temperatura induzem, respectivamente, fluxo de massa e energia. Em um gás rarefeito, contudo, a hipótese do contínuo deixa de ser válida e efeitos curiosos surgem. Neste caso, além do transporte de massa induzido pelo gradiente de pressão, denominado **problema de Poiseuille**, tal gradiente também induz um fluxo de calor. Este fenômeno é conhecido como **efeito mecanocalórico**. De modo análogo, um gradiente de temperatura é capaz de induzir fluxo de massa, além do fluxo de calor usual. A este efeito dá-se o nome de **rastejo térmico**. As principais referências sobre estudos destes efeitos com base na equação de Boltzmann

para esferas rígidas são [28, 29, 30, 35].

Os efeitos mecanocalórico e de rastejo térmico são conhecidos como efeitos cruzados e curiosamente não são independentes. O fluxo de calor devido ao efeito mecanocalórico é proporcional ao fluxo de massa devido ao efeito de rastejo térmico. Este fenômeno está associado a um princípio termodinâmico: as relações de reciprocidade de Onsager-Casimir. Tais relações foram estabelecidas por Onsager [39] em 1931, mais tarde generalizadas por Casimir [40] e demonstradas para gases ideais, com base na equação de Boltzmann, por Sharipov em 1994 [41, 42].

A medida do transporte de massa e energia através do canal é feita através da taxa de fluxo de massa \dot{M} e da taxa de fluxo de calor \dot{Q} . No cap. 6 será mostrado de maneira detalhada como \dot{M} e \dot{Q} podem ser expressos em termos de quatro coeficientes determináveis a partir da equação de Boltzmann: G_P , G_T , Q_P e Q_T . Estes coeficientes estão associados aos seguintes fenômenos:

- G_P - fluxo de massa devido ao gradiente de pressão. (Fluxo de Poiseuille).
- G_T - fluxo de massa devido ao gradiente de temperatura. (Rastejo térmico).
- Q_P - fluxo de calor devido ao gradiente de pressão. (Efeito mecanocalórico).
- Q_T - fluxo de calor devido ao gradiente de temperatura. (Fluxo de calor ordinário).

Para o potencial de esferas rígidas, tais coeficientes dependem de apenas um parâmetro sem dimensão, o parâmetro de rarefação δ , definido como

$$\delta = \frac{Pa_M}{\mu'v_m}, \quad (3.7)$$

onde a_M é a distância entre as placas do canal. Os coeficientes G_P , G_T , Q_P e Q_T também poderiam ser expressos em termos do número de Knudsen Kn , entretanto existe uma arbitrariedade na definição deste número, o que o torna inconveniente [13]. Para os propósitos deste trabalho, basta saber que o número de Knudsen é inversamente proporcional ao parâmetro de rarefação.

A tab. 3.4 apresenta alguns valores de G_P , G_T , Q_P e Q_T reportados por Siewert [35] e Hickey e Loyalka [30, 28]. Alguns resultados referentes às quantidades G_P e G_T obtidos por Ohwada *et al.* [29] são apresentados na tab. 3.5. Estes resultados foram obtidos com base na equação de Boltzmann linearizada para o potencial de esferas rígidas. Não há resultados análogos para o potencial de Lennard-Jones.

Tabela 3.4: Coeficientes G_P , G_T , Q_P e Q_T vs δ . Dados obtidos pela equação de Boltzmann linearizada com base no potencial de esferas rígidas.

δ	G_P		$G_T = Q_P$		Q_T	
	Ref. [35]	Ref. [30]	Ref. [35]	Ref. [28]	Ref. [35]	Ref. [28]
0,1	1,9499	1,9318	0,79928	0,7966	3,9037	3,8669
1	1,5067	1,5086	0,38908	0,3890	1,7830	1,7846
10	2,7296	2,7350	0,089950	0,0898	0,34674	0,3467

Observe a igualdade $G_T = Q_P$ nas tabelas 3.4 e 3.5. Ela é consequência [41, 13] das relações de reciprocidade de Onsager-Casimir, as quais, por sua vez, decorrem da reversibilidade dos microprocessos da interação gás-gás (2.32) e gás-superfície (2.45).

Tabela 3.5: Coeficientes G_P , G_T e Q_P vs δ . Dados obtidos pela equação de Boltzmann linearizada com base no potencial de esferas rígidas [29].

δ	G_P	$G_T = Q_P$
0,0393	2,2958	0,9968
0,0982	1,9556	0,8030
0,982	1,5066	0,3916
7,85	2,386	0,1106

Capítulo 4

O operador de colisões

Este capítulo dedica-se a descrever técnicas genéricas para o cálculo do operador de colisões e apresenta alguns resultados obtidos para o potencial de Lennard-Jones. O capítulo foi dividido em duas seções. A primeira é reservada ao estudo da dinâmica de colisões binárias e à determinação da seção de choque diferencial, ao passo que a segunda descreve o procedimento numérico utilizado na determinação do operador de colisões.

4.1 A seção de choque diferencial

4.1.1 Parametrização

A fim de parametrizar a seção de choque diferencial é suficiente introduzir apenas três parâmetros de referência: um comprimento microscópico típico a_m , uma velocidade microscópica característica, que neste caso será a velocidade mais provável no estado de equilíbrio v_m , e uma energia de referência U_0 . Em termos destas grandezas define-se as seguintes variáveis reduzidas

$$\varrho = \frac{\rho}{a_m}, \quad \varrho_m = \frac{\rho_m}{a_m}, \quad b = \frac{b'}{a_m}, \quad \mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{v_m}, \quad \mathbf{g} = \frac{\mathbf{g}}{v_m}, \quad \mathcal{U}(\varrho) = \frac{U(\rho)}{U_0}. \quad (4.1)$$

$$E = T^* \frac{\mathbf{g}^2}{2}, \quad T^* = \frac{kT_0}{U_0}, \quad \sigma(E, \chi) = \frac{\sigma'(g, \chi)}{a_m^2}, \quad \sigma_T = \frac{\sigma'_T}{a_m^2}. \quad (4.2)$$

Com base nas definições (4.1)-(4.2) e introduzindo a variável $q = \varrho_m/\varrho$, o ângulo de deflexão (2.11) é escrito como

$$\psi = \frac{b}{\varrho_m} \int_0^1 \left[1 - \left(\frac{bq}{\varrho_m} \right)^2 - \frac{\mathcal{U}(\frac{\varrho_m}{q})}{E} \right]^{-1/2} dq, \quad (4.3)$$

onde ϱ_m é a maior raiz da equação

$$1 - \left(\frac{b}{\varrho}\right)^2 - \frac{\mathcal{U}(\varrho)}{E} = 0, \quad 0 < \varrho < \infty. \quad (4.4)$$

A partir da parametrização (4.1), (4.2) e da eq. (2.14), a seção de choque diferencial reduzida σ é escrita como

$$\sigma(E, \chi) = \frac{1}{\text{sen } \chi} \sum_i b_i \left| \frac{\partial \chi'(E, b)}{\partial b} \right|_{b_i}^{-1}. \quad (4.5)$$

4.1.2 Ângulo de espalhamento

Metodologia

O primeiro passo no sentido de calcular o ângulo de espalhamento χ para um dado par (E, b) é encontrar a maior raiz da eq. (4.4). Entretanto, de maneira geral, esta equação é uma equação transcendental, sendo, portanto, impossível isolar suas raízes com um número finito de operações básicas (soma, multiplicação e potenciação). Neste caso, é necessário utilizar métodos numéricos para encontrá-las. Para simplificar o tratamento numérico, introduz-se a função

$$Z(\varrho, b, E) = 1 - \left(\frac{b}{\varrho}\right)^2 - \frac{\mathcal{U}(\varrho)}{E}. \quad (4.6)$$

Tendo em vista que o domínio da função Z é infinito com relação a variável ϱ , isto é $0 < \varrho < \infty$, e a limitação computacional da representação dos números, é conveniente separar a região de busca das raízes em duas. A primeira região é definida por $0 < \varrho \leq 1$. Na região restante a troca de variável $q = 1/\varrho$ é feita a fim de mapear $1 < \varrho < \infty$ no intervalo finito $0 < q < 1$ no qual as raízes de $Z(1/q, b, E) = 0$ são procuradas.

Em geral, a eq. (4.4) pode apresentar mais que uma raiz. Por este motivo é necessário separá-las, isto é, encontrar os intervalos dentro dos quais apenas uma raiz existe, antes que um método de refinamento de raízes possa ser aplicado.

Usualmente, a separação das raízes de uma função arbitrária $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ é feita com a divisão da região de interesse em um número muito grande de subintervalos regulares. A presença ou ausência de raízes é avaliada a partir da análise dos sinais da função nos extremos de cada subintervalo. Esse método, contudo, é computacionalmente ineficiente, haja vista que para distinguir raízes distantes de Δx seria necessário dividir a região $[a, b]$ em mais que $(b - a)/\Delta x$ subintervalos.

Para contornar o problema, outro método foi elaborado. O método consiste em interpolar a função $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ por uma função $\phi(x)$ cujo gráfico é conhecido. Exceto no caso em que $\phi(x)$ coincidir com $f(x)$, um erro será cometido nesta interpolação. A avaliação do erro cometido na interpolação de $f(x)$ por $\phi(x)$ é determinante na eficiência do método. Naturalmente não é necessário interpolar bem a função $f(x)$ em regiões nas quais ela esteja distante da abscissa. Por este motivo define-se a medida do erro cometido na interpolação por

$$\eta_r = \int_a^b \eta(x) dx, \quad (4.7)$$

onde $\eta(x)$ é o erro relativo local, dado por

$$\eta(x) = \frac{|f(x) - \phi(x)|}{\gamma + |f(x)|} \quad (4.8)$$

e γ é um parâmetro pequeno introduzido para evitar a divisão por zero. Se o erro avaliado for menor que um valor predefinido, os intervalos nos quais apenas uma raiz existe são determinados facilmente através do gráfico de $\phi(x)$ e um método de refinamento de raízes é aplicado para determiná-las com alguma precisão estipulada. Por outro lado, se o erro cometido na interpolação for maior que o valor predefinido, então o domínio $[a, b]$ é dividido ao meio e o método é aplicado recursivamente a cada subintervalo.

De modo concreto, neste trabalho adotou-se como função interpoladora $\phi(x)$ um polinômio quadrático, γ foi tomado como o menor número representável pelo computador digital, o método de bissecção foi utilizado para o refinamento das raízes e a integral (4.7) foi aproximada por

$$\eta_r = \int_a^b \eta(x) dx = \sum_i \eta(x_i) W_i \quad (4.9)$$

onde x_i e W_i são os nós e pesos da quadratura de Gauss-Legendre com três pontos no intervalo $[a, b]$. O erro cometido na aproximação da eq. (4.9) é

$$\frac{1}{15750} \left. \frac{d^6 \eta}{dx^6} \right|_{x=\xi}, \quad (4.10)$$

onde ξ é algum número desconhecido no intervalo $[a, b]$. Para levar em conta o erro cometido nesta aproximação, η_r é reduzido em uma ordem de grandeza no cálculo numérico.

O método proposto foi avaliado utilizando-se diversas funções polinomiais e transcendentais cujas raízes eram bem conhecidas. Verificou-se em todos estes testes que o método era capaz de fornecer as raízes dentro da precisão estipulada e que o tempo de

processamento era, em média, três ordens de grandeza menor que aquele requerido pelo método convencional.

Aplicado o método para encontrar a raiz ϱ_m , é possível então calcular o ângulo de espalhamento ψ . Entretanto neste ponto surge outra dificuldade. Note que quando $q = 1$, o denominador da eq. (4.3) é nulo, pela eq. (4.4). Para contornar esta singularidade a integral (4.3) é separada em duas partes

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{b}{\varrho_m} \int_0^{1-\epsilon} \left[1 - \left(\frac{bq}{\varrho_m} \right)^2 - \frac{\mathcal{U}\left(\frac{\varrho_m}{q}\right)}{E} \right]^{-1/2} dq \\ &+ \frac{b}{\varrho_m} \int_{1-\epsilon}^1 \left[1 - \left(\frac{bq}{\varrho_m} \right)^2 - \frac{\mathcal{U}\left(\frac{\varrho_m}{q}\right)}{E} \right]^{-1/2} dq. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Assumindo que $\epsilon \ll 1$, é possível expandir a expressão entre colchetes do integrando da segunda integral numa série de potências em torno de $q = 1$ até primeira ordem em q e em seguida integrá-lo. O resultado é então

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{b}{\varrho_m} \int_0^{1-\epsilon} \left[1 - \left(\frac{bq}{\varrho_m} \right)^2 - \frac{\mathcal{U}\left(\frac{\varrho_m}{q}\right)}{E} \right]^{-1/2} dq \\ &+ 2\sqrt{\epsilon} \left[2 \left(\frac{b}{\varrho_m} \right)^2 - \frac{\varrho_m}{E} \frac{d\mathcal{U}}{d\varrho} \Big|_{\varrho_m} \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

A integral da eq. (4.12) pode, então, ser calculada eficientemente através de quadraturas adaptativas [43].

Aplicação ao potencial de Lennard-Jones

Na seq. 4.1.1 foi apontado que apenas três parâmetros são necessários para parametrizar as grandezas envolvidas com a seção de choque diferencial. Duas destas grandezas, a_m e U_0 , devem ser especificadas ao se aplicar a teoria a um potencial específico. No caso do potencial de Lennard-Jones é conveniente tomar como parâmetro microscópico característico $a_m = \rho_0$ e como energia microscópica característica $U_0 = \varepsilon$, isto é, ambos os parâmetros que surgem na expressão do potencial.

A dependência das grandezas ϱ_m , ψ e χ com o parâmetro de impacto é ilustrada nas figuras 4.1 e 4.2 para quatro valores de E , a saber: 0,1, 1, 10 e 100. Tais grandezas foram calculadas com base nos métodos propostos na seção precedente e com erro numérico estimado em 10^{-10} .

Os gráficos referentes ao ângulo de espalhamento estão de acordo com a noção física de que numa colisão frontal ($b = 0$) a partícula-bala deve ser espalhada na direção contrária à direção de aproximação à partícula-alvo, isto é com $\chi = \pi$, e que para valores de parâmetro de impacto muito grandes o espalhamento deve se tornar insignificante, ou seja, $\chi \rightarrow 0$, haja vista que a energia potencial intermolecular torna-se desprezível frente à energia cinética ou, indiretamente, frente à E . É importante ressaltar que o alcance do espalhamento é maior quando E diminui. O valor de b acima do qual χ é sempre menor que $\pi/100$, por exemplo, vale aproximadamente 1 para $E = 100$ e aproximadamente 4 para $E = 0, 1$. Lembrando que o parâmetro de impacto b' foi parametrizado em termos de ρ_0 , isto é, $b' = b\rho_0$, e com base nos dados da tab. 2.1, o valor de b' , acima do qual χ é sempre menor que $\pi/100$, é estimado em 4 Å para $E = 100$ e 16 Å para $E = 0, 1$.

Observe na fig. 4.1(a) que existe um parâmetro de impacto b_a em torno do qual ϱ_m , ψ e χ variam abruptamente. O que isto significa fisicamente? Lembre-se que ψ representa o ângulo de deflexão da partícula-bala em torno da partícula-alvo. O fato de ψ aumentar significativamente quando $b \rightarrow b_a$ significa que a partícula-bala está prestes a entrar em órbita em torno da partícula-alvo. A órbita que ocorre em $b = b_a$ é instável. Valores de b nas vizinhanças de b_a , muito próximos uns dos outros, podem levar a espalhamentos em direções completamente diferentes. Isto justifica a oscilação de χ em torno de b_a na fig. 4.1(a). É possível mostrar, no caso do potencial de Lennard-Jones, que os efeitos de órbita somente ocorrem para $E < 4/5$ [6]. Além disso, existe apenas uma órbita instável para cada valor de E , que ocorre para

$$b_a = \varrho_a \sqrt{1 - \frac{U(\varrho_a)}{E}}, \quad (4.13)$$

onde

$$\varrho_a = \left[\frac{1}{5} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{5}{4}E} \right) \right]^{-1/6}. \quad (4.14)$$

A tab. 4.1 apresenta os resultados referentes ao ângulo de espalhamento obtidos neste trabalho e aqueles da ref. [6]. Desta tabela observa-se que a diferença relativa entre os resultados dos referidos autores não excede 3,5% para $E \geq 1$, mas é maior que 35% para alguns valores de parâmetro de impacto quando $E = 0, 1$. Esta diferença é justificada pelas aproximações usadas na ref. [6].

As figuras 4.1(b), 4.2(a) e 4.2(b) destacam que a função $\chi(E, b)$ pode apresentar máximos ou mínimos locais suaves. Adiante será mostrado como tais extremos podem

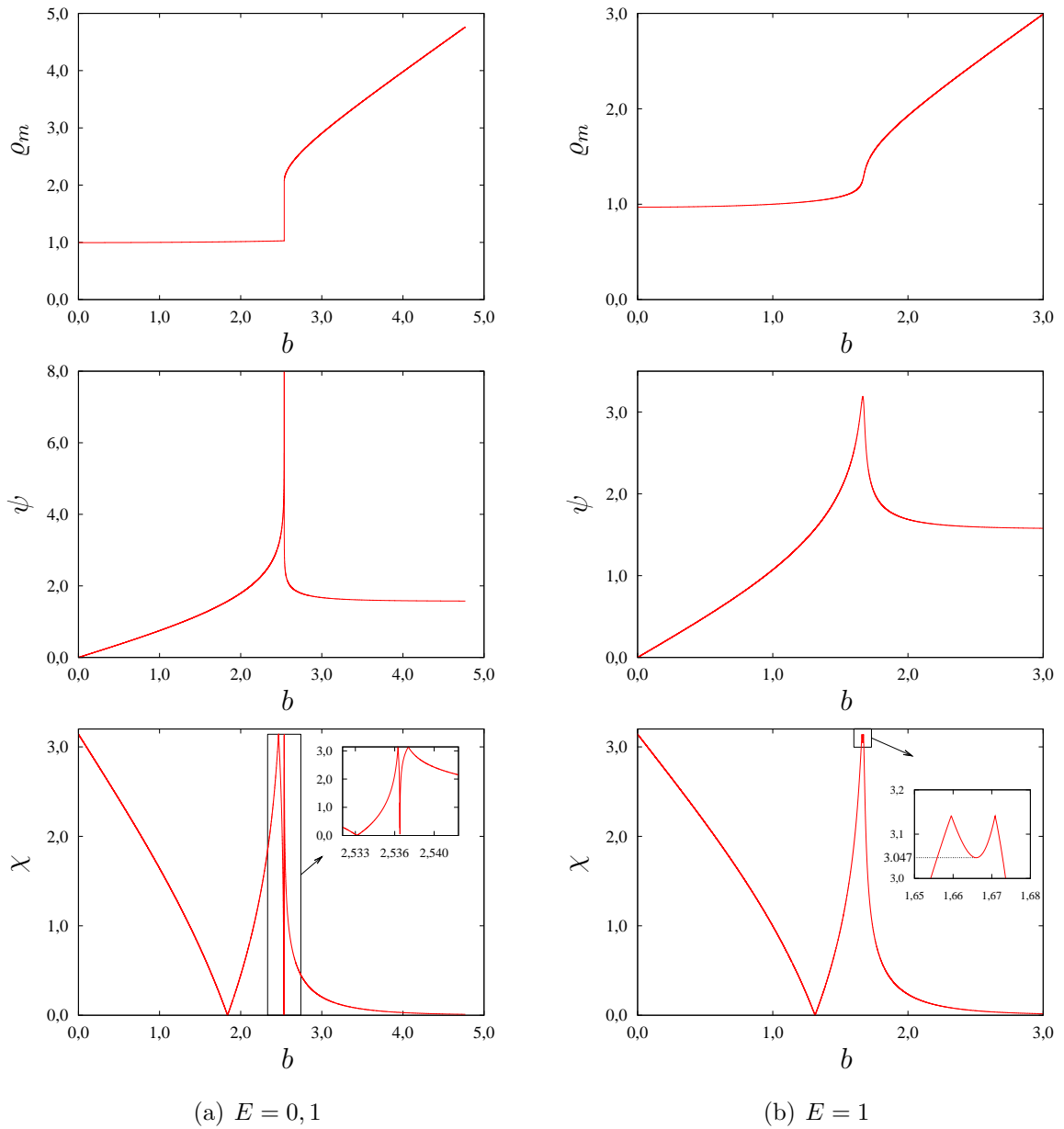


Figura 4.1: Distância de maior aproximação ϱ_m , ângulo de deflexão ψ e ângulo de espalhamento χ expressos como função do parâmetro de impacto b .

influenciar a seção de choque diferencial.

Trajatórias

Uma maneira mais iluminadora de compreender os resultados do espalhamento numa colisão binária é através das trajetórias do movimento relativo. Estas trajetórias são obtidas através da determinação das coordenadas polares $(\varrho, \Theta(\varrho))$, cujo significado é ilustrado na fig. 4.3.

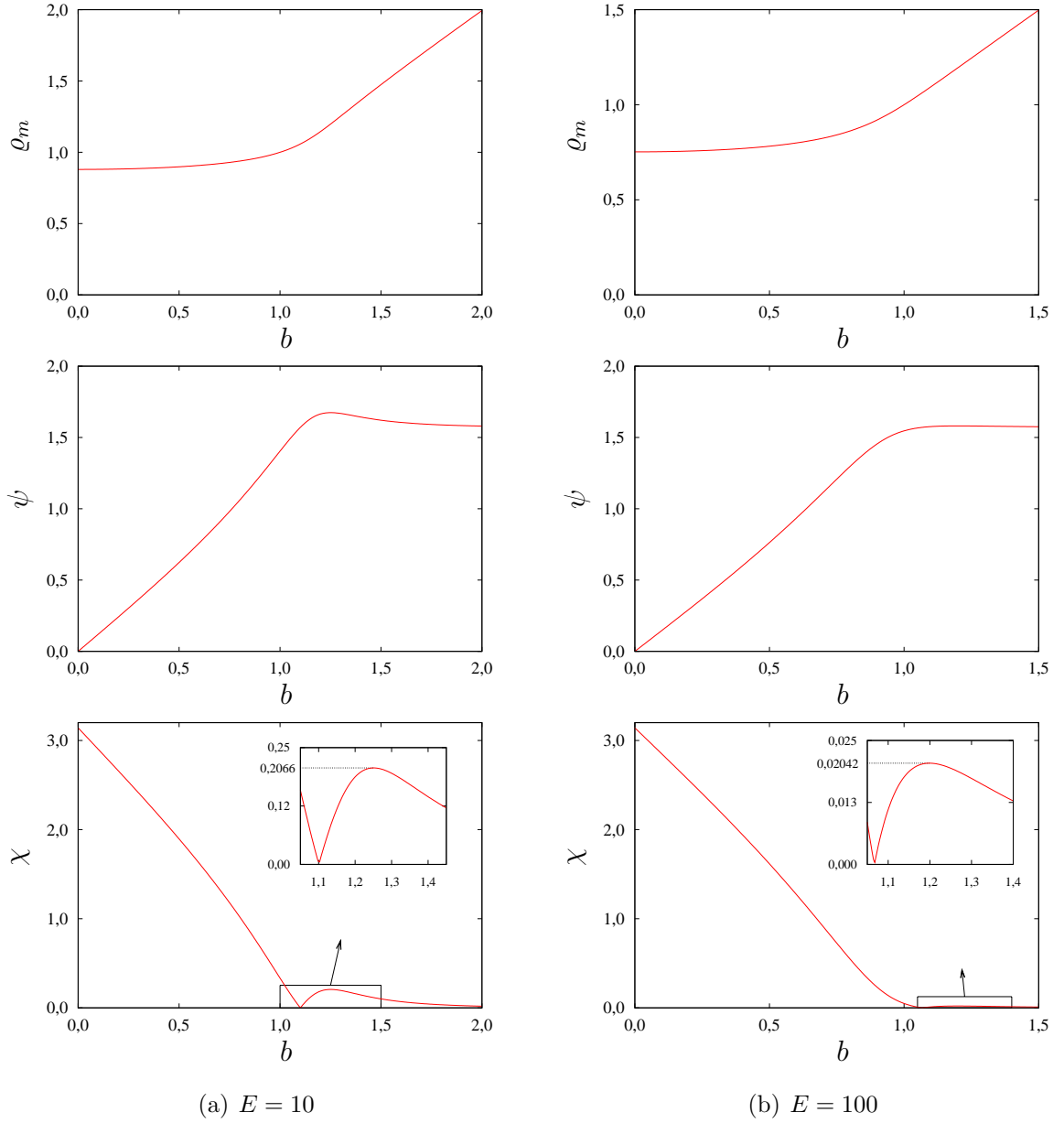


Figura 4.2: Distância de maior aproximação ϱ_m , ângulo de deflexão ψ e ângulo de espalhamento χ expressos como função do parâmetro de impacto b .

A relação entre ϱ e Θ é obtida através das equações do movimento [9] e é escrita como

$$\Theta(\varrho) = \frac{b}{\varrho_m} \int_0^{\frac{\varrho_m}{\varrho}} \left[1 - \left(\frac{bq}{\varrho_m} \right)^2 - \frac{1}{E} \mathcal{U} \left(\frac{\varrho_m}{q} \right) \right]^{-1/2} dq, \quad \varrho_m \leq \varrho < \infty. \quad (4.15)$$

Observe que $\Theta(\varrho_m) = \psi$, de acordo com as equações (4.15) e (4.3). A integral (4.15) é calculada utilizando o mesmo método para o cálculo de ψ .

As trajetórias calculadas para diversos valores de b e para $E \in \{0, 1, 1, 10, 100\}$

Tabela 4.1: Ângulo de espalhamento χ vs parâmetro de impacto b para alguns valores de E .

$E = 0,1$			$E = 1$			$E = 10$			$E = 100$		
b	χ		b	χ		b	χ		b	χ	
	Presente	Ref.[10]		Presente	Ref.[10]		Presente	Ref.[10]		Presente	Ref.[10]
2,838	0,3230	0,323	1,894	0,3682	0,369	1,477	0,1094	0,110	1,244	0,01961	0,020
2,696	0,5435	0,543	1,768	0,7700	0,768	1,334	0,1794	0,179	1,109	0,01309	0,013
2,643	0,7049	0,706	1,721	1,201	1,207	1,259	0,2062	0,206	1,035	0,01803	0,018
2,598	0,9437	0,945	1,698	1,683	1,689	1,205	0,1912	0,192	0,9812	0,07213	0,072
2,572	1,199	1,205	1,678	2,693	2,664	1,162	0,1402	0,141	0,9376	0,1452	0,145
2,544	1,977	1,998	1,668	3,062	3,105	1,123	0,05934	0,060	0,8990	0,2342	0,234
2,539	2,584	2,576	1,658	3,103	3,135	1,086	0,04310	0,043	0,8630	0,3361	0,336
2,538	2,903	2,346	1,643	2,699	2,784	1,049	0,1624	0,163	0,8280	0,4487	0,449
2,516	1,802	1,166	1,623	2,270	2,320	1,011	0,2943	0,297	0,7931	0,5698	0,570
2,503	2,324	1,944	1,596	1,850	1,871	0,9704	0,4389	0,440	0,7576	0,6983	0,699
2,470	3,081	2,867	1,563	1,473	1,470	0,9277	0,5905	0,592	0,7206	0,8344	0,835
2,456	2,984	3,106	1,522	1,117	1,109	0,8816	0,7505	0,752	0,6818	0,9771	0,978
2,400	2,356	2,509	1,473	0,7804	0,775	0,8315	0,9188	0,920	0,6403	1,128	1,129
2,328	1,819	1,943	1,415	0,4574	0,458	0,7762	1,097	1,099	0,5954	1,288	1,289
2,171	1,041	1,124	1,348	0,1463	0,148	0,7145	1,288	1,289	0,5461	1,459	1,460
1,996	0,4360	0,491	1,270	0,1624	0,161	0,6444	1,495	1,496	0,4908	1,646	1,646
1,881	0,1119	0,150	1,178	0,4781	0,474	0,5627	1,725	1,726	0,4272	1,854	1,854
1,593	0,5613	0,542	0,9410	1,151	1,149	0,4632	1,993	1,993	0,3507	2,096	2,097
1,119	1,444	1,437	0,5588	2,028	2,027	0,3302	2,335	2,335	0,2493	2,407	2,407

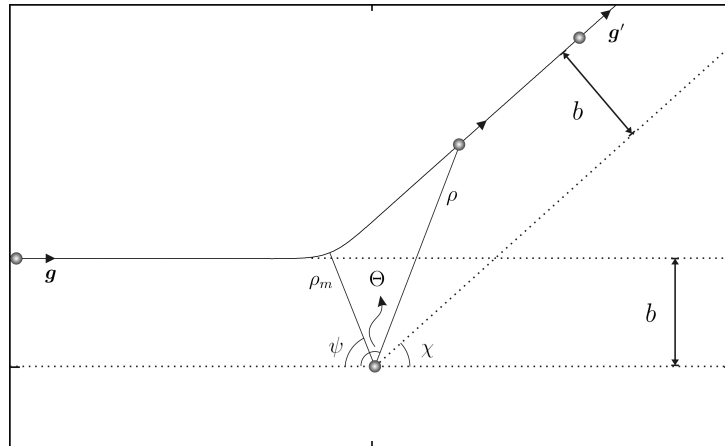
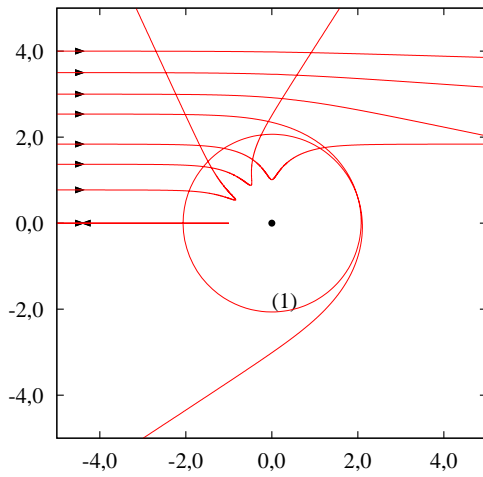


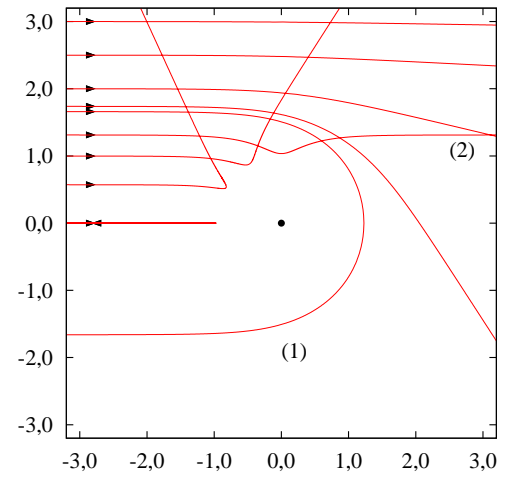
Figura 4.3: Coordenadas polares do movimento relativo numa colisão binária.

são mostradas na fig. 4.4. Na fig. 4.4(a) a trajetória indicada por (1) foi calculada para $b = b_a + 10^{-8}$, onde, reiterando, b_a é o parâmetro de impacto para o qual a partícula-bala orbita a partícula-alvo. Na fig. 4.4(b) duas trajetórias são destacadas, as quais ilustram o “espalhamento para trás” e o “espalhamento para frente”. As trajetórias (1) e (2) da fig. 4.4(c) ilustram a possibilidade de espalhamento na mesma direção a partir de

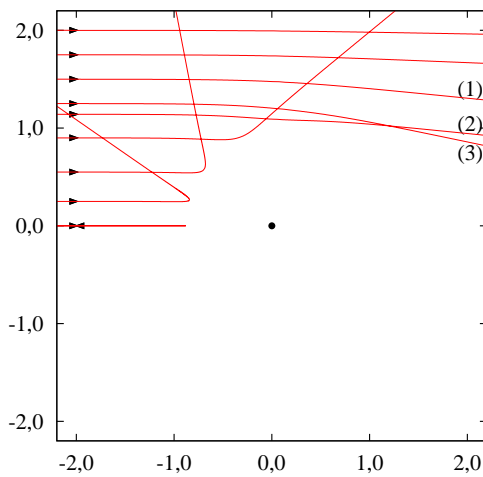
parâmetros de impactos diferentes. O maior ângulo de espalhamento entre as trajetórias (1) e (2) ocorre na trajetória (3). Por fim, observa-se a partir da fig. 4.4(d) que o efeito de repulsão das moléculas torna-se significativo quando a energia cinética do movimento relativo aumenta. As trajetórias da fig. 4.4(d) representam qualitativamente as trajetórias típicas de colisões para as quais a força intermolecular é exclusivamente repulsiva.



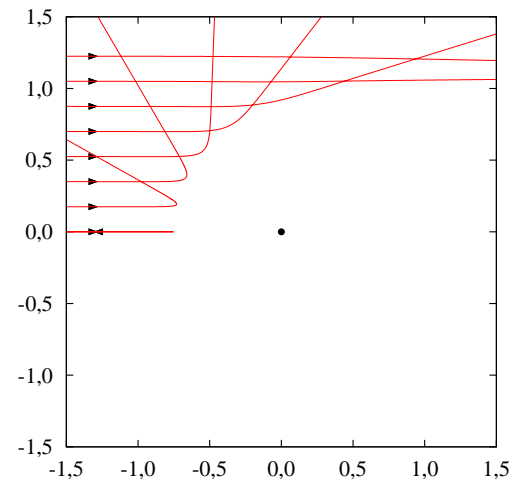
(a) $E = 0.1$



(b) $E = 1$



(c) $E = 10$



(d) $E = 100$

Figura 4.4: Trajetória do movimento relativo numa colisão binária para alguns valores da energia reduzida E .

4.1.3 Cálculo da seção de choque diferencial

Metodologia

A dificuldade numérica no cálculo σ deve-se à necessidade de se encontrar todas as raízes b_i de $\chi'(E, b)$ que satisfaçam $\chi'(E, b_i) = \chi$. Em alguns casos podem existir infinitas raízes e, além disso, $\chi'(E, b)$ pode apresentar máximos ou mínimos locais, os quais, de acordo com a eq. (4.5), fazem com que a seção de choque diferencial seja singular.

Dentre os métodos de cálculo da seção de choque diferencial clássica disponíveis na literatura é possível citar o método dos histogramas e o método da seção de choque incompleta. O método dos histogramas possui a vantagem de ser facilmente implementado computacionalmente, mesmo para colisões que envolvam moléculas complexas, e a desvantagem de apresentar resultados pouco precisos. Um método alternativo, conhecido como método da seção de choque incompleta, foi proposto por Gislason [44] no intuito de contornar tal imprecisão. Em virtude de sua eficiência, apenas o método da seção de choque incompleta será descrito e utilizado no que segue. Referências sobre o método dos histogramas podem ser encontradas em [44, 45].

A seção de choque incompleta $W(E, \chi)$ é definida como

$$W(E, \chi) = \int_{\chi}^{\pi} \sigma(E, \chi') \text{sen } \chi' d\chi'. \quad (4.16)$$

Note que a dependência em χ aparece apenas no limite de integração.

A essência do método de Gislason é encontrar uma expressão mais simples para $W(E, \chi)$, determiná-la para o potencial de interesse e obter dela a seção de choque diferencial.

A simplificação da expressão para W é feita da seguinte maneira. A eq. (4.5) é inserida na definição (4.16), o que produz

$$W(E, \chi) = \int_{\chi}^{\pi} \sum_i b_i \left| \frac{\partial \chi'}{\partial b} \Big|_{b_i} \right|^{-1} d\chi'. \quad (4.17)$$

Em seguida, utilizando a função delta de Dirac, a eq. (4.17) é reescrita como

$$W(E, \chi) = \int_0^{b_M} b \int_{\chi}^{\pi} \sum_i \delta(b - b_i) \left| \frac{\partial \chi'}{\partial b} \Big|_{b_i} \right|^{-1} d\chi' db, \quad (4.18)$$

onde um parâmetro de impacto máximo b_M foi introduzido. Finalmente, utilizando a seguinte propriedade da função delta

$$\delta(y(x)) = \sum_i \delta(x - x_i) \left| \frac{dy}{dx} \Big|_{x_i} \right|^{-1}, \quad (4.19)$$

onde x_i são as raízes de $y(x) = 0$, é possível escrever

$$\delta(\chi'(E, b)) = \sum_i \delta(b - b_i) \left| \frac{\partial \chi'}{\partial b} \Big|_{b_i} \right|^{-1}. \quad (4.20)$$

A partir da eq. (4.20), a eq. (4.18) é simplificada a

$$W(E, \chi) = \int_0^{b_M} b \mathcal{H}[\chi'(E, b) - \chi] db, \quad (4.21)$$

onde $\mathcal{H}(x)$ é a função degrau de Heaviside.

Uma vez determinado $W(E, \chi)$, a seção de choque diferencial é calculada por

$$\sigma(E, \chi) = -\frac{1}{\sin \chi} \frac{\partial}{\partial \chi} W(E, \chi). \quad (4.22)$$

Aplicação ao potencial de Lennard-Jones

Não é possível determinar a função W analiticamente para o potencial de Lennard-Jones. Mesmo recorrendo a métodos numéricos existem alguns inconvenientes. Note que o integrando da eq. (4.21) não é uma função suave de b , por isso não é possível aplicar quadraturas numéricas de alta ordem para integrá-lo. Neste caso é mais apropriado integrar a função utilizando o método dos retângulos:

$$W(E, \chi) = \sum_{i=1}^{N_c} b_{i-\frac{1}{2}} H\left(\chi'(E, b_{i-\frac{1}{2}}) - \chi\right) \Delta b, \quad \Delta b = \frac{b_M}{N_c}, \quad b_{i-\frac{1}{2}} = \Delta b \left(i - \frac{1}{2}\right), \quad (4.23)$$

onde N_c é um número inteiro. A desvantagem de se utilizar uma quadratura de baixa ordem é a necessidade de se tomar o número de pontos da quadratura N_c muito grande, o que pode comprometer a viabilidade do cálculo, visto que é necessário calcular $\chi(E, b)$ N_c vezes. Para contornar esta dificuldade a seguinte estratégia foi adotada: o ângulo de deflexão $\psi(E, b)$ é calculado para N_b valores de parâmetro de impacto uniformemente distribuídos entre 0 e b_M . Estes valores são então utilizados para interpolar ψ . A interpolação de ψ juntamente com a relação $\cos(2\psi) = \cos(\pi - \chi)$ fornecem as informações necessárias para o cálculo da quadratura (4.23).

Como se observa, o cálculo numérico de $W(E, \chi)$ para um par (E, χ) requer muito esforço computacional. Por este motivo, é conveniente calcular W para um conjunto discreto de valores (E_i, χ_j) , os quais serão utilizados para o cálculo da seção de choque diferencial.

A energia E e o ângulo de espalhamento χ foram discretizados de acordo com

$$E_i = (E_{max} - E_{min}) \left(\frac{i^2 - 1}{N_e^2 - 1} \right) + E_{min}, \quad 1 \leq i \leq N_e, \quad (4.24)$$

e

$$\chi_j = j\Delta\chi, \quad \Delta\chi = \frac{\pi}{N_\chi}, \quad 0 \leq j \leq N_\chi, \quad (4.25)$$

onde N_e e N_χ são inteiros. Com base nesta discretização, a seção de choque diferencial é aproximada por

$$\sigma(E_i, \chi_j) = -\frac{1}{\text{sen } \chi_j} \begin{cases} \frac{W_{i1} - W_{i0}}{\Delta\chi} & \text{se } j = 0, \\ \frac{W_{ij+1} - W_{ij-1}}{2\Delta\chi} & \text{se } 0 < j < N_\chi, \\ \frac{W_{iN_\chi} - W_{iN_\chi-1}}{\Delta\chi} & \text{se } j = N_\chi. \end{cases} \quad (4.26)$$

Este procedimento determina a seção de choque diferencial apenas para os valores discretos (E_i, χ_j) . Para os demais valores de suas variáveis, esta função é calculada através de uma interpolação bidimensional linear.

Neste trabalho os seguintes parâmetros numéricos foram utilizados: $b_M = 20$, $E_{min} = 10^{-3}$, $E_{max} = 10^3$, $N_b = 10^5$, $N_c = 10^8$, $N_e = 4000$ e $N_\chi = 5000$. O erro relativo cometido no cálculo de σ , estimado a partir da variação dos parâmetros numéricos, é de 0,1%.

A seção de choque diferencial para o potencial de Lennard-Jones é ilustrada nas figuras 4.5 e 4.6 para os quatro valores de E : 0,1, 1, 10, 100. As figuras também mostram a seção de choque incompleta W , ou melhor, $2\pi W/\sigma_T$, que fisicamente representa a probabilidade de uma molécula ser espalhada numa direção tal que o ângulo de espalhamento esteja entre χ e π . Naturalmente esta probabilidade deve ser finita, como observado nas figuras. Por outro lado, a seção de choque diferencial, que é proporcional à densidade de probabilidade de espalhamento entre χ e $\chi + d\chi$, pode apresentar singularidades. Mas qual a origem destas singularidades e seus significados físicos? Classicamente as singularidades estão associadas a três fenômenos de espalhamento: ao ângulo de espalhamento crítico (máximo ou mínimo local destacado nas figuras 4.1 e 4.2), ao espalhamento “para frente” ou “para trás” e ao enorme número de partículas espalhadas em torno de $\chi = 0$. Estes fenômenos de espalhamento, em adição ao fenômeno de órbita, também influenciam a seção de choque diferencial semiclássica. De acordo com [12], o fenômeno de órbita leva a uma ressonância bem localizada na seção de choque diferencial semiclássica, enquanto os outros três estão associados a fortes efeitos de difração.

Matematicamente, as singularidades da seção de choque diferencial podem ser

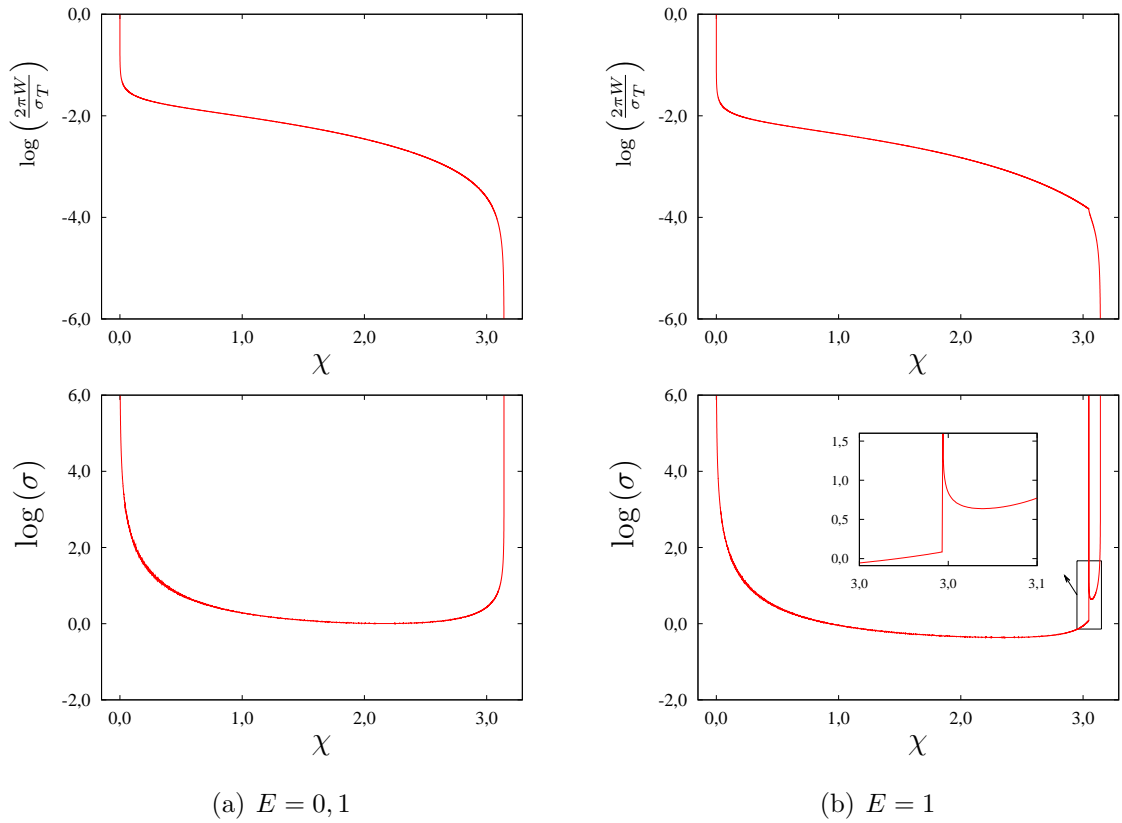


Figura 4.5: Seção de choque incompleta W e seção de choque diferencial σ vs ângulo de espalhamento χ para $E = 0, 1$ e $E = 1$.

observadas a partir da expressão (4.32):

$$\sigma(E, \chi) = \frac{1}{\text{sen } \chi} \sum_i b_i \left| \frac{\partial \chi'(E, b)}{\partial b} \right|_{b_i}^{-1}.$$

Observe que se b for não-nulo, então σ será singular se $\chi = 0$ ou $\chi = \pi$, o que justamente ocorre nos fenômenos espalhamento “para frente” ou “para trás”, explicitados na fig. 4.4(b) pelas trajetórias (1) e (2). De acordo com as figuras 4.1 e 4.2, tanto o espalhamento “para frente” quanto o espalhamento “para trás” ocorrem para $E = 0, 1$ e $E = 1$, ao passo que apenas o primeiro ocorre para $E = 10$ e $E = 100$. Isto explica o porquê de a seção de choque diferencial não ser singular em $\chi = \pi$ nas figuras 4.6(a) e 4.6(b).

Se o potencial de interação entre as moléculas for de alcance infinito, uma molécula qualquer do gás irá colidir com todas as demais. Entretanto, como apontado anteriormente, o espalhamento das moléculas será significativo somente se elas estiverem distantes alguns ângstrons uma das outras. Isto significa que a maioria das moléculas serão espalhadas em torno de $\chi = 0$. A implicação disto é uma singularidade na seção de choque

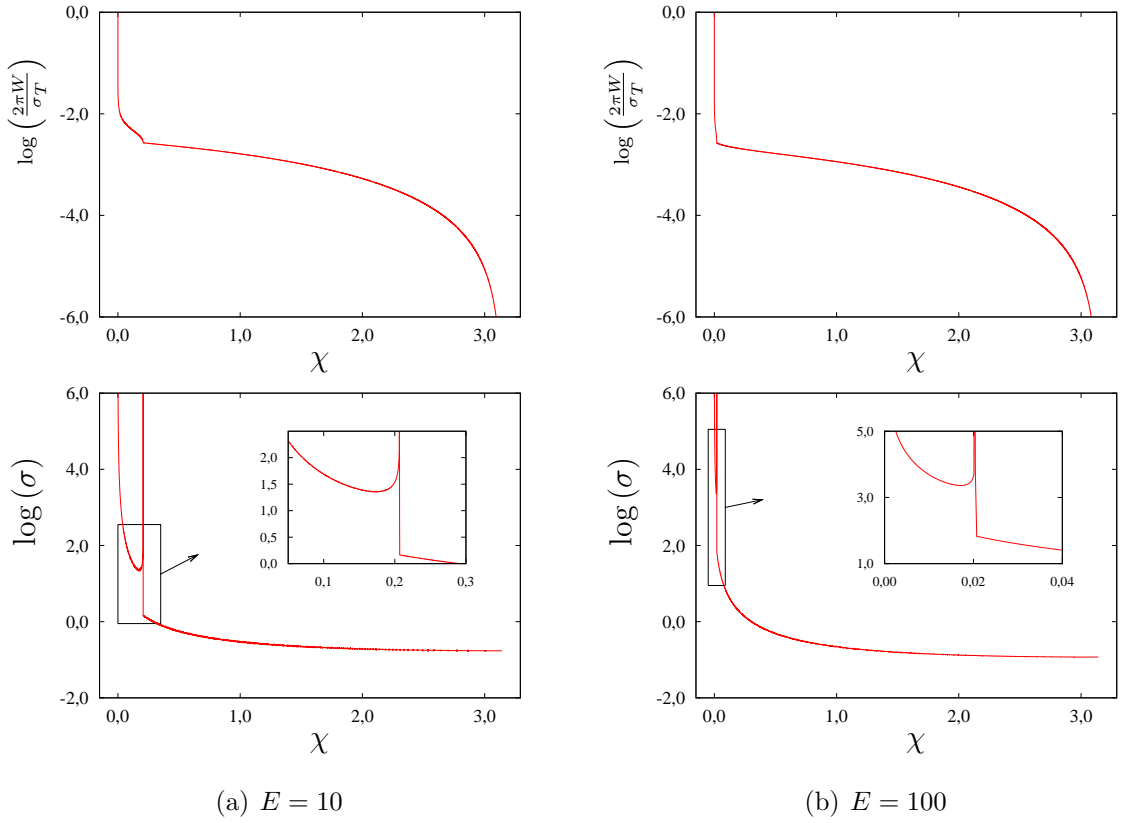


Figura 4.6: Seção de choque incompleta W e seção de choque diferencial σ vs ângulo de espalhamento χ para $E = 10$ e $E = 100$.

diferencial em $\chi = 0$. Neste trabalho, contudo, este tipo de singularidade não aparece devido à adoção de um parâmetro de impacto máximo, que restringe o número de moléculas colidentes.

Ao contrário do que acontece semiclassicamente, a seção de choque diferencial clássica não exhibe efeitos exóticos devido ao fenômeno de órbita, o que pode ser visto na fig. 4.5(a) ($E = 0, 1$).

4.2 Cálculo do operador de colisões

4.2.1 Parametrização

Além das variáveis sem dimensão da sec. 4.1.1, é conveniente introduzir agora a maxwelliana reduzida

$$\phi(\mathbf{c}) = \frac{v_m^3 f_0}{n_0} = \pi^{-3/2} \exp(-c^2). \quad (4.27)$$

Com base nas definições (4.1), (4.2) e (4.27), o operador de colisões (2.47) é escrito como

$$\widehat{L}'(h) = v_m a_m^2 n_0 \widehat{L}(h), \quad (4.28)$$

onde $\widehat{L}(h)$ é o operador de colisões reduzido, definido por

$$\widehat{L}(h) = \int \phi(\mathbf{c}_*) K(\mathbf{c}, \mathbf{c}_*) h(\mathbf{r}, \mathbf{c}_*) d\mathbf{c}_* - \nu(c) h(\mathbf{r}, \mathbf{c}). \quad (4.29)$$

O operador (4.29) incorpora outras duas grandezas parametrizadas, o núcleo reduzido $K(\mathbf{c}, \mathbf{c}_*)$, definido por

$$\begin{aligned} K(\mathbf{c}, \mathbf{c}_*) &= 2\pi \mathbf{g} \int_0^\pi \exp \left[- \left(\mathbf{g} \cot \frac{\chi}{2} \right)^2 \right] I_0 \left(2 |\mathbf{c} \times \mathbf{c}_*| \cot \frac{\chi}{2} \right) \\ &\times \left[\sigma \left(\frac{E}{\text{sen} \frac{\chi}{2}}, \chi \right) + \sigma \left(\frac{E}{\text{sen} \frac{\chi}{2}}, \pi - \chi \right) \right] \frac{\text{sen} \chi}{\text{sen}^4 \frac{\chi}{2}} d\chi - \mathbf{g} \sigma_T \end{aligned} \quad (4.30)$$

e a frequência de colisões reduzida

$$\nu(c) = \frac{\sigma_T}{\sqrt{\pi}} \left[e^{-c^2} + \left(2c + \frac{1}{c} \right) \int_0^c e^{-\eta^2} d\eta \right]. \quad (4.31)$$

4.2.2 Metodologia de cálculo do núcleo

Haja vista que em geral não é possível determinar a seção de choque diferencial, a não ser de maneira numérica, o mesmo pode ser esperado do núcleo K . Antes de aplicar uma quadratura numérica para integrá-lo, porém, é importante observar que seu integrando pode apresentar singularidades.

Como apontado na seq. 4.1.3, a seção de choque diferencial pode apresentar singularidades para alguns valores de χ . Entretanto, a integral de $\sigma(E, \chi) \text{sen} \chi$ existe, isto é, as singularidades são integráveis. O que aparece na expressão do núcleo, contudo, é

$$\left[\sigma \left(\frac{E}{\text{sen} \frac{\chi}{2}}, \chi \right) + \sigma \left(\frac{E}{\text{sen} \frac{\chi}{2}}, \pi - \chi \right) \right] \text{sen} \chi, \quad (4.32)$$

sob o qual não se pode inferir integrabilidade.

Além disso, o termo C , complementar ao termo (4.32) no integrando da eq. (4.30), isto é,

$$C = 2\pi \mathbf{g} \exp \left[- \left(\mathbf{g} \cot \frac{\chi}{2} \right)^2 \right] I_0 \left(2 |\mathbf{c} \times \mathbf{c}_*| \cot \frac{\chi}{2} \right) \text{sen}^{-4} \frac{\chi}{2} \quad (4.33)$$

não é definido em $\chi = 0$. Entretanto, é possível mostrar que

$$\begin{cases} \lim_{\chi \rightarrow 0} C = 0 & \text{se } \mathbf{g} \neq 0, \\ \lim_{(\chi, g) \rightarrow (0, 0)} C & \text{não existe.} \end{cases} \quad (4.34)$$

Isso sugere que K pode apresentar uma singularidade em $\mathbf{g} = 0$. Contudo, como será mostrado adiante, não é preciso conhecer K em $\mathbf{g} = 0$ a fim de calcular o operador de colisões.

Aplicação ao potencial de Lennard-Jones

Embora não se tenha certeza sobre sua convergência, o núcleo referente ao potencial de Lennard-Jones foi calculado aproximadamente utilizando uma quadratura baseada no método de Simpson composto com $N_\chi + 1 = 5001$ pontos uniformemente distribuídos entre $\chi = 0$ e $\chi = \pi$. O ponto em $\chi = 0$ não foi considerado devido ao resultado (4.34). A validade desta aproximação será confirmada através dos resultados do cálculo dos coeficientes de transporte.

4.2.3 Metodologia de cálculo do operador de colisões

Na seq. 4.2.2 foi dito que o núcleo do operador de colisões pode divergir quando $\mathbf{g} = 0$. Esta possível singularidade pode ser contornada com base nos princípios de conservação (2.31), os quais, em termos das parametrizações (4.1) e (4.2), podem ser reescritos como

$$\int \phi(\mathbf{c}_*) K(\mathbf{c}, \mathbf{c}_*) \Psi(\mathbf{c}_*) d\mathbf{c}_* = \nu(c) \Psi(\mathbf{c}). \quad (4.35)$$

Isolando ν da última equação e o inserindo na eq. (4.29), obtém-se

$$\widehat{L}(h) = \int \phi(\mathbf{c}_*) K(\mathbf{c}, \mathbf{c}_*) \left[h(\mathbf{r}, \mathbf{c}_*) - \frac{\Psi(\mathbf{c}_*)}{\Psi(\mathbf{c})} h(\mathbf{r}, \mathbf{c}) \right] d\mathbf{c}_*. \quad (4.36)$$

Note que quando $\mathbf{c}_* \rightarrow \mathbf{c}$, isto é, quando $\mathbf{g} \rightarrow 0$, o núcleo pode divergir, entretanto o termo entre colchetes tende a zero. Devido aos princípios de conservação, o operador de colisões deveria levar a resultados finitos. Deste modo, se o núcleo apresentar singularidades, então elas deveriam ser integráveis.

A forma como o operador de colisões foi escrito na eq. (4.36) elimina a necessidade de se calcular K para $\mathbf{g} = 0$ e, além disso, torna o integrando uma função mais suave em torno de $\mathbf{g} = 0$, o que, por sua vez, permite a aplicação das quadraturas numéricas usuais para avaliá-lo.

Capítulo 5

Coeficientes de transporte

A determinação dos coeficientes de transporte por dois métodos, o método das aproximações de Chapman-Cowling e através da solução numérica direta das equações integrais a eles relacionados é apresentada neste capítulo. Os coeficientes de transporte são obtidos para o potencial de esferas rígidas e de Lennard-Jones.

5.1 Método de Chapman-Cowling

No cap. 4 foi apontado que o desvio dos resultados relativos ao ângulo de espalhamento apresentados por Hirschfelder *et al.* [6] e aqueles apresentados neste trabalho pode exceder 35%. Esta imprecisão nos dados da ref. [6] pode também estar refletida nas integrais- Ω e, por conseguinte, nos coeficientes de transporte. Por este motivo as integrais- Ω reduzidas foram recalculadas para o potencial de Lennard-Jones. A metodologia de cálculo e os resultados obtidos são descritos nas próximas seções.

5.1.1 Parametrização

Com base na definição das integrais- Ω (2.74) e na eq. (4.1), a eq. (3.3) pode ser reescrita como

$$\Omega^{(l,r)*} = \left\{ 2^{r+1} \pi (r+1)! \left[1 - \frac{1 + (-1)^l}{2(l+1)} \right] \right\}^{-1} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\mathbf{g}^2}{2}\right) \mathbf{g}^{(2r+3)} Q^{(l)}(E) d\mathbf{g}, \quad (5.1)$$

onde $Q^{(l)}(E)$ são as seções de choque de transporte reduzidas, definidas como

$$Q^{(l)}(E) = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^l \chi(E, b)) b db. \quad (5.2)$$

A eq. (5.1) pode ser escrita de uma maneira mais conveniente utilizando-se a relação entre E e \mathbf{g} da eq. (4.2), isto é,

$$E = T^* \frac{\mathbf{g}^2}{2}, \quad T^* = \frac{kT_0}{\varepsilon},$$

o que produz,

$$\Omega^{(l,r)*} = \left\{ \pi (T^*)^{r+2} (r+1)! \left[1 - \frac{1 + (-1)^l}{2(l+1)} \right] \right\}^{-1} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{E}{T^*}\right) E^{r+1} Q^{(l)}(E) dE. \quad (5.3)$$

Observe que a eq. (5.3) explicita a dependência de $\Omega^{(l,r)*}$ com T^* .

Os coeficientes de transporte reduzidos (3.5) são obtidos na n -ésima aproximação do método de Chapman-Cowling por

$$\kappa^{(n)} = \frac{75}{\sqrt{2\pi}64} \frac{f_\kappa^{(n)}}{\Omega^{(2,2)*}} \quad (5.4)$$

e

$$\mu^{(n)} = \frac{5}{\sqrt{2\pi}16} \frac{f_\mu^{(n)}}{\Omega^{(2,2)*}}. \quad (5.5)$$

5.1.2 Cálculo das integrais $\Omega^{(l,r)*}$

A seção de choque de transporte $Q^{(l)}(E)$, eq. (5.2), envolve uma integral imprópria. Para calculá-la numericamente, o seguinte truncamento é feito

$$Q^{(l)}(E) \approx 2\pi \int_0^{b_c} (1 - \cos^l \chi(E, b)) b db. \quad (5.6)$$

onde b_c é escolhido de modo que χ seja menor que um valor mínimo χ_m para todo b maior que b_c . Em seguida a integral (5.6) é calculada com base no método de Simpson adaptativo. O valor de χ_m é escolhido de maneira a garantir certa precisão numérica a $Q^{(l)}$.

Assim como $Q^{(l)}$, as integrais $\Omega^{(l,r)*}$ também são impróprias. Neste caso $\Omega^{(l,r)*}$ é aproximado da seguinte maneira

$$\Omega^{(l,r)*} = \left\{ \pi (T^*)^{r+2} (r+1)! \left[1 - \frac{1 + (-1)^l}{2(l+1)} \right] \right\}^{-1} \int_{E_{min}}^{E_{max}} \exp\left(-\frac{E}{T^*}\right) E^{r+1} Q^{(l)}(E) dE. \quad (5.7)$$

onde E_{min} e E_{max} são escolhidos de modo a garantir certa precisão à função. A função $\Omega^{(l,r)*}$ é então integrada utilizando-se o método de Simpson composto, sendo que a distribuição dos pontos de integração é feita de acordo com a eq. (4.24).

Os parâmetros numéricos utilizados neste trabalho foram $\chi_m = 2 \times 10^{-3}$, $E_{min} = 1 \times 10^{-3}$, $E_{max} = 2 \times 10^4$ e $N_e = 5 \times 10^4$. Estima-se que o erro numérico cometido no cálculo de $\Omega^{(l,r)*}$ com estes parâmetros seja de 10^{-5} .

5.1.3 Resultados

Como apontado na seq. 5.1.1, as integrais- Ω , fundamentais na aproximação de Chapman-Cowling, dependem de apenas um parâmetro, T^* , que no caso do potencial de Lennard-Jones escreve-se $T^* = kT_0/\varepsilon$. A tab. 5.1 apresenta as integrais- Ω reduzidas calculadas neste trabalho e as calculadas na ref. [6] para alguns valores de T^* .

Tabela 5.1: Integrais- Ω reduzidas $\Omega^{(l,r)*}$.

	$T^* = 0,3$		$T^* = 1$		$T^* = 10$	
	Presente	Ref.[10]	Presente	Ref.[10]	Presente	Ref.[10]
$\Omega^{(1,1)*}$	2,650	2,662	1,440	1,439	0,7422	0,7424
$\Omega^{(1,2)*}$	2,257	2,256	1,204	1,204	0,7008	0,7013
$\Omega^{(1,3)*}$	1,966	1,962	1,076	1,076	0,6733	0,6735
$\Omega^{(2,2)*}$	2,844	2,785	1,593	1,587	0,8244	0,8242
$\Omega^{(2,3)*}$	2,581	2,535	1,389	1,387	0,7927	0,7922
$\Omega^{(2,4)*}$	2,362	2,333	1,259	1,258	0,7693	0,7690
$\Omega^{(2,5)*}$	2,170	2,152	1,172	1,172	0,7507	0,7501
$\Omega^{(2,6)*}$	2,001	1,990	1,113	1,113	0,7352	0,7345
$\Omega^{(4,4)*}$	2,571	2,557	1,381	1,377	0,8000	0,7988

Embora as discordâncias acerca do ângulo de espalhamento apresentado neste trabalho e aquele apresentado na ref. [6] possam ultrapassar 35%, o desvio relativo das integrais- Ω reduzidas não excede 2%, conforme a tab. 5.1.

Com o intuito de comparar os resultados do método de Chapman-Cowling com aqueles obtidos diretamente da solução numérica das equações integrais (2.60) e (2.70), os coeficientes κ e μ foram calculados e tabulados para alguns valores de T^* . Os valores de T^* selecionados são apresentados na tab. 5.2, que também apresenta a relação entre T_0 e T^* para os gases nobres com base nos parâmetros da tab. 2.1. As sucessivas aproximações do coeficiente de condutividade térmica e do coeficiente de viscosidade, para os valores de

T^* escolhidos, são apresentados, respectivamente, nas tabelas 5.3 e 5.4. Destas tabelas observa-se que a diferença relativa entre as duas últimas aproximações não excede 0,08% no caso da condutividade térmica e 0,05% no caso da viscosidade.

Tabela 5.2: Relação entre T^* e T_0 para os gases nobres com base nos parâmetros da tab. 2.1.

T^*	$T_0(\text{K})$				
	He	Ne	Ar	Kr	Xe
1,31	13	47	162	249	300
1,58	16	56	196	300	362
2,42	25	86	300	460	554
8,40	86	300	1042	1597	1924
29,35	300	1048	3640	5577	6722

Tabela 5.3: As três primeiras aproximações do método de Chapman-Cowling para o coeficiente condutividade térmica reduzido κ com base no potencial de Lennard-Jones.

T^*	$\kappa^{(1)}$	$\kappa^{(2)}$	$\kappa^{(3)}$
1,31	0,33476	0,33481	0,33485
1,58	0,36321	0,36346	0,36349
2,42	0,42335	0,42479	0,42479
8,40	0,55388	0,55982	0,56018
29,35	0,66499	0,67264	0,67320

Tabela 5.4: As três primeiras aproximações do método de Chapman-Cowling para o coeficiente de viscosidade reduzido μ com base no potencial de Lennard-Jones.

T^*	$\mu^{(1)}$	$\mu^{(2)}$	$\mu^{(3)}$
1,31	0,089269	0,089278	0,089282
1,58	0,096855	0,096899	0,096902
2,42	0,11289	0,11314	0,11314
8,40	0,14770	0,14873	0,14878
29,35	0,17733	0,17866	0,17873

Os resultados do método de Chapman-Cowling foram comparados com os dados experimentais da ref. [46]. As tabelas 5.5 e 5.6 apresentam, respectivamente, o coeficiente de condutividade térmica e de viscosidade para os gases nobres. Para simplificar a compreensão dos resultados, estes dados também são apresentados na fig. 5.1. A partir das tabelas supracitadas, observa-se que a diferença relativa entre os resultados teóricos e experimentais pode chegar a 14%. Isto ocorre porque o potencial de Lennard-Jones é apenas um modelo, não o potencial real de interação intermolecular. Os resultados para os quais tal diferença relativa é menor que 2% estão em **negrito** nas tabelas 5.2, 5.5 e 5.6.

5.2 Solução numérica direta

5.2.1 Parametrização

Utilizando as grandezas reduzidas (4.1) e (4.28), as equações integrais para o coeficiente de condutividade térmica (2.60) e de viscosidade (2.70) tornam-se, respectivamente,

$$\widehat{L}(A(c)c_x) + c_x \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) = 0 \quad (5.8)$$

e

$$\widehat{L}(c_x c_y B(c)) + 2c_x c_y = 0. \quad (5.9)$$

Ainda com base nas definições (4.1) e (4.28), a restrição imposta a A , eq. (2.61), torna-se

$$\int \phi(\mathbf{c}) A(c) c_x^2 d\mathbf{c} = 0. \quad (5.10)$$

Uma vez resolvidas as equações (5.8) e (5.9), o coeficiente de condutividade térmica e o de viscosidade reduzidos são calculados, respectivamente, como

$$\kappa = \int \phi(\mathbf{c}) c_x^2 \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) A(c) d\mathbf{c} \quad (5.11)$$

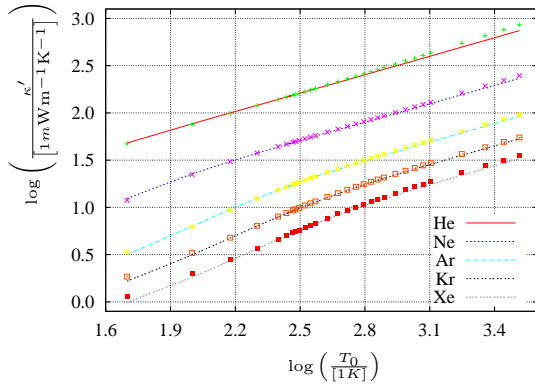
e

$$\mu = \int \phi(\mathbf{c}) (c_x c_y)^2 B(c) d\mathbf{c}. \quad (5.12)$$

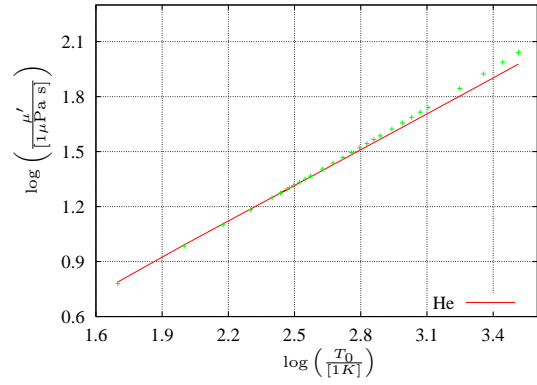
A relação entre κ , μ e suas respectivas grandezas dimensionais é

$$\kappa' = \kappa \frac{kv_m}{a_m^2}, \quad \mu' = \mu \frac{mv_m}{a_m^2}, \quad (5.13)$$

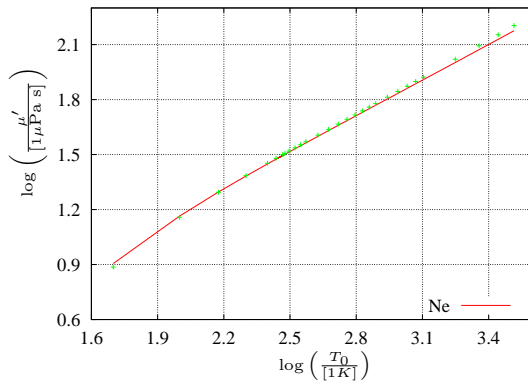
onde $a_m = d$ para o potencial de esferas rígidas e $a_m = \rho_0$ para o potencial de Lennard-Jones.



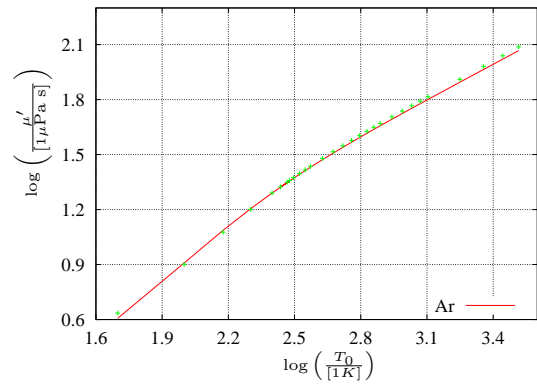
(a) Gases nobres



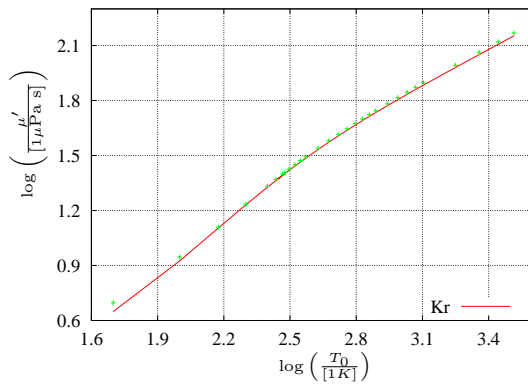
(b) Hélio



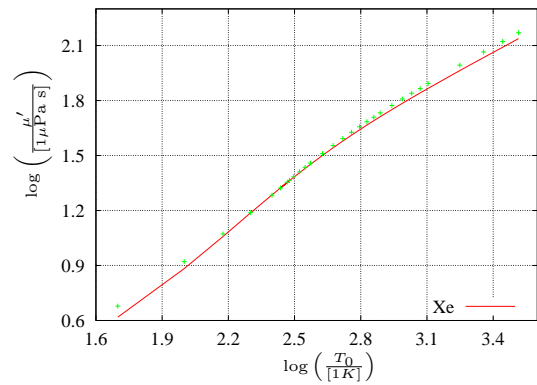
(c) Neônio



(d) Argônio



(e) Kriptônio



(f) Xenônio

Figura 5.1: Coeficientes de condutividade térmica κ' de viscosidade μ' vs temperatura T_0 . As linhas representam os resultados obtidos pelo método de Chapman-Cowling, ao passo que os pontos são os dados experimentais da ref. [46].

Tabela 5.5: Coeficiente de condutividade térmica κ' vs temperatura T_0 . Resultados experimentais ref. [46] e do método de Chapman-Cowling (C-C).

T_0 (K)	κ' (mW/m K)									
	He		Ne		Ar		Kr		Xe	
	C-C	Ref. [46]	C-C	Ref. [46]	C-C	Ref. [46]	C-C	Ref. [46]	C-C	Ref. [46]
50	48.06	47.17	12.44	11.89	3.16	3.38	1.66	1.85	0.99	1.13
100	76.68	75.54	22.61	22.26	6.32	6.22	3.13	3.29	1.81	1.98
150	99.88	98.63	30.64	30.54	9.52	9.32	4.74	4.78	2.72	2.81
200	120.32	119.32	37.49	37.63	12.50	12.41	6.36	6.38	3.66	3.66
250	138.99	138.53	43.62	43.96	15.23	15.23	7.92	8.00	4.58	4.57
300	156.37	156.66	49.26	49.77	17.74	17.83	9.40	9.52	5.48	5.50
273	147.18	147.04	46.28	46.71	16.42	16.46	8.61	8.72	5.00	5.00
293	154.06	154.23	48.51	49.00	17.41	17.49	9.20	9.32	5.36	5.37
313	160.77	161.29	50.67	51.22	18.37	18.49	9.77	9.91	5.71	5.75
333	167.34	168.22	52.78	53.39	19.30	19.46	10.33	10.48	6.05	6.11
353	173.77	175.04	54.85	55.51	20.21	20.41	10.88	11.04	6.39	6.48
373	180.08	181.75	56.86	57.58	21.09	21.33	11.41	11.59	6.72	6.83
423	195.36	198.11	61.73	62.57	23.20	23.55	12.70	12.91	7.52	7.69
473	210.02	213.96	66.38	67.34	25.20	25.64	13.91	14.16	8.28	8.52
523	224.16	229.37	70.85	71.93	27.10	27.65	15.08	15.36	9.01	9.31
573	237.85	244.39	75.17	76.38	28.92	29.56	16.19	16.51	9.71	10.06
623	251.13	259.07	79.35	80.69	30.67	31.40	17.25	17.61	10.38	10.79
673	264.06	273.44	83.42	84.90	32.35	33.18	18.28	18.67	11.03	11.50
723	276.65	287.54	87.37	89.00	33.99	34.90	19.27	19.70	11.65	12.18
773	288.96	301.39	91.23	93.02	35.57	36.56	20.23	20.69	12.26	12.84
873	312.79	328.43	98.69	100.83	38.61	39.76	22.07	22.60	13.41	14.11
973	335.72	354.70	105.85	108.36	41.51	42.80	23.81	24.41	14.51	15.31
1073	357.85	380.30	112.76	115.67	44.30	45.72	25.47	26.14	15.55	16.46
1173	379.28	405.33	119.45	122.78	46.97	48.52	27.07	27.80	16.55	17.56
1273	400.12	429.84	125.94	129.72	49.57	51.23	28.61	29.40	17.52	18.62
1773	497.04	546.30	156.10	162.33	61.50	63.73	35.67	36.72	21.91	23.44
2273	585.04	655.33	183.43	192.41	72.24	75.08	41.96	43.25	25.82	27.70
2773	666.75	759.14	208.76	220.73	82.14	85.73	47.75	49.30	29.40	31.60
3273	743.50	859.01	232.58	247.69	91.43	95.86	53.16	55.05	32.75	35.24

5.2.2 Redução de variáveis

De acordo com a ref. [2], é possível reduzir uma variável no espaço de velocidades se a seguinte mudança de variáveis for feita

Tabela 5.6: Coeficiente de viscosidade μ' vs temperatura T_0 . Resultados experimentais ref. [46] e do método de Chapman-Cowling (C-C).

T_0 (K)	μ' ($\mu\text{Pa s}$)									
	He		Ne		Ar		Kr		Xe	
	C-C	Ref. [46]	C-C	Ref. [46]	C-C	Ref. [46]	C-C	Ref. [46]	C-C	Ref. [46]
50	6.15	6.04	8.05	7.70	4.05	4.32	4.46	4.97	4.15	4.77
100	9.80	9.66	14.61	14.39	8.10	7.97	8.42	8.85	7.64	8.34
150	12.77	12.61	19.77	19.72	12.20	11.94	12.74	12.86	11.44	11.81
200	15.38	15.26	24.18	24.29	16.02	15.89	17.09	17.15	15.39	15.42
250	17.76	17.72	28.12	28.36	19.50	19.50	21.28	21.50	19.30	19.23
300	19.99	20.04	31.75	32.10	22.70	22.83	25.25	25.59	23.08	23.16
273	18.81	18.81	29.84	30.13	21.02	21.08	23.14	23.43	21.07	21.04
293	19.69	19.73	31.27	31.60	22.28	22.39	24.72	25.05	22.57	22.62
313	20.55	20.63	32.66	33.04	23.50	23.66	26.25	26.63	24.04	24.19
333	21.39	21.52	34.02	34.43	24.69	24.90	27.75	28.16	25.49	25.75
353	22.21	22.40	35.35	35.80	25.85	26.11	29.22	29.67	26.91	27.28
373	23.02	23.25	36.65	37.13	26.97	27.29	30.65	31.14	28.30	28.77
423	24.97	25.35	39.78	40.35	29.66	30.11	34.09	34.67	31.66	32.39
473	26.84	27.38	42.78	43.42	32.20	32.79	37.35	38.02	34.86	35.85
523	28.65	29.35	45.66	46.38	34.62	35.34	40.46	41.22	37.92	39.16
573	30.40	31.28	48.44	49.25	36.94	37.78	43.43	44.28	40.84	42.34
623	32.10	33.16	51.13	52.03	39.17	40.12	46.27	47.23	43.66	45.40
673	33.75	35.00	53.75	54.74	41.31	42.39	49.02	50.07	46.36	48.36
723	35.36	36.80	56.30	57.39	43.39	44.57	51.66	52.81	48.98	51.22
773	36.94	38.58	58.78	59.99	45.41	46.70	54.22	55.47	51.50	53.99
873	39.98	42.04	63.59	65.02	49.29	50.77	59.13	60.57	56.34	59.30
973	42.91	45.41	68.20	69.89	52.98	54.65	63.79	65.41	60.92	64.34
1073	45.74	48.69	72.66	74.60	56.52	58.36	68.23	70.03	65.29	69.15
1173	48.48	51.90	76.97	79.19	59.94	61.94	72.50	74.46	69.48	73.36
1273	51.15	55.04	81.15	83.67	63.24	65.39	76.62	78.74	73.51	78.19
1773	63.54	69.96	100.59	104.72	78.46	81.33	95.47	98.30	91.91	98.37
2273	74.79	83.94	118.20	124.15	92.15	95.84	112.31	115.79	108.27	116.23
2773	85.24	97.24	134.53	142.44	104.78	109.45	127.79	132.02	123.28	132.57
3273	95.05	110.04	149.89	159.85	116.63	122.39	142.27	147.42	137.30	147.84

$$(c_x, c_y, c_z) \rightarrow (c_x, c_r \cos \theta, c_r \sin \theta). \quad (5.14)$$

Com base na transformação (5.14), a eq. (5.8) torna-se

$$\widehat{L}_1(A(c)c_x) + c_x \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) = 0, \quad (5.15)$$

onde L_1 é o operador de colisões modificado do primeiro tipo, dado por

$$\widehat{L}_1(h) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \phi(\mathbf{c}_*) K_1(c_x, c_r, c_{x_*}, c_{r_*}) [h(c_{x_*}, c_{r_*}) - h(c_x, c_r)] c_{r_*} dc_{r_*} dc_{x_*}. \quad (5.16)$$

A última expressão foi obtida da eq. (4.36) utilizando-se $\Psi = 1$. O núcleo modificado do primeiro tipo K_1 que aparece na eq. (5.16) é definido como

$$K_1(c_x, c_r, c_{x_*}, c_{r_*}) = 2 \int_0^\pi K(c_x, c_r, c_{x_*}, c_{r_*}, \beta) d\beta, \quad \beta = \theta_* - \theta. \quad (5.17)$$

Ainda com base na mudança de variáveis (5.14), o vínculo sobre A , eq. (5.10), torna-se

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \exp(-c_x^2 - c_r^2) c_x^2 A(c) c_r dc_r dc_x = 0, \quad (5.18)$$

ao passo que κ é calculado por

$$\kappa = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \phi(\mathbf{c}) c_x^2 \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) A c_r dc_r dc_x. \quad (5.19)$$

Analogamente ao coeficiente de condutividade térmica, é possível reduzir uma variável no espaço de velocidades do problema da viscosidade com base na transformação (5.14). Neste caso a equação integral (5.9) torna-se

$$\widehat{L}_2(c_x c_r B) + 2c_x c_r = 0, \quad (5.20)$$

onde

$$\widehat{L}_2(h) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \phi(\mathbf{c}_*) K_2(c_x, c_r, c_{x_*}, c_{r_*}) \left[h(c_{x_*}, c_{r_*}) - \frac{c_{r_*}}{c_r} h(c_x, c_r) \right] c_{r_*} dc_{r_*} dc_{x_*} \quad (5.21)$$

é o operador de colisões modificado do segundo tipo, obtido da eq. (4.36) utilizando-se as transformações (5.14) e $\Psi = c_y$. O núcleo modificado K_2 é dado por

$$K_2(c_x, c_r, c_{x_*}, c_{r_*}) = 2 \int_0^\pi K(c_x, c_r, c_{x_*}, c_{r_*}, \beta) \cos \beta d\beta, \quad \beta = \theta - \theta_*. \quad (5.22)$$

Com base na transformação (5.14), o coeficiente de viscosidade reduzido (5.12) torna-se

$$\mu = \pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \phi(\mathbf{c}) c_x^2 c_r^3 B dc_r dc_x. \quad (5.23)$$

5.2.3 Procedimento numérico

Antes de resolver as equações (5.15) e (5.20) é necessário calcular os núcleos modificados K_1 e K_2 . Tendo em vista que o método de cálculo do núcleo K já foi indicado na seq. 4.2.2, resta apenas calcular as integrais das equações (5.17) e (5.22). Neste trabalho estas integrais são calculadas com base no método de Simpson composto usando N_θ intervalos regularmente espaçados.

Calculados os núcleos modificados, as equações (5.15) e (5.20) são resolvidas numericamente com base no método de velocidades discretas ref. [13, 47]. De acordo com este método, o espaço de velocidades é restrito a um conjunto finito de velocidades para as quais a equação de interesse deve ser resolvida. Para o problema dos coeficientes de transportes, em particular, as equações (5.15) e (5.20) são transformadas em sistemas de equações algébricas acopladas que devem ser resolvidos simultaneamente. A escolha adequada das velocidades é imprescindível para que o método forneça bons resultados. Em geral a escolha é feita de modo que a discretização das componentes da velocidades coincida com a distribuição de nós $\{s_i\}$ da seguinte quadratura

$$\int_0^\infty \exp(-s^2) f_g(s) ds \approx \sum_{i=1}^N f_g(s_i) W_i, \quad (5.24)$$

onde $f_g(s)$ é uma função arbitrária e W_i é o peso da quadratura associado ao nó s_i .

Os nós e pesos da quadratura (5.24) selecionados neste trabalho são listados abaixo:

- $R_1(N)$: Os nós e pesos selecionados são aqueles de uma quadratura de Gauss-Hermite com N pontos. De acordo com o teorema fundamental da quadratura gaussiana [43], a integral (5.24) é exata sempre $f_g(s)$ for um polinômio de grau menor que $2N$.
- $R_2(N, M)$: Primeiramente a integral (5.24) é truncada como

$$\int_0^S \exp(-s^2) f_g(s) ds, \quad (5.25)$$

assumindo que $|\exp(-s^2) f_g(s)| \ll 1$ para $S < s$. Em seguida o intervalo de integração é dividido em N subintervalos

$$\int_0^S \exp(-s^2) f_g(s) ds \approx \sum_{k=1}^N \int_{s'_{k-1}}^{s'_k} \exp(-s^2) f_g(s) ds, \quad (5.26)$$

onde os s'_k são dados por

$$s'_k = S \left(\frac{k}{N} \right)^{1,8}, \quad S = 5. \quad (5.27)$$

Cada integral do lado direito da eq. (5.26) é então aproximada por uma quadratura de Gauss-Legendre de M pontos no intervalo $s'_{k-1} \leq s \leq s'_k$:

$$\int_{s'_{k-1}}^{s'_k} \exp(-s^2) f_g(s) ds \approx \sum_{i=M(k-1)+1}^{Mk} f_g(s_i) W_i, \quad (5.28)$$

onde s_i e $(W_i \exp(s_i^2))$ são, respectivamente, os nós e pesos da quadratura especificada.

Observe que o número total de pontos nesta quadratura é NM .

- $R_3(N, M)$: Idêntico a $R_2(N, M)$, exceto pela distribuição s'_k , que neste caso é dada por

$$s'^{(k)} = 5 \cdot 10^{-2} \left(44 \frac{k}{N} \right) + 3,125 \cdot 10^{-5} \left(44 \frac{k}{N} \right)^3, \quad (5.29)$$

em concordância com a eq. (C2a) da ref. [2].

- $R_4(N, M)$: Idêntico a $R_2(N, M)$, exceto pela distribuição regular dos s'_k :

$$s'_k = S \frac{k}{N}, \quad S = 5. \quad (5.30)$$

A componente c_r da velocidade é discretizada usando uma das distribuições de nós R_1 - R_4 com N_{c_r} pontos. Os nós e pesos são indexados, respectivamente, por c_{rm} e W_{rm} , onde $1 \leq m \leq N_{c_r}$. Por outro lado, tendo em vista que a componente c_x varia no intervalo $(-\infty, +\infty)$, sua discretização é feita da seguinte forma: para $c_x > 0$ esta componente é discretizada de acordo com uma das distribuições R_1 - R_4 utilizando N_{c_x} pontos. Os nós e pesos associados a esta distribuição são dados por c_{xl} e W_{xl} , onde $1 \leq l \leq N_{c_x}$. A discretização é estendida para $c_x < 0$ tomando-se os nós c_{xl} anti-simetricamente em torno da origem, isto é $c_{x,-l} = -c_{xl}$. Os pesos associados a estes nós são obtidos de W_{xl} através da relação $W_{x,-l} = W_{xl}$. Note que a componente c_x é discretizada utilizando $2N_{c_x}$ pontos no total.

Coeficiente de condutividade térmica

Com base na discretização proposta na seção anterior e introduzindo a função auxiliar $X(c_x, c_r) = c_x A(c)$, a eq. (5.15) é reescrita como

$$\widehat{L}_1 [X_{lm}] + c_{xl} \left(c_{lm}^2 - \frac{5}{2} \right) = 0, \quad (5.31)$$

onde

$$c_{lm} = \sqrt{c_{xl}^2 + c_{rm}^2} \quad (5.32)$$

e X_{lm} denota $X(c_{xl}, c_{rm})$.

O símbolo $\widehat{L}_1 [X_{lm}]$ na eq. (5.31) denota que o operador de colisões é aproximado por

$$\widehat{L}_1 [X_{lm}] = \pi^{-3/2} \sum_{j,k} K_1(c_{xl}, c_{rm}, c_{xj}, c_{rk}) [X_{jk} - X_{lm}] c_{rk} W_{xj} W_{rk}, \quad (5.33)$$

onde a soma, quando não indicada, é feita sobre todos os valores possíveis do índice.

Supondo que $X_{lm}^{(n)}$ represente X_{lm} na n -ésima iteração, a equação (5.31) é então resolvida iterativamente para X com base na seguinte relação de iteração

$$X_{lm}^{*(n)} = X_{lm}^{(n-1)} + \frac{1}{\nu(c_{lm})} \left[\widehat{L}_1 [X_{lm}^{(n-1)}] + c_{xl} \left(c_{lm}^2 - \frac{5}{2} \right) \right], \quad X_{lm}^{(1)} = 0, \quad (5.34)$$

onde $X_{lm}^{*(n)}$ denota uma solução que possivelmente não satisfaz o vínculo (5.18). Para corrigi-la, X^* é reescrito como

$$X^* = X + c_x D, \quad (5.35)$$

onde D é uma constante a ser determinada (veja o comentário sobre as soluções da eq. (5.15) na pág. (16)). Substituindo a eq. (5.35) na eq. (5.18), obtém-se

$$D = 4\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \phi(\mathbf{c}) c_x c_r X^* d\mathbf{c}_r d\mathbf{c}_x. \quad (5.36)$$

Com base na discretização adotada, a relação (5.35) escreve-se

$$X_{lm}^{(n)} = X_{lm}^{*(n)} - c_{xl} D^{(n)}, \quad (5.37)$$

onde

$$D^{(n)} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sum_{l,m} c_{xl} c_{rm} X_{lm}^{*(n)} W_{xl} W_{rm}. \quad (5.38)$$

A cada iteração o coeficiente de condutividade térmica reduzido κ é calculado por

$$\kappa^{(n)} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{l,m} c_{xl} c_{rm} \left(c_{lm}^2 - \frac{5}{2} \right) X_{lm}^{(n)} W_{xl} W_{rm}. \quad (5.39)$$

O procedimento iterativo é interrompido quando a diferença relativa entre $\kappa^{(n)}$ e $\kappa^{(n-1)}$ é menor que 10^{-8} .

Coefficiente de viscosidade

O procedimento numérico aplicado ao cálculo do coeficiente de viscosidade é idêntico àquele aplicado ao cálculo do coeficiente de condutividade térmica. Com base na discretização do espaço de velocidades mencionada anteriormente e introduzindo a função auxiliar $Y(c_x, c_r) = c_x c_r B(c)$, a equação integral (5.20) é reescrita como

$$\widehat{L}_2 [Y_{lm}] + 2c_{xl}c_{rm} = 0, \quad (5.40)$$

onde Y_{lm} denota $Y(c_{xl}, c_{rm})$ e o operador $\widehat{L}_2 [Y_{lm}]$ é calculado como

$$\widehat{L}_2 [Y_{lm}] = \pi^{-3/2} \sum_{j,k} K_2(c_{xl}, c_{rm}, c_{xj}, c_{rk}) \left[Y_{jk} - \frac{c_{rk}}{c_{rm}} Y_{lm} \right] c_{rk} W_{xj} W_{rk}. \quad (5.41)$$

Em seguida a eq. (5.40) é resolvida através da seguinte relação de iteração:

$$Y_{lm}^{(n)} = Y_{lm}^{(n-1)} + \frac{1}{\nu(c_{lm})} \left[\widehat{L}_2 [Y_{lm}^{(n-1)}] + 2c_{xl}c_{rm} \right], \quad Y_{lm}^{(1)} = 0, \quad (5.42)$$

onde $Y_{lm}^{(n)}$ representa Y_{lm} na n -ésima iteração.

A cada iteração a viscosidade reduzida é calculada através da quadratura

$$\mu^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{l,m} c_{xl}c_{rm}^2 Y_{lm}^{(n)} W_{xl} W_{rm}. \quad (5.43)$$

O processo iterativo é interrompido quando a diferença relativa entre $\mu^{(n)}$ e $\mu^{(n-1)}$ é menor que 10^{-8} .

5.2.4 Aplicação ao potencial de esferas rígidas

A fim de avaliar o método de resolução das equações integrais proposto neste trabalho, este foi primeiramente aplicado ao potencial de esferas rígidas. Os parâmetros numéricos utilizados no cálculo são mostrados na tab. 5.7. Estes parâmetros foram selecionados dentre os diversos testados por fornecerem a maior razão precisão-esforço computacional.

Com base nos parâmetros da tab. 5.7, obteve-se $\kappa = 0,479304$ e $\mu = 0,126668$, os quais concordam bem com aqueles fornecidos na ref. [20]: $\kappa = 0,479305$ e $\mu = 0,126668$.

As funções $A(c)$ e $B(c)$, soluções das equações integrais (5.8) e (5.9), são apresentadas nas figuras 5.2 e 5.3, respectivamente. Tais figuras também apresentam os resultados mais recentes da ref. [48].

Tabela 5.7: Parâmetros numéricos utilizados no cálculo dos coeficientes de transporte para esferas rígidas.

	N_θ	c_x	c_r
Cálculo de κ	200	$R_2(8, 5)$	$R_2(8, 5)$
Cálculo de μ	200	$R_2(8, 5)$	$R_4(8, 5)$

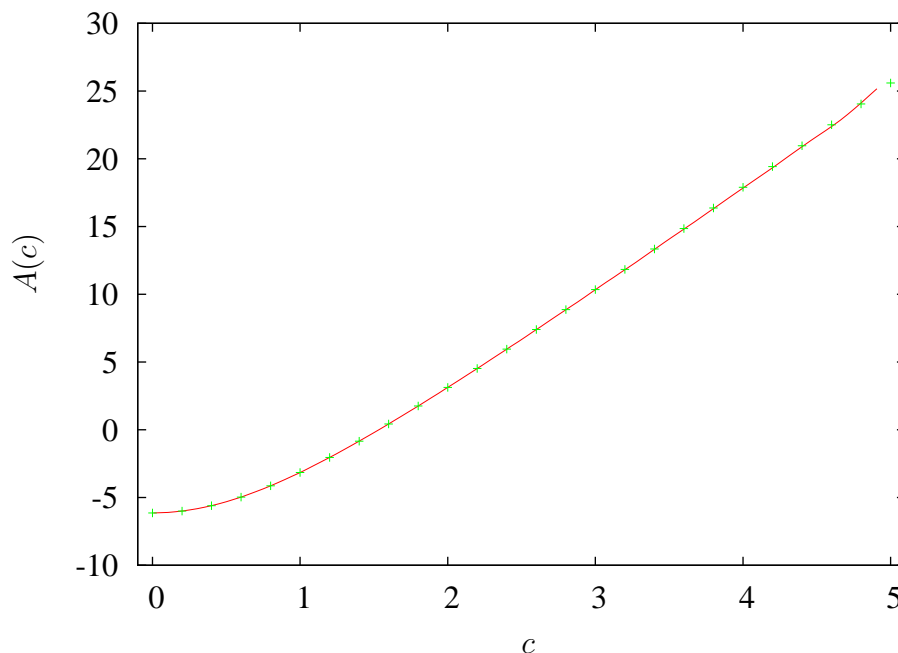


Figura 5.2: Solução $A(c)$ da equação integral (5.8) referente ao problema da condutividade térmica para esferas rígidas. A linha sólida corresponde aos resultados deste trabalho, enquanto os pontos são os dados da ref. [48].

5.2.5 Aplicação ao potencial de Lennard-Jones

O cálculo dos coeficientes de transporte para o potencial de Lennard-Jones envolve mais parâmetros numéricos, visto que neste caso é necessário calcular o núcleo da equação integral numericamente. Novamente os parâmetros numéricos foram escolhidos dentre os testados de modo a maximizarem a relação precisão-esforço computacional. Os parâmetros selecionados estão na tab. 5.8.

A tab. 5.9 compara os resultados obtidos pelo método de Chapman-Cowling com aqueles obtidos através da solução numérica direta das equações integrais. A diferença relativa entre os resultados não ultrapassa 0,6%, o que pode ser considerado satisfatório.

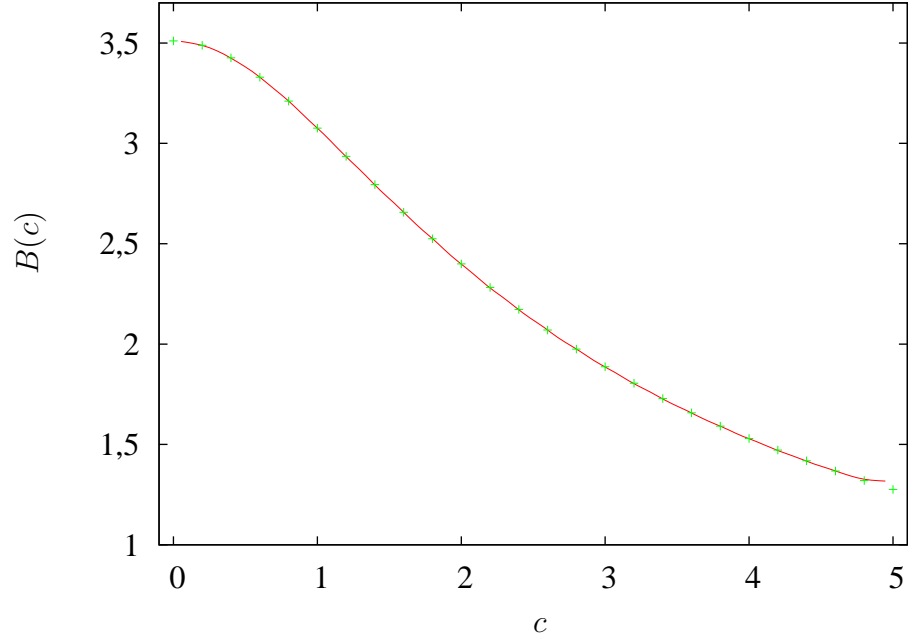


Figura 5.3: Solução $B(c)$ da equação integral (5.9) referente ao problema da viscosidade para esferas rígidas. A linha sólida corresponde aos resultados deste trabalho, enquanto os pontos são os dados da ref. [48].

Tabela 5.8: Parâmetros numéricos utilizados no cálculo dos coeficientes de transporte para o potencial de Lennard-Jones.

	N_χ	N_e	b_M	E_{min}	E_{max}	N_θ	c_x	c_r
Cálculo de κ	5000	4000	20	10^{-3}	10^3	200	$R_2(8, 5)$	$R_2(8, 5)$
Cálculo de μ	5000	4000	20	10^{-3}	10^3	200	$R_2(8, 5)$	$R_4(8, 5)$

Tabela 5.9: Comparação dos coeficientes de transporte calculados pelo método de Chapman-Cowling e aqueles da solução numérica direta das equações integrais.

T^*	$\kappa^{(3)}$	κ	$\mu^{(3)}$	μ
1,31	0,33485	0,3358	0,089282	0,08919
1,58	0,36349	0,3645	0,096902	0,09680
2,42	0,42479	0,4260	0,11314	0,1130
8,40	0,56018	0,5600	0,14878	0,1480
29,35	0,67320	0,6740	0,17873	0,1787

Capítulo 6

Escoamento entre placas planas paralelas induzido por gradientes de pressão e temperatura

O problema do escoamento estacionário de um gás rarefeito entre placas planas paralelas induzido por gradientes longitudinais de pressão e temperatura foi resolvido com base na equação de Boltzmann linearizada para os potenciais de esferas rígidas e de Lennard-Jones. A metodologia empregada e os resultados obtidos são apresentados neste capítulo.

6.1 Descrição do problema

Considere um gás confinado entre duas placas planas paralelas separadas por uma distância a_M . Um sistema de coordenadas retangular (x', y', z') é introduzido de maneira que sua origem esteja a meia distância das placas, sendo o eixo x' perpendicular ao plano das mesmas (veja a fig. 6.1). O gás é perturbado do seu estado de equilíbrio, caracterizado por uma pressão P_0 e por uma temperatura T_0 , por gradientes constantes de pressão e temperatura, ambos na direção paralela às placas. Tais gradientes induzem o transporte de massa e de energia, os quais se almeja determinar admitindo-se que o escoamento do gás é permanente.

De acordo com o sistema coordenado introduzido, a pressão P_R imposta sobre o

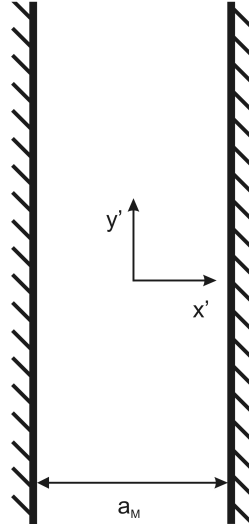


Figura 6.1: Esquema da região de escoamento do gás.

gás, tomada como pressão de referência, é dada por

$$P_R = P_0 \left(1 + \xi_P \frac{y'}{a_M} \right), \quad (6.1)$$

onde

$$\xi_P = \frac{a_M}{P_0} \frac{dP}{dy'}, \quad |\xi_P| \ll 1, \quad (6.2)$$

é, por definição, o gradiente de pressão reduzido.

Analogamente, a temperatura imposta sobre o gás T_R , tomada como temperatura de referência, é dada por

$$T_R = T_0 \left(1 + \xi_T \frac{y'}{a_M} \right), \quad (6.3)$$

onde

$$\xi_T = \frac{a_M}{T_0} \frac{dT}{dy'}, \quad |\xi_T| \ll 1, \quad (6.4)$$

é, por definição, o gradiente de temperatura reduzido.

Tendo em vista a pequenez e independência dos gradientes ξ_P e ξ_T , é plausível linearizar a função de distribuição como

$$f = f_R (1 + \xi_P h_P + \xi_T h_T), \quad (6.5)$$

onde f_R é a maxwelliana de referência, com temperatura e pressão de referência dadas pelas equações (6.1) e (6.3), respectivamente. As grandezas h_P e h_T são funções perturbativas incógnitas.

Com base no método de linearização da seq. 2.7, as seguintes equações para h_P e h_T são obtidas:

$$v_x \frac{\partial h_P}{\partial x'} = \widehat{L}'(h_P) - \frac{v_y}{a_M}, \quad (6.6)$$

e

$$v_x \frac{\partial h_T}{\partial x'} = \widehat{L}'(h_T) - \frac{v_y}{a_M} \left[\frac{mv^2}{2kT_0} - \frac{5}{2} \right]. \quad (6.7)$$

Deve-se observar que o desacoplamento das equações anteriores decorre da hipótese de que os gradientes ξ_P e ξ_T são quantidades independentes.

Ainda com base neste método de linearização, as principais variáveis termodinâmicas do sistema são escritas como

- Velocidade hidrodinâmica:

$$\mathbf{u}' = \frac{1}{n_0} \int f_0 \mathbf{v} [\xi_P h_P + \xi_T h_T] d\mathbf{v}; \quad (6.8)$$

- Fluxo de calor:

$$\mathbf{q}' = kT_0 \int f_0 \mathbf{v} \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{5}{2} \right) [\xi_P h_P + \xi_T h_T] d\mathbf{v}. \quad (6.9)$$

Supondo que as moléculas interajam difusamente com as paredes, as seguintes condições de contorno, derivadas da eq. (2.42), são obtidas para h_P e h_T :

$$h_P = \frac{2}{\pi v_m^4} \int_{v_{*x} \geq 0} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}_*^2}{v_m^2}\right) |v_{*x}| h_{P*} d\mathbf{v}_*, \quad \text{para } x = \pm \frac{a_M}{2} \text{ e } v_x \leq 0 \quad (6.10)$$

e

$$h_T = \frac{2}{\pi v_m^4} \int_{v_{*x} \geq 0} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}_*^2}{v_m^2}\right) |v_{*x}| h_{T*} d\mathbf{v}_*, \quad \text{para } x = \pm \frac{a_M}{2} \text{ e } v_x \leq 0. \quad (6.11)$$

É importante observar que os fenômenos de deslizamento viscoso e de deslizamento térmico [47], bem como o efeito de salto de temperatura [47], não são descartados pelo fato de as moléculas serem refletidas difusamente pelas superfícies. Isto ocorre porque a velocidade e a temperatura do gás nas vizinhanças da parede não dependem apenas da distribuição de velocidades das moléculas espalhadas, mas também da distribuição de velocidades das moléculas incidentes, as quais possuem velocidade média não-nula e temperatura diferente daquela da parede.

O transporte de massa através de uma seção perpendicular ao eixo y é medido através da taxa de fluxo de massa \dot{M} , a qual é calculada como

$$\dot{M} = \lim_{w \rightarrow \infty} \frac{mn_0}{w} \int_{-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} \int_{-\frac{a_M}{2}}^{\frac{a_M}{2}} u'_y(x') dx' dz', \quad (6.12)$$

onde w é a largura das placas. De maneira análoga, o transporte de energia através de uma seção perpendicular ao eixo y é medido através da taxa de fluxo de calor \dot{Q} , calculado através da seguinte relação

$$\dot{Q} = \lim_{w \rightarrow \infty} \frac{1}{w} \int_{-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} \int_{-\frac{a_M}{2}}^{\frac{a_M}{2}} q'_y(x') dx' dz'. \quad (6.13)$$

6.2 Parametrização

Além das grandezas parametrizadas já introduzidas, é conveniente introduzir agora a seguinte variável sem dimensão

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}'}{a_M}. \quad (6.14)$$

A partir das definições (4.1), (4.28) e (6.14) as equações (6.6) e (6.7) tornam-se, respectivamente,

$$c_x \frac{\partial h_P}{\partial x} = 2\mu\delta \widehat{L}(h_P) - c_y \quad (6.15)$$

e

$$c_x \frac{\partial h_T}{\partial x} = 2\mu\delta \widehat{L}(h_T) - c_y \left(c^2 - \frac{5}{2} \right), \quad (6.16)$$

onde δ é o parâmetro de rarefação (3.7), que neste caso escreve-se

$$\delta = \frac{P_0 a_M}{\mu' v_m}. \quad (6.17)$$

A magnitude do parâmetro δ caracteriza três regimes de rarefação do gás [13, 47]: o regime de moléculas livres, o regime de transição e o regime hidrodinâmico. No regime de moléculas livres ($\delta \ll 1$) a interação intermolecular é desprezível, de modo que as trajetórias das moléculas são alteradas apenas pela presença de superfícies que confinam o gás. Por outro lado, no regime hidrodinâmico ($\delta \gg 1$), as colisões intermoleculares são tão freqüentes que o gás pode ser tratado como um meio contínuo e sua dinâmica descrita pelas equações da Hidrodinâmica [49]. O regime de transição, por fim, é caracterizado por valores de δ intermediários aos do regime de moléculas livres e do regime hidrodinâmico.

Os dois momentos da função de distribuição de interesse neste problema são as componentes longitudinais da velocidade hidrodinâmica u'_y e do fluxo de calor q'_y , haja vista que estas determinam o transporte de massa e energia. Baseando-se nas definições (4.1) e na eq. (6.8), o primeiro deles é parametrizado como

$$u'_y = v_m (u_P \xi_P + u_T \xi_T), \quad (6.18)$$

onde

$$u_\alpha = \int \phi(\mathbf{c}) c_y h_\alpha d\mathbf{c} \quad (6.19)$$

e o índice α é utilizado doravante para representar P ou T . A expressão paramétrica para q'_y , baseada nas equações (4.1) e (6.9), é

$$q'_y = P_0 v_m (q_P \xi_P + q_T \xi_T), \quad (6.20)$$

onde

$$q_\alpha = \int \phi(\mathbf{c}) c_y \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) h_\alpha d\mathbf{c}. \quad (6.21)$$

Por fim, as seguintes variáveis sem dimensão são introduzidas

$$G_P = -4 \int_0^{1/2} u_P dx, \quad G_T = 4 \int_0^{1/2} u_T dx, \quad (6.22)$$

$$Q_P = 4 \int_0^{1/2} q_P dx, \quad Q_T = -4 \int_0^{1/2} q_T dx. \quad (6.23)$$

A partir das quantidades G_P , G_T , Q_P e Q_T , cujo significado foi apresentado na seq. 3.2, a taxa de fluxo de massa \dot{M} (6.12) e a taxa de fluxo de calor \dot{Q} (6.13) podem ser calculadas como

$$\dot{M} = \frac{a_M m n_0 v_m}{2} (-G_P \xi_P + G_T \xi_T), \quad (6.24)$$

$$\dot{Q} = \frac{a_M P_0 v_m}{2} (Q_P \xi_P - Q_T \xi_T). \quad (6.25)$$

É importante salientar que $G_T = Q_P$, como apontado no cap. 3. Esta relação serve como um critério de precisão para os resultados que serão obtidos.

6.3 Procedimento numérico

No problema deste capítulo ainda é possível reduzir uma variável no espaço de velocidades com a mudança de variáveis indicada na seq. 5.2.2, como feito no cálculo dos coeficientes de transporte. Contudo, a mudança de variáveis deve ser seguida pela seguinte transformação, proposta por [25]:

$$h_\alpha(x, c_x, c_y, c_z) = \Phi_\alpha(x, c_x, c_r) \cos \theta. \quad (6.26)$$

Como conseqüência, as equações (6.15) e (6.16) tornam-se, respectivamente,

$$c_x \frac{\partial \Phi_P}{\partial x} = 2\mu \delta \widehat{L}_2(\Phi_P) - c_r \quad (6.27)$$

e

$$c_x \frac{\partial \Phi_T}{\partial x} = 2\mu\delta \widehat{L}_2(\Phi_T) - c_r \left(c^2 - \frac{5}{2} \right), \quad (6.28)$$

onde \widehat{L}_2 é o operador de colisões modificado do segundo tipo, introduzido na seq. 5.2.2. Sob estas mesmas transformações, as condições de contorno (6.10) e (6.11) ficam enormemente simplificadas:

$$\Phi_\alpha = 0, \text{ para } x = \pm 1/2 \text{ e } c_x \leq 0. \quad (6.29)$$

Com base nas transformações (5.14) e (6.26), as grandezas u_α e q_α tornam-se, respectivamente,

$$u_\alpha(x) = \pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \phi \Phi_\alpha c_r^2 dc_r dc_x \quad (6.30)$$

e

$$q_\alpha(x) = \pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \phi \Phi_\alpha c_r^2 \left[c_x^2 + c_r^2 - \frac{5}{2} \right] dc_r dc_x. \quad (6.31)$$

A fim de resolver as equações (6.27) e (6.28), o método de velocidades discretas será aplicado em conjunção com o método das diferenças finitas. De acordo com este último, as derivadas são simplesmente aproximadas por uma diferença finita [43]. Como conseqüência, além de discretizar o espaço de velocidades, é necessário discretizar a coordenada espacial x . A discretização do espaço de velocidades é feita do mesmo modo que na seq. 5.2.3, ao passo que a coordenada espacial é discretizada como

$$x_i = i\Delta x - \frac{1}{2}, \quad \Delta x = \frac{1}{N_x}, \quad 0 \leq i \leq N_x, \quad (6.32)$$

onde N_x é um inteiro.

Tomando a discretização supracitada, o esquema numérico utilizado para resolução das equações (6.27) e (6.28) é

$$\begin{aligned} c_{xl} \frac{\Phi_{\alpha, i+\epsilon, lm}^{(n)} - \Phi_{\alpha, ilm}^{(n)}}{\epsilon \Delta x} &+ 2\mu\delta \nu(c_{lm}) \frac{\Phi_{\alpha, i+\epsilon, lm}^{(n)} + \Phi_{\alpha, ilm}^{(n)}}{2} \\ &= 2\mu\delta \left\{ \widehat{L}_2 \left[\frac{\Phi_{\alpha, i+\epsilon, lm}^{(n-1)} + \Phi_{\alpha, ilm}^{(n-1)}}{2} \right] \right. \\ &\quad \left. + \nu(c_{lm}) \frac{\Phi_{\alpha, i+\epsilon, lm}^{(n-1)} + \Phi_{\alpha, ilm}^{(n-1)}}{2} \right\} \\ &- c_{rm} \left[\delta_{\alpha P} + \delta_{\alpha T} \left(c_{lm}^2 - \frac{5}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.33)$$

onde $\epsilon = \text{sign}(c_x)$, δ_{ij} é a delta de Kronecker e $\Phi_{\alpha, ilm}^{(n)}$ significa $\Phi_\alpha(x_i, c_{xl}, c_{rm})$ na n -ésima iteração.

A cada iteração os momentos (6.19) e (6.21) são calculados, respectivamente, como

$$u_{\alpha}^{(n)}(x_i) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{l,m} \Phi_{\alpha,ilm}^{(n)} c_{rm}^2 W_{xl} W_{rm} \quad (6.34)$$

e

$$q_{\alpha}^{(n)}(x_i) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{l,m} \Phi_{\alpha,ilm}^{(n)} c_{rm}^2 \left(c_{lm}^2 - \frac{5}{2} \right) W_{xl} W_{rm}. \quad (6.35)$$

A iteração é interrompida quando a diferença relativa entre $u_{\alpha}^{(n)}$ e $u_{\alpha}^{(n-1)}$ é menor que 10^{-8} .

Conhecidos os momentos $u_{\alpha}(x)$ e $q_{\alpha}(x)$, as quantidades G_{α} e Q_{α} são calculadas a partir das suas definições (6.22) e (6.23) com base no método de Simpson utilizando $N_x + 1$ pontos.

6.4 Aplicação ao potencial de esferas rígidas

As grandezas G_{α} e Q_{α} , associadas ao transporte e massa e energia, foram inicialmente calculadas para o potencial de esferas rígidas. No cálculo numérico, além dos parâmetros indicados na tab. 5.7, utilizou-se $N_x = 400$ pontos na discretização do espaço físico. As tabelas 6.1, 6.2 e 6.3 mostram os resultados obtidos pelos métodos propostos neste trabalho e aqueles obtidos por outros autores. Como se pode observar, os resultados deste trabalho concordam melhor com a ref. [35], para a qual a diferença relativa dos resultados é menor que 0,05%, embora a discordância com as referências [30] e [28] não ultrapasse 1%.

Tabela 6.1: Coeficiente de Poiseuille G_P . Resultados referentes ao potencial de esferas rígidas.

δ	G_P		
	Presente	Ref. [35]	Ref. [30]
0,1	1,950	1,9499	1,9318
1	1,507	1,5067	1,5086
10	2,730	2,7296	2,7350

Deve-se destacar que os resultados apresentados nesta seção não são inéditos, mas foram úteis na validação dos métodos numéricos utilizados para obtê-los.

Tabela 6.2: Coeficientes de rastejo térmico G_T e mecanocalórico Q_P . Resultados referentes ao potencial de esferas rígidas.

δ	$G_T = Q_P$		
	Presente	Ref. [35]	Ref. [28]
0,1	0,7996	0,79928	0,7966
1	0,3891	0,38908	0,3890
10	0,08995	0,089950	0,0898

Tabela 6.3: Taxa de fluxo de calor reduzida Q_T . Resultados referentes ao potencial de esferas rígidas.

δ	Q_T		
	Presente	Ref. [35]	Ref. [28]
0,1	3,904	3,9037	3,8669
1	1,783	1,7830	1,7846
10	0,3468	0,34674	0,3467

6.5 Aplicação ao potencial de Lennard-Jones

No caso do potencial de Lennard-Jones, além do parâmetro de rarefação δ , as grandezas G_α e Q_α também dependem de T^* . Estas quantidades foram calculadas numericamente utilizando os parâmetros indicados na tab. 5.8 e $N_x = 400$ pontos na discretização do espaço físico. Estima-se que o erro numérico cometido com a utilização destes parâmetros não exceda 0,8%. Os resultados são apresentados nas tabelas 6.4, 6.5 e 6.6 juntamente com os resultados para esferas rígidas (ER) e aqueles obtidos pelos modelos S e BGK [13].

Da tabela 6.4 observa-se que a variação de T^* de 1,310 a 29,35 induz uma diferença relativa de no máximo 7% em G_P . Esta diferença é máxima em torno de $\delta = 0,01$. A mesma observação pode ser feita para Q_T da tab. 6.6. Por outro lado, conforme a tab. 6.5, tal diferença relativa é maior para os coeficientes G_T e Q_P , podendo atingir 11% em $\delta = 0,063$.

Para uma temperatura T_0 fixa, os diferentes valores de T^* estão associados a diferentes espécies moleculares. Em particular, para $T_0 = 300$ K, os valores de T^* apresentados nas figuras 6.2, 6.3 e 6.4 correspondem, em ordem decrescente de T^* , aos seguintes gases nobres: He, Ne, Ar, Kr e Xe. Conseqüentemente, o transporte de massa ou energia

depende da espécie molecular. Até o momento acreditava-se que esta dependência era causada exclusivamente pela forma de interação gás-superfície, haja vista que o potencial de esferas rígidas e os modelos não fazem distinção alguma sobre o fato.

Não há motivos para acreditar que o tipo de superfície com a qual o gás interage não possa influenciar nos fenômenos de transporte, entretanto, o fato descrito acima leva a crer que tal influência seja diferente da esperada. A avaliação desta influência dependeria de dados experimentais precisos e da solução da equação de Boltzmann com base no potencial de Lennard-Jones e com condições de contorno dadas por algum modelo de interação gás-superfície completo, ou próximo disto, como o modelo de Cercignani-Lampis [50].

As tabelas 6.4, 6.5 e 6.6 foram introduzidas para registrar de maneira precisa os resultados obtidos. A fim de elucidar o significado dos resultados, estes são apresentados nas figuras 6.2, 6.3 e 6.4, das quais se pode observar claramente a dependência das quantidades G_α e Q_α com T^* . Destas figuras e tabelas observa-se que tal dependência é maior no regime de moléculas livres ($\delta \ll 1$). Neste regime de rarefação, espera-se que o transporte de massa e energia sejam significativamente determinados pelas moléculas que movem-se rasantes às placas, tendo em vista que estas podem percorrer grandes distâncias (e com velocidade apreciável) antes de colidir com as paredes que confinam o gás. Estas trajetórias rasantes, contudo, são desviadas pelas colisões intermoleculares, as quais são mais apreciáveis para maiores valores de ε , já que a força de interação entre as moléculas é proporcional a este parâmetro. Sendo assim, espera-se maior transporte de massa e energia para maiores valores de T^* (lembre-se que $T^* = kT_0/\varepsilon$), como de fato observa-se.

Das tabelas 6.4 e 6.6 também se observa que G_P e Q_T tendem a tornar-se funções apenas de δ no regime hidrodinâmico ($\delta \rightarrow \infty$). Isto decorre do fato de que neste regime as referidas grandezas dependem das espécies moleculares apenas através dos coeficientes de viscosidade μ' e de condutividade térmica κ' , respectivamente, (ou apenas do primeiro, levando-se em conta que a razão entre estes coeficientes é aproximadamente uma constante [47]) e que a informação acerca da viscosidade está justamente contida no parâmetro de rarefação δ (6.17).

A fim de avaliar a influência do potencial intermolecular no transporte de massa e energia o desvio das quantidades G_α e Q_α foi calculado com base nos potenciais de esferas rígidas e Lennard-Jones. Com relação ao coeficiente de Poiseuille G_P , observa-se que o

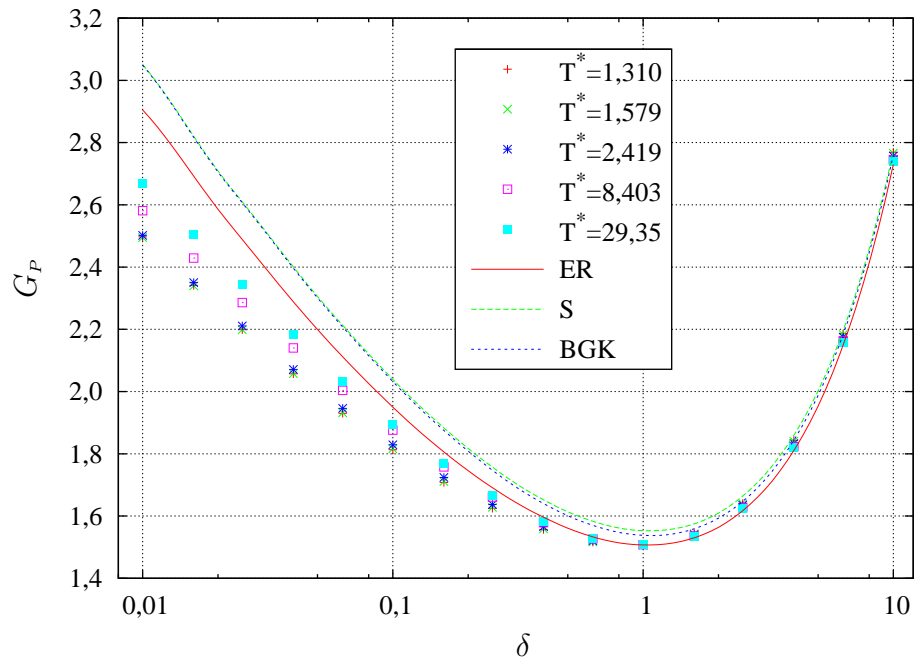


Figura 6.2: Coeficiente de Poiseuille G_P vs parâmetro de rarefação δ . Comparação entre os resultados da equação de Boltzmann baseada no potencial de Lennard-Jones (T^*) e esferas rígidas (ER) com os modelos S e BGK.

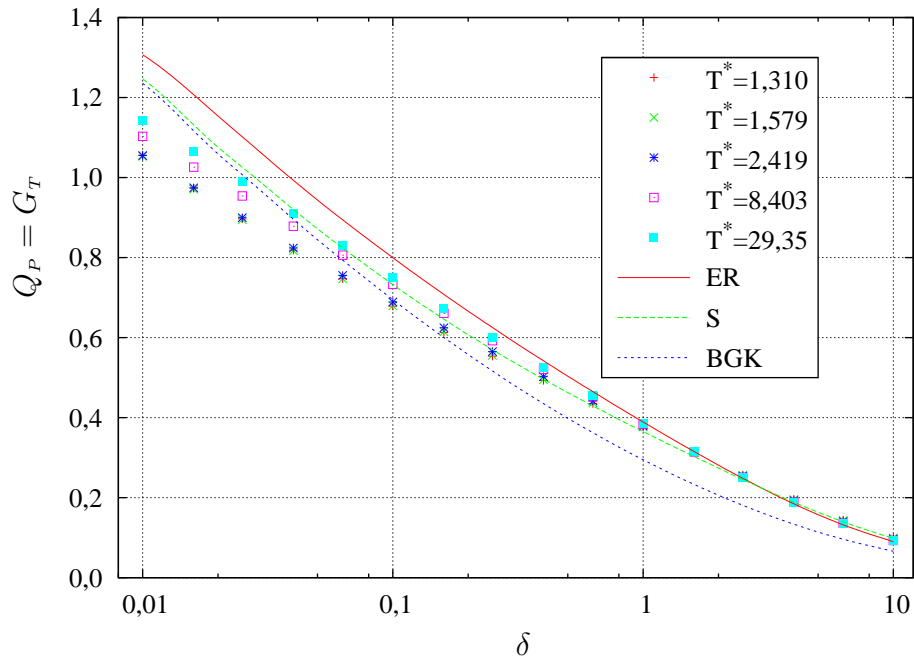


Figura 6.3: Coeficientes de rastejo térmico G_T e mecanocalórico Q_P vs parâmetro de rarefação δ . Comparação entre os resultados da equação de Boltzmann baseada no potencial de Lennard-Jones (T^*) e esferas rígidas (ER) com os modelos S e BGK.

Tabela 6.4: Coeficiente de Poiseuille G_P vs δ .

$\delta \backslash T^*$	G_P							
	Lennard-Jones					Ref. [13]		
	1,310	1,579	2,419	8,403	29,35	ER	S	BGK
0,01	2,497	2,495	2,502	2,581	2,668	2,905	3,051	3,049
0,016	2,341	2,340	2,350	2,429	2,503	2,692	2,820	2,817
0,025	2,199	2,199	2,211	2,286	2,345	2,489	2,610	2,607
0,04	2,057	2,058	2,071	2,140	2,182	2,289	2,401	2,397
0,063	1,930	1,932	1,946	2,004	2,033	2,112	2,213	2,208
0,1	1,813	1,816	1,829	1,876	1,893	1,950	2,039	2,032
0,16	1,708	1,711	1,724	1,758	1,768	1,806	1,883	1,875
0,25	1,625	1,628	1,637	1,661	1,667	1,691	1,757	1,747
0,4	1,557	1,559	1,566	1,579	1,582	1,596	1,652	1,640
0,63	1,516	1,517	1,521	1,527	1,527	1,533	1,583	1,570
1	1,507	1,507	1,507	1,508	1,507	1,507	1,553	1,538
1,6	1,544	1,543	1,540	1,536	1,534	1,530	1,575	1,559
2,5	1,641	1,639	1,635	1,627	1,624	1,617	1,664	1,647
4	1,843	1,840	1,833	1,823	1,819	1,810	1,859	1,843
6,3	2,186	2,183	2,175	2,163	2,159	2,149	2,196	2,183
10	2,769	2,766	2,757	2,745	2,740	2,730	2,772	2,760

máximo desvio relativo pode ultrapassar 14% para $\delta = 0,01$. Tal desvio decresce para maiores valores de δ , sendo menor que 7% para $\delta > 0,1$. Quanto aos efeitos cruzados, isto é, os efeitos de rastejo térmico G_T e mecanocalórico Q_P , observa-se que a influência do potencial é mais significativa. O máximo desvio relativo destas quantidades ultrapassa 19% para $\delta = 0,01$, decresce a 0,2% para $\delta = 1,6$ e aumenta para maiores valores do parâmetro de rarefação, ultrapassando 11% para $\delta = 10$. Em relação ao transporte de calor ordinário Q_T observa-se que o máximo desvio relativo excede 13% para $\delta = 0,01$ e torna-se pouco menor que 1,5% para $\delta = 10$.

Esta análise permite concluir que o transporte de massa e energia pode ser significativamente afetado pelo potencial intermolecular, sobretudo quando a rarefação do gás é apreciável, isto é, $\delta \ll 1$.

Tabela 6.5: Coeficientes de rastejo térmico G_T e mecanocalórico Q_P vs δ .

$\delta \backslash T^*$	$G_T = Q_P$							
	Lennard-Jones					Ref. [13]		
	1,310	1,579	2,419	8,403	29,35	ER	S	BGK
0,01	1,0560	1,0530	1,0550	1,1030	1,1420	1,3070	1,2468	1,2357
0,016	0,9733	0,9710	0,9744	1,0260	1,0640	1,2070	1,1314	1,1167
0,025	0,8966	0,8948	0,8996	0,9540	0,9895	1,1020	1,0261	1,0071
0,04	0,8186	0,8175	0,8241	0,8782	0,9089	0,9933	0,9205	0,8961
0,063	0,7470	0,7468	0,7552	0,8059	0,8302	0,8944	0,8242	0,7936
0,1	0,6786	0,6794	0,6890	0,7335	0,7512	0,7996	0,7325	0,6948
0,16	0,6130	0,6146	0,6246	0,6608	0,6730	0,7079	0,6460	0,6003
0,25	0,5537	0,5557	0,5649	0,5923	0,6006	0,6252	0,5700	0,5165
0,4	0,4931	0,4951	0,5024	0,5208	0,5260	0,5419	0,4960	0,4348
0,63	0,4352	0,4368	0,4416	0,4522	0,4553	0,4648	0,4293	0,3622
1	0,3760	0,3768	0,3789	0,3833	0,3848	0,3891	0,3652	0,2947
1,6	0,3148	0,3148	0,3145	0,3143	0,3148	0,3150	0,3027	0,2329
2,5	0,2562	0,2556	0,2537	0,2510	0,2508	0,2485	0,2456	0,1809
4	0,1964	0,1954	0,1927	0,1885	0,1883	0,1847	0,1888	0,1337
6,3	0,1441	0,1431	0,1402	0,1360	0,1357	0,1321	0,1396	0,0960
10	0,1000	0,0993	0,0967	0,0931	0,0930	0,0900	0,0980	0,0660

É oportuno neste ponto avaliar o desvio dos modelos S e BGK em relação à equação de Boltzmann baseada no potencial de Lennard-Jones. Entretanto, como mencionado a pouco, os resultados referentes ao potencial de Lennard-Jones dependem de T^* e esta dependência pode ser significativa. Por este motivo não há um conjunto de valores de referência com o qual se possa comparar os resultados fornecidos pelos modelos. O que se pode fazer é estimar a diferença entre os resultados da equação de Boltzmann e dos modelos em regimes de rarefação, -ou em outras palavras, do parâmetro de rarefação δ -, para os quais as grandezas G_α e Q_α dependam pouco de T^* e a partir daí conjecturar qual dos modelos é mais preciso.

A fim de simplificar a análise, algumas notações serão introduzidas. Define-se o

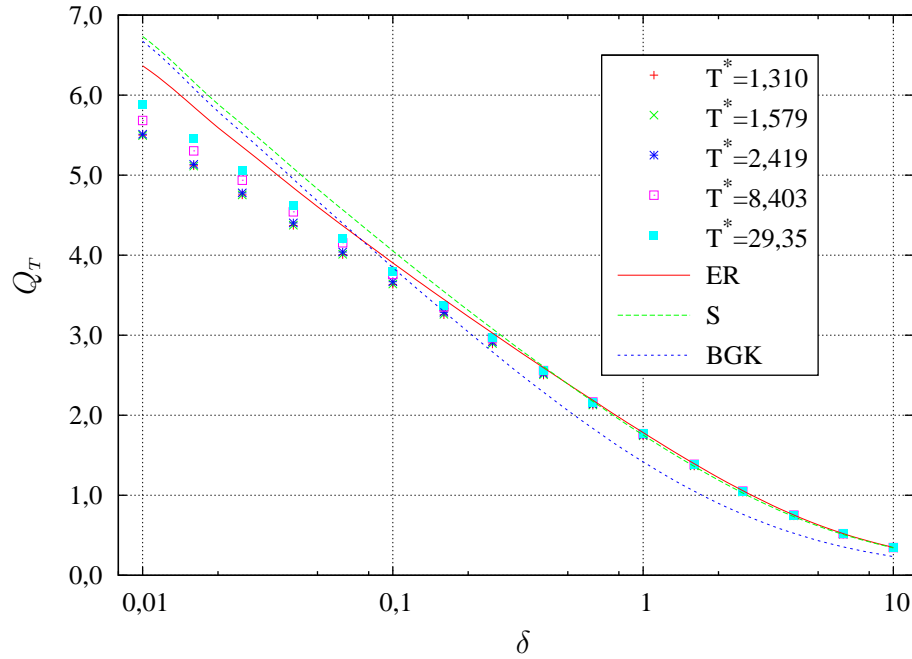


Figura 6.4: Taxa de fluxo de calor reduzida Q_T vs parâmetro de rarefação δ . Comparação entre os resultados da equação de Boltzmann baseada no potencial de Lennard-Jones (T^*) e esferas rígidas (ER) com os modelos S e BGK.

desvio relativo da quantidade G_α , para um dado parâmetro de rarefação, como

$$\Delta G_\alpha = \frac{\max(G_\alpha(T^*)) - \min(G_\alpha(T^*))}{\overline{G_\alpha(T^*)}} \quad (6.36)$$

onde $\max(G_\alpha(T^*))$ é o máximo valor da quantidade G_α dentre os cinco valores de T^* estudados, $\min(G_\alpha(T^*))$ tem o mesmo significado que $\max(G_\alpha(T^*))$, exceto por representar o valor mínimo de G_α , e $\overline{G_\alpha}$ representa o valor médio da quantidade G_α considerando os referidos valores de T^* . Do mesmo modo, é possível definir o desvio relativo da quantidade Q_α e denotá-la por ΔQ_α .

No intervalo $0,5 < \delta < 10$ observa-se que $\Delta G_P < 1,5\%$, enquanto o desvio dos modelos em relação a $\overline{G_P}$ chega a 5%. Observa-se também que os modelos S e o BGK fornecem resultados idênticos no intervalo $0,01 < \delta < 10$. A diferença relativa entre tais resultados não excede 1,1%. Por outro lado, observa-se que o desvio entre G_P , dado pelo potencial de esferas rígidas, e $\overline{G_P}$ não excede 1,5%.

Os resultados não são tão satisfatórios para o modelo BGK em relação às quantidades G_T e Q_P . Para tais quantidades $\Delta G_T = \Delta Q_P < 7,5\%$ no intervalo $0,4 < \delta < 10$, enquanto a diferença entre G_T , dado pelo modelo BGK, e $\overline{G_T}$ chega a ultrapassar 30%. A

Tabela 6.6: Taxa de fluxo de calor reduzida Q_T vs δ .

$\delta \backslash T^*$	Q_T								
	Lennard-Jones					Ref. [13]			
	1,310	1,579	2,419	8,403	29,35	ER	S	BGK	
0,01	5,500	5,495	5,511	5,684	5,879	6,366	6,733	6,673	
0,016	5,116	5,114	5,135	5,304	5,464	5,853	6,166	6,086	
0,025	4,753	4,753	4,779	4,936	5,059	5,355	5,636	5,531	
0,04	4,372	4,375	4,403	4,541	4,626	4,844	5,087	4,952	
0,063	4,006	4,011	4,040	4,155	4,210	4,369	4,568	4,399	
0,1	3,635	3,640	3,668	3,760	3,792	3,904	4,054	3,845	
0,16	3,255	3,261	3,286	3,354	3,372	3,447	3,546	3,296	
0,25	2,890	2,896	2,917	2,967	2,977	3,026	3,080	2,792	
0,4	2,502	2,507	2,524	2,559	2,562	2,594	2,608	2,288	
0,63	2,123	2,128	2,142	2,165	2,165	2,186	2,172	1,834	
1	1,740	1,744	1,755	1,770	1,769	1,783	1,753	1,418	
1,6	1,365	1,368	1,376	1,386	1,385	1,394	1,361	1,051	
2,5	1,038	1,040	1,046	1,052	1,051	1,058	1,029	0,763	
4	0,742	0,744	0,747	0,751	0,750	0,754	0,734	0,525	
6,3	0,515	0,515	0,517	0,520	0,519	0,521	0,510	0,355	
10	0,343	0,344	0,345	0,346	0,345	0,347	0,341	0,233	

diferença entre G_T , dado pelo modelo S, e \overline{G}_T não excede 4% no mesmo intervalo. Quanto ao potencial de esferas rígidas, tal diferença é superior a 6,5%.

Em relação à quantidade Q_T o modelo S ainda é mais vantajoso que o modelo BGK. No intervalo $0,5 < \delta < 10$ observa-se que $\Delta Q_T < 2,4\%$, ao passo que a diferença entre Q_T , dado pelo modelo BGK, e \overline{Q}_T pode chegar 32%. A mesma diferença para o modelo S não excede 3%. Para o potencial de esferas rígidas esta diferença é de no máximo 2,6%.

Finalmente, com base na análise dos resultados desta seção, os seguintes apontamentos podem ser feitos:

- Não é suficiente resolver a equação de Boltzmann com base em um potencial qualquer para obter-se resultados precisos em Dinâmica dos Gases Rarefeitos. É ne-

cessário que a interação intermolecular seja descrita de maneira realística.

- Os resultados corroboram com a idéia [51] de que o modelo S é o mais apropriado para tratar problemas não-isotérmicos.
- Observou-se que os desvios introduzidos pelo modelo S e pelo potencial de esferas rígidas em relação ao potencial de Lennard-Jones têm a mesma ordem de grandeza. Este fato justifica a utilização do modelo S em circunstâncias nas quais a equação de Boltzmann não possa ser resolvida por limitações computacionais.

Capítulo 7

Conclusão

Ao longo deste trabalho alguns métodos foram elaborados e outros selecionados na literatura a fim de construir um procedimento numérico que tornasse a determinação do operador de colisões baseado em um potencial realístico factível. Os principais obstáculos no desenvolvimento deste procedimento foram: a presença de singularidades em diferentes etapas do cálculo, a necessidade de encontrar as raízes de equações transcendentais de maneira eficiente, as limitações computacionais no cálculo da seção de choque diferencial clássica e a necessidade de métodos otimizados a fim de reduzir o grande esforço computacional exigido. As singularidades foram contornadas utilizando técnicas de expansão em séries e princípios de conservação e um método de busca de raízes de equações transcendentais foi elaborado.

Os métodos numéricos elaborados foram avaliados com o cálculo dos coeficientes de transporte, ou mais precisamente, com o cálculo dos coeficientes de condutividade térmica e de viscosidade. Os resultados obtidos para o potencial de esferas rígidas e de Lennard-Jones foram comparados com aqueles fornecidos pelo método de Chapman-Cowling e com dados experimentais [52]. A maior discrepância entre os resultados teóricos obtidos não passou de 0,6%. Verificou-se para os gases nobres que o potencial de Lennard-Jones em conjunção com o tratamento clássico não fornecem resultados corretos para temperaturas muito maiores ou muito menores que a temperatura de 300 K, embora os resultados para temperaturas entre 200 K e 400 K difiram dos dados experimentais por, no máximo, 2%.

Com a metodologia validada, o efeito da força de interação molecular nos fenômenos de transporte de massa e energia foi estudado no caso especial em que o fluxo ocorre

entre placas planas paralelas. Observou-se que os resultados fornecidos pelo potencial de Lennard-Jones dependem da espécie molecular e que esta dependência pode ser significativa, algo que não se observa para o potencial de esferas rígidas. Até o momento este efeito era unicamente associado à interação dos gases com a superfície.

A influência do potencial intermolecular no transporte de massa e energia foi avaliada através da comparação entre os resultados dados pela equação de Boltzmann baseada nos potenciais de esferas rígidas e de Lennard-Jones. Verificou-se que o máximo desvio relativo dos resultados pode exceder 13% nos problemas de Poiseuille e de fluxo de calor ordinário. O desvio é ainda maior nos fenômenos de rastejo térmico e mecanocalórico, podendo exceder 19% para determinados valores do parâmetro de rarefação.

Os resultados dos modelos S e BGK também foram comparados com aqueles obtidos pelo potencial de Lennard-Jones. A comparação confirma que o modelo S é o mais apropriado para tratar problemas não-isotérmicos. Também se observou que os desvios introduzidos pelo potencial de esferas rígidas e pelo modelo S, em relação ao potencial de Lennard-Jones, têm a mesma ordem de grandeza.

Por fim, é pertinente apontar algumas sugestões para trabalhos futuros. Com base nos métodos apresentados nesta dissertação é possível resolver diversos problemas relevantes em Dinâmica dos Gases Rarefeitos, dentre os quais é possível citar o cálculo dos coeficientes de deslizamento e de salto de temperatura, freqüentemente usados nas condições de contorno em Mecânica dos Fluidos. Além disso, seria interessante obter resultados com base em potenciais intermoleculares mais precisos (determinados *ab initio*) que o potencial de Lennard-Jones. Também seria importante desenvolver algum tratamento analítico para determinação do operador de colisões, como a expansão do seu núcleo em termos de uma série apropriada. Isto viabilizaria a resolução de problemas como o de escoamento de gases rarefeitos em tubos.

Bibliografia

- [1] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972).
- [2] Y. Sone, T. Ohwada, and K. Aoki, “Temperature jump and Knudsen layer in a rarefied gas over a plane wall: Numerical analysis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules,” *Phys. Fluids A* **1**, 363–370 (1989).
- [3] S. K. Loyalka, “Temperature jump and thermal creep slip: Rigid sphere gas,” *Phys. Fluids A* **1**, 403–408 (1989).
- [4] S. K. Loyalka, “Slip and jump coefficients for rarefied gas flows: variational results for Lennard-Jones and $n(r)$ -6 potencial,” *Physica A* **163**, 813–821 (1990).
- [5] F. Sharipov, “Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. II. Slip and jump coefficients,” *Eur. J. Mech. B / Fluids* **22**, 133–143 (2003).
- [6] J. O. Hirschfelder, R. B. Bird, and E. L. Spotz, “The transport properties for non-polar gases,” *J. Chem. Phys.* **16**, 968–981 (1948).
- [7] C. Cercignani, *The Boltzmann Equation and its Application* (Springer-Verlag, New York, 1988).
- [8] S. Chapman and T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (University Press, Cambridge, 1952).
- [9] H. Goldstein, *Classical mechanics* (Addison-Wesley, 1980).
- [10] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird, *The molecular theory of gases and liquids* (Wiley, New York, 1954).

- [11] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics* (Clarendon Press, Oxford, 1976).
- [12] H. M. Nussenzveig, *Diffraction effects in semiclassical scattering* (Cambridge University Press, 1992).
- [13] F. Sharipov and V. Seleznev, “Data on internal rarefied gas flows,” *J. Phys. Chem. Ref. Data* **27**, 657–706 (1998).
- [14] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. A. Krook, “A model for collision processes in gases,” *Phys. Rev.* **94**, 511–525 (1954).
- [15] P. Welander, “On the temperature jump in a rarefied gas,” *Arkiv Fys.* **7**, 507–553 (1954).
- [16] E. M. Shakhov, *Method of Investigation of Rarefied Gas Flows* (Nauka, Moscow, 1974), [in Russian].
- [17] E. M. Shakhov, “Generalization of the Krook kinetic equation,” *Fluid Dynamics* **3**, 142–145 (1968).
- [18] J. O. Hirschfelder, R. B. Bird, and E. L. Spotz, “The transport properties for non-polar gases,” *J. Chem. Phys.* **17**, 1343–1344 (1949).
- [19] C. L. Pekeris, “Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation,” *Proc. Natl. Acad. Sci.* **41**, 661–669 (1955).
- [20] C. L. Pekeris and Z. Alterman, “Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation. II. The coefficients of viscosity and heat conduction,” *Proc. Natl. Acad. Sci.* **43**, 998–1007 (1957).
- [21] S. K. Loyalka and K. A. Hickey, “Plane Poiseuille flow: near continuum results for rigid sphere gas,” *Physica A* **160**, 395–408 (1989).
- [22] C. Siewert, “On computing the Chapman-Enskog functions for viscosity and heat transfer and the Burnett functions,” *J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* **74**, 789–796 (2002).
- [23] L. B. Barichello, P. Rodrigues, and C. E. Siewert, “On Computing the Chapman-Enskog and Burnett Functions,” *J. Quant. Spectr. Rad. Transfer* **86**, 109–114 (2004).

- [24] A. Mohan, R. V. Tompson, K. A. Hickey, and S. K. Loyalka, “Chapman-Enskog and Burnett solutions for a simple, rigid-sphere gas: Numerical solutions using a subtraction technique,” *J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* **109**, 741–751 (2008).
- [25] T. Ohwada, Y. Sone, and K. Aoki, “Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over a plane wall on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules,” *Phys. Fluids A* **1**, 1588–1599 (1989).
- [26] Y. Sone, T. Ohwada, and K. Aoki, “Evaporation and condensation on a plane condensed phase: numerical analysis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules,” *Phys. Fluids A* **1**, 1398–1405 (1989).
- [27] S. Loyalka, S. Hamoodi, and R. Tompson, “Isothermal condensation on a plane surface,” *Phys. Fluids A - Fluid Dynamics* **1**, 384–388 (1989).
- [28] S. K. Loyalka and K. A. Hickey, “Kinetic theory of thermal transpiration and the mechanocaloric effect: Planar flow of a rigid sphere gas with arbitrary accommodation at the surface,” *J. Vac. Sci. Technol. A* **9**, 158–163 (1991).
- [29] T. Ohwada, Y. Sone, and K. Aoki, “Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows between two parallel plates on the basis of the Boltzmann equation for hard sphere molecules.” *Phys. Fluids A* **1**, 2042–2049 (1989).
- [30] K. A. Hickey and S. K. Loyalka, “Plane Poiseuille flow: Rigid sphere gas,” *J. Vac. Sci. Technol. A* **8**, 957–960 (1990).
- [31] S. K. Loyalka and S. A. Hamoodi, “Poiseuille flow of a rarefied gas in a cylindrical tube: Solution of linearized Boltzmann equation,” *Phys. Fluids A* **2**, 2061–2065 (1990).
- [32] C. E. Siewert, “Viscous-slip, thermal-slip and temperature-jump coefficients as defined by the linearized Boltzmann equation and the Cercignani-Lampis boundary condition,” *Phys. Fluids* **15**, 1696–1701 (2003).
- [33] C. E. Siewert, “The Linearized Boltzmann Equation: A Concise and Accurate Solution of the Temperature-Jump Problem,” *J. Quant. Spec. Rad. Tran* **77**, 417–432 (2003).

- [34] C. E. Siewert, “Heat transfer and evaporation/condensation problems based on the linearized Boltzmann equation,” *Eur. J. Mech. B/Fluids* **22**, 391–408 (2003).
- [35] C. E. Siewert, “The Linearized Boltzmann Equation: Concise and Accurate Solutions to Basic Flow Problems,” *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)* **54**, 273–303 (2003).
- [36] F. G. Tcheremissine, “Condervative evaluation of the Boltzmann collision integral in discrete ordinates approximation,” *Computers Math. Applic.* **35**, 215–221 (1998).
- [37] V. I. Kolobov, R. E. Arslanbekov, V. V. Aristov, A. A. Frolova, and S. A. Zabelok, “Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement,” *J. Comp. Phys.* **223**, 589–608 (2007).
- [38] V. I. Kolobov, S. A. Bayyuk, R. R. Arslanbekov, V. V. Aristov, A. A. Frolova, and S. A. Zabelok, “Constraction of a unified continuum/kinetic solver for aerodynamic problems,” *J. Spacecraft and Rockets* **42**, 598–606 (2005).
- [39] L. Onsager, “Reciprocal relations in irreversible processes. I,” *Phys. Rev.* **37**, 405–426 (1931).
- [40] H. B. G. Casimir, “On Onsager’s principle of microscopic reversibility,” *Rev. Mod. Phys.* **17**, 343 (1945).
- [41] F. Sharipov, “Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. I. General theory for single gas,” *Physica A* **203**, 437–456 (1994).
- [42] F. Sharipov, “Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. II. Application of the theory for single gas,” *Physica A* **203**, 457–485 (1994).
- [43] R. L. Burden and J. D. Faires, *Numerical analysis* (Brooks/Cole, 2004), 8th edn.
- [44] E. A. Gislason, “Evaluation of classical differential cross-sections - simplifying methods,” *Chem. Phys. Lett.* **42**, 315–318 (1976).
- [45] E. A. Gislason and J. G. Sachs, “Expansion of classical differential cross-sections in Legendre polynomials - nonreactive scattering,” *Chem. Phys.* **33** (1978).

- [46] J. Kestin, K. Knierim, E. A. Mason, B. Najafi, S. T. Ro, and M. Waldman, “Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixture at low densities,” *J. Phys. Chem. Ref. Data* **13**, 229–303 (1984).
- [47] K. Jousten (ed.), *Handbook of Vacuum Technology* (Wiley-VCN, Berlin, 2008).
- [48] Y. Sone, *Kinetic Theory and Fluid Mechanics* (Birkhäuser, Boston, 2002).
- [49] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics* (Pergamon, New York, 1989).
- [50] C. Cercignani and M. Lampis, “Kinetic model for gas-surface interaction,” *Transp. Theory and Stat. Phys.* **1**, 101–114 (1971).
- [51] F. Sharipov, *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics* (Springer-Verlag, 2008), chap. Micro- and Nanoscale Gas Dynamics, pp. 1281–1287.
- [52] F. Sharipov and G. Bertoldo, “Numerical solution of the linearized Boltzmann equation for an arbitrary intermolecular potential,” *J. Comput. Phys.* (2009).

Apêndice A

Linearização da função de distribuição

Em certas circunstâncias a função de distribuição pode ser linearizada em torno da distribuição de equilíbrio. A subsequente linearização da equação de Boltzmann, dos momentos da função de distribuição e das condições de contorno, contudo, envolvem certas aproximações não-triviais. Tais aproximações não são elucidadas na literatura e por isso este apêndice dedica-se a esclarecê-las. Inicialmente a linearização será feita em torno da maxwelliana de equilíbrio e a partir daí estendida à linearizações em torno da maxwelliana de referência.

A.1 Linearização da equação de Boltzmann

Suponha que o gás esteja inicialmente num estado de equilíbrio caracterizado pela densidade de número n_0 , temperatura T_0 e velocidade hidrodinâmica \mathbf{u}'_0 , todos uniformes. Neste estado a função de distribuição é a função maxwelliana, descrita na seq. 2.6:

$$f_0(\mathbf{v}) = \pi^{-3/2} \frac{n_0}{v_m^3} \exp\left(-\frac{[\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0]^2}{v_m^2}\right), \quad v_m = \sqrt{\frac{2kT_0}{m}}. \quad (\text{A.1})$$

Em seguida, o gás é fracamente perturbado do seu estado de equilíbrio. Existe um parâmetro pequeno ξ que caracteriza esta perturbação. Em vista disto, a função de distribuição f do gás em desequilíbrio pode ser expandida como

$$f = f_0 (1 + \xi h + \mathcal{O}(\xi^2)), \quad (\text{A.2})$$

onde h é uma função incógnita. Devido à pequenez do parâmetro ξ , a expansão é restrita até termos de ordem $\mathcal{O}(\xi)$.

A equação para h é obtida inserindo a expansão (A.2) na equação de Boltzmann (2.59). Se não existirem forças externas atuando sobre o gás, o termo de fluxo da equação de Boltzmann (lado esquerdo da equação) torna-se

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}'} = \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}'} \right) f_0 \xi + \mathcal{O}(\xi^2). \quad (\text{A.3})$$

A integral de colisões (lado direito da equação), por outro lado, fica

$$Q(ff_*) = f_0 \int f_{0*} \left[\frac{f'_0 f'_{0*}}{f_0 f_{0*}} (1 + \xi h' + \xi h'_*) - (1 + \xi h + \xi h_*) \right] g \sigma'(g, \chi) \text{sen } \chi d\chi d\epsilon d\mathbf{v}_* + \mathcal{O}(\xi^2). \quad (\text{A.4})$$

Em virtude da conservação de momentum e energia numa colisão binária, o seguinte termo é enormemente simplificado:

$$\frac{f'_0 f'_{0*}}{f_0 f_{0*}} = \exp \left(-\frac{1}{v_m^2} [v'^2 + v_*'^2 - v^2 - v_*^2 - 2\mathbf{u}'_0 \cdot (\mathbf{v}' + \mathbf{v}'_* - \mathbf{v} - \mathbf{v}_*)] \right) = 1. \quad (\text{A.5})$$

Este resultado em conjunção com as equações (A.3) e (A.4) conduz à equação de Boltzmann linearizada:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}'} = \widehat{L}'(h), \quad (\text{A.6})$$

onde \widehat{L}' é o operador de colisões linearizado, dado por

$$\widehat{L}'(h) = \int f_{0*} (h' + h'_* - h - h_*) g \sigma'(g, \chi) \text{sen } \chi d\chi d\epsilon d\mathbf{v}_*. \quad (\text{A.7})$$

A.2 Linearização dos momentos da função de distribuição

A.2.1 Densidade numérica

A densidade numérica é calculada por

$$n = \int f d\mathbf{v}. \quad (\text{A.8})$$

Com a inserção da expansão (A.2) na eq. (A.8), esta se torna

$$n = n_0 + \int f_0 \xi h d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2), \quad (\text{A.9})$$

onde foi usado que

$$n_0 = \int f_0 d\mathbf{v}. \quad (\text{A.10})$$

A.2.2 Velocidade hidrodinâmica

A substituição da função de distribuição (A.2) na expressão para a velocidade hidrodinâmica do gás

$$\mathbf{u}' = \frac{1}{n} \int \mathbf{v} f d\mathbf{v}, \quad (\text{A.11})$$

fornece

$$\mathbf{u}' = \frac{1}{n} \int \mathbf{v} f_0 d\mathbf{v} + \frac{1}{n} \int f_0 \mathbf{v} \xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2). \quad (\text{A.12})$$

É importante notar que n^{-1} na expressão anterior também deve ser expandido a fim de que \mathbf{u}' seja expresso corretamente em ordem $\mathcal{O}(\xi)$. Com base na expansão binomial e na eq. (A.9), n^{-1} é escrito como

$$n^{-1} = n_0^{-1} \left[1 - \frac{1}{n_0} \int f_0 \xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2) \right]. \quad (\text{A.13})$$

Inserindo a eq. (A.13) na eq. (A.12) e após algumas manipulações algébricas o seguinte resultado é obtido

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u}'_0 + \frac{1}{n_0} \int f_0 (\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0) \xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2), \quad (\text{A.14})$$

onde o seguinte resultado foi usado

$$\mathbf{u}'_0 = \frac{1}{n_0} \int \mathbf{v} f_0 d\mathbf{v}. \quad (\text{A.15})$$

A.2.3 Tensor tensão

Em coordenadas cartesianas o tensor tensão é escrito como

$$P_{ij} = m \int (v_i - u'_i)(v_j - u'_j) f d\mathbf{v}. \quad (\text{A.16})$$

Para linearizá-lo, é conveniente reescrever $v_i - u'_i$ como

$$v_i - u'_i = (v_i - u'_{0i}) - (u'_i - u'_{0i}). \quad (\text{A.17})$$

É importante salientar que o termo $u'_i - u'_{0i}$ tem ordem $\mathcal{O}(\xi)$, o que pode ser visto na eq. (A.14), a qual se escreve em coordenadas cartesianas como

$$u'_i - u'_{0i} = \frac{1}{n_0} \int f_0 (v_i - u'_{0i}) \xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2). \quad (\text{A.18})$$

Com a inserção da expansão (A.2) na eq. (A.16) e fazendo uso da eq. (A.17), as componentes do tensor tensão ficam

$$\begin{aligned}
P_{ij} &= m \int f_0(v_i - u'_{0i})(v_j - u'_{0j}) d\mathbf{v} \\
&\quad - m \int f_0(v_i - u'_{0i}) d\mathbf{v}(u_j - u'_{0j}) \\
&\quad - m \int f_0(v_j - u'_{0j}) d\mathbf{v}(u_i - u'_{0i}) \\
&\quad + m \int f_0(v_i - u'_{0i})(v_j - u'_{0j})\xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2).
\end{aligned} \tag{A.19}$$

Na eq. (A.19), a segunda e terceira integrais são nulas por paridade, enquanto a primeira pode ser calculada com a mudança de variáveis $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v} - \mathbf{u}'_0$, o que fornece

$$\int f_0(v_i - u'_{0i})(v_j - u'_{0j}) d\mathbf{v} = \frac{P_0}{m} \delta_{ij}. \tag{A.20}$$

Com base neste resultado o tensor tensão finalmente torna-se

$$P_{ij} = P_0 \delta_{ij} + m \int f_0(v_i - u'_{0i})(v_j - u'_{0j})\xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2). \tag{A.21}$$

A.2.4 Pressão

A pressão é definida como um terço do traço do tensor tensão. Tomando a expressão do tensor tensão (A.21), obtém-se prontamente a expressão linearizada para a pressão:

$$P = \frac{1}{3} \sum_{i \in \{x,y,z\}} P_{ii} = P_0 + \frac{m}{3} \int f_0 (\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0)^2 \xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2). \tag{A.22}$$

Este é o mesmo resultado que se obteria linearizando a expressão

$$P = \frac{m}{3} \int (\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0)^2 f d\mathbf{v}, \tag{A.23}$$

embora este último modo seja mais trabalhoso.

A.2.5 Temperatura

A temperatura T está relacionada à densidade numérica n e à pressão P pela equação de estado:

$$T = \frac{P}{nk}. \tag{A.24}$$

Tomando a expressão linearizada para P (A.22) e a expressão (A.13) para n^{-1} , obtém-se após algumas manipulações algébricas que

$$T = T_0 + \frac{2T_0}{3n_0} \int f_0 \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_m^2} - \frac{3}{2} \right] \xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2). \quad (\text{A.25})$$

Esta expressão também pode ser obtida da linearização de

$$T = \frac{m}{3nk} \int (\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0)^2 f d\mathbf{v}. \quad (\text{A.26})$$

A.2.6 Fluxo de calor

A fim de simplificar a linearização do vetor fluxo de calor é conveniente tomar suas componentes individualmente. Em termos das coordenadas cartesianas, este vetor é escrito como

$$q'_i = \frac{m}{2} \int (v_j - u'_{0j}) (v_j - u'_{0j}) (v_i - u'_{0i}) f d\mathbf{v}, \quad (\text{A.27})$$

onde a notação de soma de Einstein foi usada. De acordo com esta notação, termos com índices repetidos são somados, por exemplo, $a_j b_j c_k = c_k \sum_j a_j b_j$.

Utilizando a expansão (A.2), a relação (A.17) e lembrando que $u'_i - u'_{0i} = \mathcal{O}(\xi)$, obtém-se

$$\begin{aligned} q_i &= \frac{m}{2} \int f_0 (v_j - u'_{0j}) (v_j - u'_{0j}) (v_i - u'_{0i}) d\mathbf{v} \\ &\quad - \frac{m}{2} \int f_0 (v_j - u'_{0j}) (v_j - u'_{0j}) d\mathbf{v} (u'_i - u'_{0i}) \\ &\quad - m \int f_0 (v_i - u'_{0i}) (v_j - u'_{0j}) d\mathbf{v} (u'_j - u'_{0j}) \\ &\quad + \frac{m}{2} \int f_0 (v_j - u'_{0j}) (v_j - u'_{0j}) (v_i - u'_{0i}) \xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2). \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Na equação precedente a primeira das integrais é nula por paridade, a segunda é o traço da terceira e a terceira já foi calculada, veja a eq. (A.20). Com isto a eq. (A.28) é reduzida a

$$q_i = -\frac{5}{2} P'_0 (u'_i - u'_{0i}) + \frac{m}{2} \int f_0 (v_j - u'_{0j}) (v_j - u'_{0j}) (v_i - u'_{0i}) \xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2). \quad (\text{A.29})$$

Com base na eq. (A.18) e retornando à notação vetorial, após algumas manipulações, a eq. (A.29) torna-se

$$\mathbf{q}' = kT_0 \int f_0 (\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0) \left(\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_m^2} - \frac{5}{2} \right) \xi \mathbf{h} d\mathbf{v} + \mathcal{O}(\xi^2). \quad (\text{A.30})$$

A.3 Linearização das condições de contorno

Suponha que um gás em equilíbrio com densidade numérica n_0 , temperatura T_0 e velocidade hidrodinâmica \mathbf{u}'_0 possa interagir com uma superfície arbitrária. Para que o sistema gás-superfície esteja em equilíbrio é necessário que a superfície esteja à temperatura T_0 e com velocidade \mathbf{u}'_0 .

Suponha agora que as variáveis termodinâmicas do gás, bem como a temperatura T_w e a velocidade \mathbf{U}'_w da superfície, sejam fracamente perturbados dos seus valores de equilíbrio. Se ξ for o parâmetro pequeno que caracteriza esta perturbação, então a função de distribuição é expandida da mesma forma que na eq. (A.2), enquanto T_w e \mathbf{U}'_w são escritos como

$$T_w = T_0 (1 + \tau_w \xi), \quad \mathbf{U}'_w = \mathbf{u}'_0 + \xi \mathbf{u}'_w, \quad \mathbf{U}'_w \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (\text{A.31})$$

onde τ_w e \mathbf{u}'_w são funções conhecidas e \mathbf{n} é o versor normal à superfície na direção do gás.

Em virtude do movimento da superfície, as condições de contorno apresentadas a seguir são mais gerais que as da seq. 2.5. Neste caso, a função de distribuição das moléculas refletidas pela superfície é

$$f(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v}) = \int_{\zeta_{*n} < 0} \frac{|\zeta_{*n}|}{|\zeta_n|} R(\zeta_* \rightarrow \zeta) f(\mathbf{r}'_s, \mathbf{v}_*) d\mathbf{v}_*, \quad \zeta_n > 0, \quad \zeta_n = \zeta \cdot \mathbf{n}, \quad (\text{A.32})$$

onde $\zeta = \mathbf{v} - \mathbf{U}'_w$.

A partir das equações (A.2) e (A.32) é possível obter as condições de contorno para \mathbf{h} :

$$\xi \mathbf{h} = \int_{\zeta_{*n} < 0} R(\zeta_* \rightarrow \zeta) \frac{|\zeta_{*n}|}{|\zeta_n|} \frac{f_{0*}}{f_0} (1 + \xi \mathbf{h}_*) d\mathbf{v}_* - 1. \quad (\text{A.33})$$

É importante notar que o núcleo de espalhamento $R(\zeta_* \rightarrow \zeta)$ depende em geral da temperatura e da velocidade da superfície. Portanto a eq. (A.33) não representa uma equação linearizada para as condições de contorno. Para completar a linearização considere a seguinte integral

$$\int_{\zeta_{*n} < 0} R(\zeta_* \rightarrow \zeta) f_{w*} |\zeta_{*n}| d\zeta_*, \quad (\text{A.34})$$

onde $f_{w*} = f_w(\mathbf{v}_*)$ é a maxwelliana com a temperatura e velocidade da superfície, isto é,

$$f_w(\mathbf{v}) = n_w \left(\frac{m}{2\pi k T_w} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m [\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0 - \xi \mathbf{u}'_w]^2}{2k T_w} \right). \quad (\text{A.35})$$

Como será visto adiante não é necessário especificar o termo n_w .

Pela propriedade de reciprocidade do núcleo de espalhamento (2.21), a eq. (A.34) pode ser reescrita como

$$\int_{\zeta_{*n} < 0} R(\zeta_* \rightarrow \zeta) f_{w*} |\zeta_{*n}| d\zeta_* = \int_{\zeta_{*n} < 0} R(-\zeta \rightarrow -\zeta_*) d\zeta_* f_w |\zeta_n|. \quad (\text{A.36})$$

A última integral pode ser calculada com base na normalização do núcleo de espalhamento eq. (2.19), o que simplifica a eq. (A.36) a

$$\int_{\zeta_{*n} < 0} R(\zeta_* \rightarrow \zeta) f_{w*} |\zeta_{*n}| d\zeta_* = f_w |\zeta_n| \quad (\text{A.37})$$

Com base no resultado (A.37), a eq. (A.33) torna-se

$$\begin{aligned} \xi \mathbf{h} &= \int_{\zeta_{*n} < 0} R(\zeta_* \rightarrow \zeta) \frac{|\zeta_{*n}|}{|\zeta_n|} \left[\frac{f_{0*}}{f_0} - \frac{f_{w*}}{f_w} \right] d\mathbf{v}_* \\ &+ \int_{\zeta_{*n} < 0} R(\zeta_* \rightarrow \zeta) \frac{|\zeta_{*n}|}{|\zeta_n|} \frac{f_{0*}}{f_0} \xi \mathbf{h}_* d\mathbf{v}_* + \mathcal{O}(\xi^2) \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Como a maxwelliana da superfície f_w depende de ξ , esta é expandida numa série de Taylor até a ordem $\mathcal{O}(\xi^2)$, donde o seguinte resultado é obtido

$$\frac{f_{w*}}{f_w} = \frac{f_{0*}}{f_0} \left[1 + \xi (\mathbf{h}_{w*} - \mathbf{h}_w) + \mathcal{O}(\xi^2) \right]. \quad (\text{A.39})$$

Na última equação \mathbf{h}_w é a perturbação das propriedades da superfície:

$$\mathbf{h}_w = \frac{2\mathbf{v}}{v_m^2 \xi} \cdot (\mathbf{U}'_w - \mathbf{u}'_0) + \frac{T_w - T_0}{T_0 \xi} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_m^2} - \frac{3}{2} \right]. \quad (\text{A.40})$$

Note que \mathbf{h}_w é uma função conhecida a priori.

Finalmente, o núcleo de espalhamento é linearizado como

$$R = R_0 + \mathcal{O}(\xi), \quad (\text{A.41})$$

onde R_0 é o núcleo de espalhamento nas condições de equilíbrio.

A combinação das equações (A.38), (A.39) e (A.41) leva às condições de contorno linearizadas para \mathbf{h} :

$$\mathbf{h} = \hat{A}(\mathbf{h}) + \mathbf{h}_w - \hat{A}(\mathbf{h}_w), \quad v_n > 0, \quad (\text{A.42})$$

onde o operador de espalhamento \hat{A} foi definido por

$$\hat{A}(\mathbf{h}) = \int_{v_{*n} < 0} R_0(\mathbf{V}_* \rightarrow \mathbf{V}) \frac{|\mathbf{v}_{*n}|}{|\mathbf{v}_n|} \frac{f_{0*}}{f_0} \mathbf{h}_* d\mathbf{v}_*, \quad \mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}'_0. \quad (\text{A.43})$$

Nas duas últimas equações utilizou-se o fato de que $\mathbf{U}'_w \cdot \mathbf{n} = 0$, de modo que $\zeta_n = v_n$.

A.4 Linearização em torno da maxwelliana de referência

Suponha que ao invés de se linearizar a função de distribuição f em torno da maxwelliana de equilíbrio f_0 deseja-se linearizá-la em torno de uma maxwelliana de referência f_R , isto é,

$$f = f_R(1 + \xi h + \mathcal{O}(\xi^2)), \quad (\text{A.44})$$

onde ξ é ainda um pequeno parâmetro de perturbação. A função f_R é caracterizada por uma densidade de referência n_R , uma temperatura de referência T_R e uma velocidade hidrodinâmica de referência \mathbf{u}'_R não necessariamente uniformes. Por este motivo a maxwelliana de referência não representa necessariamente um estado de equilíbrio. Contudo, exige-se que as grandezas n_R , T_R e \mathbf{u}'_R , conhecidas a priori, representem pequenos desvios das respectivas quantidades de equilíbrio n_0 , T_0 e \mathbf{u}'_0 , o que, em termos de ξ , pode ser escrito como

$$n_R = n_0(1 + \mathcal{O}(\xi)), \quad T_R = T_0(1 + \mathcal{O}(\xi)), \quad \mathbf{u}'_R = \mathbf{u}'_0 + \mathbf{O}(\xi). \quad (\text{A.45})$$

Em vista das relações (A.45), a maxwelliana de referência f_R está relacionada à maxwelliana de equilíbrio f_0 por

$$f_R = f_0(1 + \xi H + \mathcal{O}(\xi^2)), \quad (\text{A.46})$$

onde H é um termo que depende do problema em estudo.

Combinando as equações (A.44) e (A.46), obtém-se

$$f = f_0[1 + \xi(h + H) + \mathcal{O}(\xi^2)]. \quad (\text{A.47})$$

Observa-se que a única diferença introduzida pela linearização em torno da maxwelliana de referência foi a separação da função incógnita original h (veja a eq. (A.2)) em

$$\mathbf{h} = h + H. \quad (\text{A.48})$$

Portanto, a linearização em torno da maxwelliana de referência é equivalente à linearização em torno da maxwelliana de equilíbrio, sendo a primeira empregada em certos problemas apenas por conveniência.

Em termos da expansão (A.44) a equação de Boltzmann linearizada eq. (A.6) fica

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}'} = \widehat{L}'(h) - \frac{\mathbf{v}}{\xi} \cdot \frac{\partial \ln f_R}{\partial \mathbf{r}'}. \quad (\text{A.49})$$

O último termo na eq. (A.49) surge em decorrência da eq. (A.45).

A obtenção dos momentos da função de distribuição (A.47), embora um pouco laboriosa, pode ser feita sem dificuldades a partir das derivações feitas na seq. A.2. Os momentos ficam neste caso

- Densidade numérica:

$$n = n_R + \int f_0 \xi h \, d\mathbf{v}; \quad (\text{A.50})$$

- Velocidade hidrodinâmica:

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u}'_R + \frac{1}{n_0} \int f_0 \mathbf{v} \xi h \, d\mathbf{v}; \quad (\text{A.51})$$

- Pressão:

$$P = P_R + \frac{m}{3} \int f_0 v^2 \xi h \, d\mathbf{v}; \quad (\text{A.52})$$

- Tensor tensão:

$$P_{ij} = P_R \delta_{ij} + m \int f_0 v_i v_j \xi h \, d\mathbf{v}; \quad (\text{A.53})$$

- Temperatura:

$$T = T_R + \frac{2T_0}{3n_0} \int f_0 \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{3}{2} \right) \xi h \, d\mathbf{v}; \quad (\text{A.54})$$

- Fluxo de calor:

$$\mathbf{q}' = kT_0 \int f_0 \mathbf{v} \left(\frac{v^2}{v_m^2} - \frac{5}{2} \right) \xi h \, d\mathbf{v}. \quad (\text{A.55})$$

Por fim, as condições de contorno podem ser obtidas através de um procedimento similar ao apresentado na seq. A.3, o que conduz a

$$h = \widehat{A}(h) + h_w - \widehat{A}(h_w), \quad v_n > 0, \quad (\text{A.56})$$

onde

$$h_w = \frac{2\mathbf{v}}{v_m^2 \xi} \cdot (\mathbf{U}'_w - \mathbf{u}'_R) + \frac{T_w - T_R}{T_0 \xi} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u}'_0)^2}{v_m^2} - \frac{3}{2} \right]. \quad (\text{A.57})$$