

**DENIZE KALEMPA**

**MODELAGEM NUMÉRICA DE PROPAGAÇÃO DE ONDAS  
EM GASES RAREFEITOS**

**Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Setor de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Ciências.**

**Orientador: Prof. Dr. Felix Sharipov**

**CURITIBA  
2009**

**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**PARECER**

Os abaixo-assinados, membros da banca examinadora de Defesa de Tese de Doutorado do estudante **Denize Kalempa** são de parecer favorável e consideram aprovada a redação final da Defesa de Tese cujo título é **Modelagem Numérica de Propagação de Ondas em Gases Rarefeitos**.

Curitiba, 17 de fevereiro de 2009.

**Banca Examinadora**

**Prof. FELIX SHARIPOV  
(Orientador/ Presidente) (UFPR)**

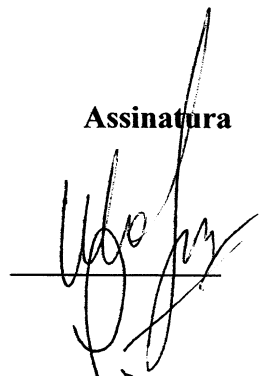
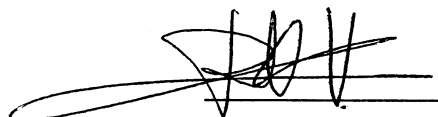
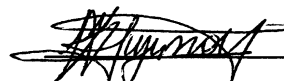
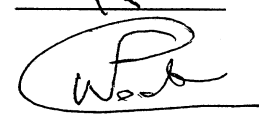
**Prof. PAULO CÉSAR PHILIPPI  
(UFSC)**

**Prof. WAGNER FIGUEIREDO  
(UFSC)**

**Prof. MILTON MASSUMI FUJIMOTO  
(UFPR)**

**Prof. RICARDO LUIZ VIANA  
(UFPR)**

**Assinatura**

## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente agradeço a Deus por iluminar meus caminhos e estar sempre presente em minha vida. Graças às oportunidades que Ele me concedeu estou entre os poucos privilegiados no mundo todo que têm acesso à educação e cultura.

Ao prof. Dr. Felix Sharipov pela orientação e paciência desde os meus tempos de iniciação científica e pela amizade que acredito que consegui conquistar após tantos anos de convivência!

À minha família e amigos, que são a base para tudo na vida.

Ao CNPq pelo auxílio financeiro concedido nos últimos quatro anos.

À CAPES pelo auxílio financeiro concedido para a realização de estágio de doutorado na Universidade de Kyoto, Japão, o qual foi muito importante para a aquisição de novos conhecimentos e ampliação da minha visão de mundo e cultura.

Aos amigos Adriano W. da Silva e Cleber F. do Nascimento, pelo apoio e amizade desde os nossos tempos de calouros.

À Jane Rosa e Jiusandro Kuhn pelo exemplo de que, num meio acadêmico cada vez mais marginalizado pela competitividade, ainda é possível encontrar pessoas que alcançam seus objetivos simplesmente com muito trabalho, esforço e bom caráter.

À todos que, de alguma forma, contribuíram para a realização desse trabalho.

Ubi dubium ibi libertas.  
(Onde há dúvida, há liberdade.)

Provérbio latino

# Sumário

<b>LISTA DE TABELAS</b>	<b>viii</b>
<b>LISTA DE FIGURAS</b>	<b>ix</b>
<b>RESUMO</b>	<b>xii</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xiii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Conceitos básicos</b>	<b>6</b>
2.1 Regimes de escoamento do gás . . . . .	6
2.1.1 Sistemas não-estacionários . . . . .	8
2.2 Equações de Navier-Stokes . . . . .	11
2.3 Teoria clássica de propagação do som em gases . . . . .	15
2.4 Função de distribuição das velocidades moleculares e equação de Boltzmann . . . . .	16
2.4.1 Misturas gasosas . . . . .	21
2.5 Interação gás-superfície . . . . .	24
<b>3 Revisão de Literatura</b>	<b>27</b>
<b>4 Problema de Stokes</b>	<b>38</b>
4.1 Esquema do problema e objetivo . . . . .	38
4.2 Regime de oscilação lenta ( $\theta \rightarrow \infty$ ) . . . . .	40
4.3 Equação cinética . . . . .	43
4.4 Regime de oscilação rápida ( $\theta \rightarrow 0$ ) . . . . .	44
4.5 Regime de transição . . . . .	45

4.5.1	Método dos Momentos Integrais . . . . .	47
4.5.2	Método de Velocidades Discretas . . . . .	48
4.5.3	Resultados numéricos e discussão . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Problema de Stokes para uma mistura binária de gases monoatômicos</b>	<b>58</b>
5.1	Regime de oscilação lenta ( $\theta \rightarrow \infty$ ) . . . . .	59
5.2	Equação cinética . . . . .	60
5.3	Regime de oscilação rápida ( $\theta \rightarrow 0$ ) . . . . .	62
5.4	Regime de transição . . . . .	62
5.4.1	Método de solução . . . . .	64
5.4.2	Resultados numéricos e discussão . . . . .	65
<b>6</b>	<b>Fluxo de Couette Oscilatório</b>	<b>72</b>
6.1	Formulação do problema e objetivo . . . . .	73
6.2	Regime de oscilação lenta e rarefação baixa . . . . .	74
6.3	Equação cinética . . . . .	77
6.4	Regime de oscilação rápida e rarefação alta . . . . .	77
6.5	Regime de transição . . . . .	79
6.5.1	Resultados numéricos e discussão . . . . .	82
<b>7</b>	<b>Propagação do som em gases rarefeitos</b>	<b>92</b>
7.1	Formulação do problema e objetivo . . . . .	92
7.2	Regime de oscilação lenta . . . . .	95
7.3	Equação cinética . . . . .	96
7.4	Regime de oscilação rápida . . . . .	98
7.5	Regime de transição . . . . .	99
7.5.1	Método de velocidades discretas . . . . .	101
7.5.2	Resultados numéricos e discussão . . . . .	104
<b>8</b>	<b>Propagação do som num gás confinado entre fonte e receptor</b>	<b>111</b>
8.1	Esquema do problema e objetivo . . . . .	111
8.2	Regime de oscilação lenta e rarefação baixa . . . . .	112
8.3	Equação cinética . . . . .	117

8.4	Regime de oscilação rápida e rarefação alta . . . . .	118
8.5	Regime de transição . . . . .	120
8.5.1	Resultados numéricos e discussão . . . . .	122
8.5.2	Comparação dos resultados obtidos via equação cinética e equações de Navier-Stokes . . . . .	129
<b>9</b>	<b>Conclusão e perspectivas</b>	<b>131</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>134</b>
<b>A</b>	<b>Aproximações de funções especiais</b>	<b>142</b>
<b>B</b>	<b>Método de aceleração de convergência</b>	<b>144</b>
<b>C</b>	<b>Modelo de McCormack</b>	<b>146</b>
<b>D</b>	<b>Potencias de interação intermolecular</b>	<b>149</b>

# Lista de Tabelas

3.1	Dispersão do som: comparação das aproximações de primeira e segunda ordem no parâmetro $1/\theta$ . . . . .	29
4.1	Amplitudes e fases em $x = 0$ e comprimento de penetração (reflexão difusa) . . . .	51
4.2	Influência dos coeficientes de acomodação na amplitude $u_m$ . . . . .	54
4.3	Influência dos coeficientes de acomodação na amplitude $\Pi_m$ . . . . .	54
4.4	Influência dos coeficientes de acomodação na fase $\varphi_u$ . . . . .	54
4.5	Influência dos coeficientes de acomodação na fase $\varphi_p$ . . . . .	55
5.1	Amplitudes e fases em $x = 0$ e comprimento de penetração da onda, $C = 0, 1$ . . . .	68
5.2	Amplitudes e fases em $x = 0$ e comprimento de penetração da onda, $C = 0, 5$ . . . .	68
5.3	Amplitudes e fases em $x = 0$ e comprimento de penetração da onda, $C = 0, 9$ . . . .	68
6.1	Amplitude $\Pi_m$ da tensão de cisalhamento do gás em $x = 0$ e $x = L$ . . . . .	86
6.2	Fase $\varphi_p$ da tensão de cisalhamento do gás em $x = 0$ e $x = L$ . . . . .	87
7.1	Amplitude $A_P$ de $\Pi(x)$ versus distância . . . . .	104
7.2	Fase $\varphi_p$ de $\Pi(x)$ versus distância . . . . .	105
7.3	Influência dos coeficientes de acomodação quando $\theta = 0, 1$ . . . . .	105
7.4	Influência dos coeficientes de acomodação quando $\theta = 1$ . . . . .	105
7.5	Influência dos coeficientes de acomodação quando $\theta = 10$ . . . . .	106
8.1	Amplitude de $\Pi(x)$ versus $\delta$ e $\theta$ em $x = 0$ e $x = L$ . . . . .	123
8.2	Fase de $\Pi(x)$ versus $\delta$ e $\theta$ em $x = 0$ e $x = L$ . . . . .	123



# Lista de Figuras

2.1	Intervalo de número de Knudsen correspondendo a cada regime de escoamento do gás . . . . .	9
2.2	Deslizamento do gás na superfície sólida . . . . .	14
2.3	Interação gás-superfície . . . . .	24
3.1	Figura extraída da Ref. [1]: Inverso da velocidade adimensional do som versus razão entre as frequências das colisões moleculares e do som. . . . .	32
3.2	Figura extraída da Ref. [1]: Coeficiente de atenuação versus razão entre as frequências das colisões moleculares e do som. . . . .	33
4.1	Esquema do problema de Stokes . . . . .	39
4.2	Comparação das soluções analíticas com deslizamento e sem deslizamento. . . . .	42
4.3	Perfil da função de perturbação $\Phi$ versus velocidade $c_x$ . . . . .	49
4.4	Perfis das atenuações da velocidade $u(x)$ e da tensão de cisalhamento $\Pi(x)$ . . . . .	52
4.5	Perfis para as fases da velocidade $u(x)$ e da tensão de cisalhamento $\Pi(x)$ . . . . .	53
4.6	Amplitude da velocidade: comparação da solução numérica com a solução analítica obtida via equação de movimento de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento. . . . .	56
5.1	Comprimento de penetração da onda, $\lambda$ , versus concentração, $C$ , quando $\theta = 0, 1$ . . . . .	66
5.2	Comprimento de penetração da onda, $\lambda$ , vs concentração, $C$ , quando $\theta = 1$ . . . . .	66
5.3	Comprimento de penetração da onda, $\lambda$ , versus concentração, $C$ , quando $\theta = 10$ . . . . .	67
5.4	Amplitude e fase da velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração $C = 0, 1$ . . . . .	69
5.5	Amplitude e fase da velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração $C = 0, 5$ . . . . .	70
6.1	Esquema do problema de fluxo de Couette oscilatório . . . . .	73

6.2	Comparação das soluções analíticas obtidas com condições de contorno de não-deslizamento e deslizamento do gás na superfície sólida. . . . .	76
6.3	Perfis das funções $\Phi$ e $\tilde{\Phi}$ vs $c_x$ em $x = 0, 1$ quando $\delta = 1$ e $\theta = 0, 1$ . . . . .	81
6.4	Comparação dos resultados obtidos no presente trabalho (linhas) com resultados obtidos na Ref. [85] via método de Monte Carlo (símbolos). . . . .	83
6.5	Amplitude na placa oscilatória em função dos parâmetros $\theta$ e $\delta$ . . . . .	84
6.6	Perfil da amplitude e fase da velocidade $u(x)$ . . . . .	89
6.7	Perfil da amplitude e fase da tensão de cisalhamento $\Pi(x)$ . . . . .	90
6.8	Amplitude da velocidade: comparação entre resultados obtidos via equação cinética e via equação de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento. . . . .	91
7.1	Esquema do problema para propagação do som . . . . .	93
7.2	Atenuação e velocidade de fase do desvio de densidade $\rho(x)$ . . . . .	106
7.3	Atenuação e velocidade de fase da velocidade hidrodinâmica $u(x)$ . . . . .	107
7.4	Atenuação e velocidade de fase do desvio de temperatura $\tau(x)$ . . . . .	107
7.5	Atenuação e velocidade de fase para o deviante do tensor pressão $\Pi(x)$ . . . . .	108
7.6	Comparação dos resultados obtidos no presente trabalho com resultados encontrados na literatura. . . . .	109
8.1	Esquema do problema: propagação do som num gás confinado entre fonte e receptor.	111
8.2	Amplitudes da velocidade $u(x)$ e do desvio de temperatura $\tau(x)$ para $\theta = 10$ : comparação das soluções obtidas via teoria clássica de propagação do som em gases e via equações de Navier-Stokes com condição de contorno de salto de temperatura nas paredes. . . . .	114
8.3	Amplitudes da velocidade $u(x)$ e do desvio de temperatura $\tau(x)$ para $\theta = 20$ : comparação das soluções obtidas via teoria clássica de propagação do som em gases e via equações de Navier-Stokes com condição de contorno de salto de temperatura nas paredes. . . . .	115
8.4	Amplitude da velocidade $u(x)$ e desvio de temperatura $\tau(x)$ para $\theta = 50$ : comparação das soluções obtidas via teoria clássica de propagação do som em gases e via equações de Navier-Stokes com condição de contorno de salto de temperatura nas paredes. . . . .	116
8.5	Perfil da amplitude de $\Pi(x)$ no receptor . . . . .	124
8.6	Amplitude e fase da velocidade hidrodinâmica $u(x)$ versus distância $x/L$ . . . . .	125

8.7	Amplitude e fase da componente normal do tensor pressão $\Pi(x)$ versus distância $x/L$ . . . . .	126
8.8	Amplitude e fase do desvio de temperatura $\tau(x)$ versus distância $x/L$ . . . . .	127
8.9	Amplitude da velocidade hidrodinâmica $u(x)$ para $\delta = 100$ e $\theta = 10$ . . . . .	128
8.10	Perfil da amplitude da velocidade hidrodinâmica para $\theta = 20$ . . . . .	129
8.11	Perfil da amplitude do desvio de densidade para $\theta = 20$ . . . . .	129
8.12	Perfil da amplitude do desvio de temperatura para $\theta = 20$ . . . . .	130
8.13	Amplitude do desvio de temperatura para $\theta = 20$ e $\delta = 100$ . . . . .	130
D.1	Figura extraída da Ref. [2] para os modelos de interação intermolecular: (a) esferas-rígidas; (b) centros de repulsão; (c) Lennard-Jones . . . . .	149

## RESUMO

Atualmente o estudo e simulação da propagação de ondas em gases rarefeitos possui grande interesse principalmente devido ao desenvolvimento dos revolucionários microsistemas eletrônicos e mecânicos (MEMS, Micro-Electro-Mechanical Systems) com partes móveis que podem oscilar. Nesses microsistemas, dependendo da rarefação do gás e da frequência de oscilação das partes móveis, a hipótese de meio contínuo sob a qual está fundamentada as equações da Mecânica dos Meios Contínuos não é válida e, conseqüentemente, uma descrição a nível microscópico é necessária. Os métodos de Dinâmica de Gases Rarefeitos são capazes de descrever corretamente o comportamento de um gás em regimes arbitrários de rarefação e oscilação pois são baseados nos conceitos da teoria cinética dos gases, cujo objetivo é determinar quantidades macroscópicas em função de grandezas microscópicas, e na equação de Boltzmann. O presente trabalho de tese de doutorado tem por objetivo resolver numericamente alguns problemas envolvendo a propagação de ondas em gases rarefeitos devido à influência de superfícies oscilatórias. A oscilação é assumida como totalmente estabelecida de modo que a dependência temporal é harmônica. Também é assumido que a amplitude da velocidade da oscilação é muito pequena em comparação com a velocidade molecular mais provável de modo que o problema pode ser linearizado nas proximidades do estado de equilíbrio. Devido à grande dificuldade em resolver a equação de Boltzmann na forma exata, a solução dos problemas é baseada em modelos cinéticos para a equação não-estacionária de Boltzmann. Dois métodos numéricos diferentes são utilizados: método de velocidades discretas e método dos momentos integrais. A influência da interação gás-superfície é analisada com base no núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis. As características macroscópicas do gás tais como velocidade hidrodinâmica, desvios de densidade e temperatura, etc, são determinadas num amplo intervalo de número de Knudsen e razão entre as frequências das colisões moleculares e da oscilação. Alguns resultados são comparados com dados experimentais encontrados na literatura e também com soluções analíticas obtidas em alguns regimes de rarefação do gás e frequência de oscilação do sistema em estudo.

**Palavras-chave:** propagação de ondas, gases rarefeitos, sistemas oscilatórios.

## ABSTRACT

Nowadays, the study and numerical simulation of non-stationary processes in rarefied gases is very important for the development and improvement of new technologies such as the revolutionary MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems) with movable parts which can oscillate and disturb the equilibrium state of the gas in its surroundings. In this kind of system, depending on the gas rarefaction and oscillation frequency, the continuum assumption is not valid and, consequently, the gas flow must be described by using a microscopic approach rather than the equations of continuum mechanics. The methods of Rarefied Gas Dynamics are efficient in describing the gas flow at arbitrary conditions of gas rarefaction and oscillation frequency since they are based on concepts of kinetic theory of gases and the Boltzmann equation. The aim of the present doctoral thesis work is to investigate some non-stationary problems of current interest consisting on gas flow caused by the influence of oscillatory surfaces. It is assumed a fully established oscillation so that the temporal dependence is harmonic. Furthermore, it is assumed that the amplitude of the oscillation speed is very small in comparison with the most probable molecular velocity so that the problem can be linearized near the equilibrium state. Since the solution of the Boltzmann equation is still a very difficult task, the proposed problems are solved via kinetic models to the non-stationary Boltzmann equation. Two different numerical methods are employed: discrete velocity method and integral moment method. The influence of the gas-surface interaction law on the solution of the problems is analyzed by using the Cercignani-Lampis scattering kernel on the boundary conditions. The macrocharacteristics of the gas flow such as bulk velocity, temperature and density deviations, etc, are determined in a wide range of gas rarefaction (characterized by the Knudsen number) and ratio of intermolecular collision frequency to oscillation frequency. Some results are compared with experimental data obtained from the literature and also with analytical solutions obtained in some gas flow regimes.

**Keywords:** wave propagation, rarefied gases, oscillatory systems.

# Capítulo 1

## Introdução

A Dinâmica de Gases Rarefeitos, abreviada no presente trabalho por DGR, tem por objetivo o estudo de fenômenos relacionados ao escoamento de gases em sistemas com comprimento característico da mesma ordem de grandeza do livre caminho médio das moléculas de gás, e.g. escoamento ao redor de aeronaves em grande altitude e veículos espaciais na reentrada atmosférica, microsistemas eletrônicos e mecânicos (do inglês MEMS - Micro-Electro-Mechanical Systems), equipamentos de vácuo, etc. Em tais sistemas a natureza molecular do gás não pode ser desprezada e, conseqüentemente, uma abordagem a nível microscópico é necessária para descrever corretamente os fenômenos que ocorrem nesses sistemas. A DGR começou a ser desenvolvida no século XIX mas sua importância foi reconhecida somente em meados de 1957, com o início da exploração espacial. A base da DGR é a teoria cinética dos gases [1–7] que tem por objetivo descrever as propriedades macroscópicas de um gás através de grandezas microscópicas utilizando a equação proposta por Ludwig Boltzmann [8], a qual descreve a evolução da função de distribuição das velocidades moleculares. Conhecendo a função de distribuição das velocidades moleculares, qualquer grandeza macroscópica do gás (velocidade, temperatura, pressão, etc) é determinada utilizando conceitos estatísticos.

Ao longo de todos esses anos grandes avanços foram realizados na área de DGR e atualmente se nota um crescente interesse pela mesma devido ao fato de que muitas inovações tecnológicas, tais como os revolucionários microsistemas eletrônicos e mecânicos [9, 10], exigem a compreensão de fenômenos físicos que não podem ser descritos com o uso das equações clássicas da Mecânica dos Meios Contínuos. Os microsistemas eletrônicos e mecânicos possuem dimensões da mesma ordem de grandeza do livre caminho médio molecular, e.g. acelerômetros utilizados em air bags de automóveis [11], e devido a isso a hipótese de meio contínuo perde sua validade e uma abordagem a nível microscópico é necessária para descrever corretamente todos os fenômenos que ocorrem nesses sistemas de escala micrométrica. Atualmente microsistemas estão sendo muito utilizados e o processo de fabricação dos mesmos teve um grande avanço nas últimas décadas. Porém, para melhorar a performance desses microsistemas eletrônicos e mecânicos é fundamental compreender o que ocorre fisicamente nos mesmos já que, em algumas situações, eles se comportam de forma tão diferente de rotineiros sistemas macroscópicos. A DGR é capaz de descrever corretamente os

fenômenos físicos que ocorrem em microsistemas gasosos pois, como mencionado anteriormente e ao contrário da Mecânica dos Meios Contínuos, leva em consideração a natureza molecular do gás.

Existem muitos outros exemplos atuais de aplicabilidade e importância da DGR tais como indústria de vácuo [12], simulação de aerossóis em pesquisa relacionada ao meio ambiente, experimentos de ciência pura como, por exemplo, determinação da massa dos neutrinos no projeto KATRIN (KARlsruhe TRItium Neutrino experiment) que está sendo realizado na Alemanha desde 2003 e no qual os métodos de DGR têm sido amplamente utilizados para simular e prever os fenômenos que ocorrem nos gases utilizados no experimento [13, 14], etc.

O principal parâmetro utilizado em DGR é o número de Knudsen, denotado por  $Kn$ , o qual caracteriza a rarefação do gás e é definido como a razão entre o livre caminho médio molecular e um comprimento característico do sistema em estudo. Com base nesse parâmetro o regime de escoamento do gás é classificado em três tipos:

(i) Regime de moléculas livres ( $Kn \rightarrow \infty$ ), no qual o livre caminho médio molecular é muito maior que o comprimento característico do sistema de modo que o movimento das moléculas de gás pode ser considerado como independente;

(ii) Regime hidrodinâmico ( $Kn \rightarrow 0$ ), no qual o livre caminho médio molecular é muito menor que o comprimento característico do sistema tal que o meio gasoso pode ser considerado como um meio contínuo;

(iii) Regime de transição, no qual o livre caminho médio molecular e o comprimento característico do sistema possuem a mesma ordem de grandeza.

Para processos não-estacionários ou transientes, além do número de Knudsen é necessário introduzir um outro parâmetro, denotado por  $\theta$  e denominado parâmetro de oscilação, definido como a razão entre a frequência das colisões moleculares e a frequência de oscilação característica do sistema em estudo. Com base nesse parâmetro os seguintes regimes são definidos:

(i) Regime de oscilação lenta ( $\theta \rightarrow \infty$ ), no qual a frequência de oscilação característica do sistema é muito menor que a frequência das colisões moleculares, ou seja, muitas colisões intermoleculares ocorrem durante um ciclo da oscilação;

(ii) Regime de oscilação rápida ( $\theta \rightarrow 0$ ), no qual a frequência de oscilação característica do sistema é muito maior que a frequência das colisões moleculares, ou seja, durante um ciclo da oscilação o número de colisões intermoleculares é muito pequeno;

(iii) Regime de transição em relação à oscilação do sistema, no qual a frequência de oscilação característica do sistema possui a mesma ordem de grandeza que a frequência das colisões moleculares.

A DGR é válida em todo o intervalo de número de Knudsen  $Kn$  e parâmetro de oscilação  $\theta$ . Por outro lado, as equações da Mecânica dos Meios Contínuos são válidas somente no regime hidrodinâmico e, no caso de sistemas não-estacionários, a condição adicional de que a frequência das colisões moleculares deve ser muito maior que a frequência de oscilação característica do sistema deve ser satisfeita. Portanto, com o objetivo de descrever o escoamento de gases para número de Knudsen e parâmetro de oscilação arbitrários, os métodos de DGR devem ser utilizados

já que estes abrangem todo o intervalo de rarefação do gás e oscilação do sistema.

Os métodos de DGR se baseiam na solução da equação de Boltzmann [1,4] ou no método de simulação direta de Monte Carlo [15]. Apesar da grande infra-estrutura computacional disponível nos dias atuais, resolver a equação de Boltzmann na forma exata ainda é um grande desafio. Consequentemente, os modelos cinéticos, desenvolvidos com o intuito de simplificar a equação de Boltzmann mantendo as suas propriedades fundamentais (conservação de massa, momento e energia, teorema H de Boltzmann), ainda são muito utilizados. O primeiro modelo cinético foi desenvolvido em 1954 por Bhatnagar, Gross e Krook [16], o qual é comumente referenciado como modelo BGK e ainda hoje é muito utilizado para descrever o comportamento de um gás único em processos isotérmicos. O modelo proposto por Shakhov [17] também é muito utilizado e pode ser considerado como uma versão melhorada do modelo BGK pois pode descrever corretamente o comportamento do gás em processos não-isotérmicos. Para misturas de gases o modelo proposto por McCormack [18] é considerado a melhor opção. Detalhes sobre esses modelos são apresentados posteriormente.

O método de simulação direta de Monte Carlo [15] é um método estatístico aplicado em escoamentos com número de Mach grande, como por exemplo, escoamento supersônico ao redor de uma esfera [19], escoamentos relacionados à aerodinâmica de satélites [20, 21], escoamento de gás através de um orifício [22, 23], etc. Devido ao fato de ser um método estatístico, o método de Monte Carlo não pode ser utilizado para número de Mach pequeno já que nesse caso as flutuações estatísticas são grandes. Apesar de ser um método muito conhecido e utilizado nos campos de engenharia, é um método que requer um esforço computacional muito grande de modo que em muitos casos seu uso é inviável do ponto de vista computacional.

A presente tese de doutorado tem por objetivo o estudo e modelagem numérica de alguns problemas envolvendo propagação de ondas em gases rarefeitos com base na solução de modelos cinéticos para a equação de Boltzmann. O estudo e simulação da propagação de ondas em gases rarefeitos, e processos não-estacionários em geral, é de fundamental importância mas na literatura o que se observa é que o número de artigos referentes ao assunto em questão é muito pequeno em comparação com o número de artigos que se referem a processos estacionários. Portanto, frente à infinidade de problemas envolvendo processos não-estacionários que são encontrados em situações práticas e que exigem uma maior compreensão, o assunto proposto para tese de doutorado é bem justificado e contribui para um maior avanço na área de DGR. Na presente tese de doutorado quatro problemas não-estacionários envolvendo propagação de ondas em gases rarefeitos são abordados e foram escolhidos porque atualmente possuem grande importância prática e ainda não foram solucionados de forma a descrever corretamente o comportamento do gás em todos os regimes de escoamento citados anteriormente. Os problemas abordados são os seguintes:

(i) Problema de Stokes, que consiste no estudo do escoamento de um gás no espaço semi-infinito limitado por uma placa plana e infinita que oscila numa direção longitudinal ao seu próprio plano. Este problema foi primeiramente investigado por Stokes e, de acordo com [24], naquela época o interesse em tal problema estava relacionado com a tentativa de explicar como os efeitos de viscosidade afetavam o movimento de fluidos em contato com superfícies vibratórias. É um



problema clássico e pode ser encontrado na maioria dos livros de Dinâmica de Fluidos, e.g. [25]. Porém, usualmente o problema é resolvido com base nas equações de Navier-Stokes que são válidas somente quando a frequência de oscilação da superfície é muito pequena comparada com a frequência das colisões moleculares no gás. Portanto, a fim de considerar frequência de oscilação arbitrária é necessário recorrer à equação de Boltzmann e aos métodos de DGR;

(ii) Fluxo de Couette oscilatório, no qual a região de escoamento do gás é limitada por duas placas planas, paralelas e infinitas com uma das placas oscilando na direção longitudinal ao seu próprio plano. Apesar deste problema consistir em uma pequena modificação do problema de Stokes, a presença da placa estacionária afeta significativamente as características macroscópicas do gás. Novamente, a solução com base nas equações da Mecânica dos Meios Contínuos possui limitações e para resolver o problema de forma geral, ou seja, considerando rarefação do gás e frequência de oscilação arbitrários, é necessário utilizar os métodos de DGR;

(iii) Propagação do som, que também é um problema clássico e há muito tempo vem sendo investigado com base nas equações da Mecânica dos Meios Contínuos e teoria clássica de propagação do som em gases, e.g. [26]. O problema é tratado considerando uma placa plana e infinita oscilando na direção normal ao seu próprio plano como sendo a fonte de ondas sonoras. Nesse problema o uso das equações de Navier-Stokes também é limitado às situações em que a frequência do som é muito menor que a frequência das colisões moleculares no gás em contato com a superfície oscilatória. Além disso, a hipótese da teoria clássica de propagação do som em gases [26] de que todas as características macroscópicas do gás sofrem desvios proporcionais à solução de onda harmônica no espaço também é válida somente quando a frequência do som é muito menor que a frequência das colisões moleculares e distante da superfície oscilatória. Nas proximidades da fonte sonora a solução não é harmônica no espaço mesmo em condições de baixas frequências do som. Portanto, visando descrever a propagação do som de forma mais geral uma abordagem com base na equação de Boltzmann é necessária juntamente com o abandono da hipótese de onda harmônica no espaço;

(iv) Gás confinado entre fonte e receptor sonoros, problema cujo objetivo é verificar a influência do receptor de ondas sonoras na propagação do som. Para isso, considera-se um gás confinado entre duas placas planas, paralelas e infinitas sendo que uma das placas oscila na direção normal ao seu próprio plano e a outra placa permanece estacionária. A placa oscilatória é a fonte de ondas sonoras enquanto que a placa estacionária atua como receptor das ondas. Dependendo da pressão do gás confinado entre as placas e da frequência de oscilação da placa, o problema não pode ser resolvido via equações da Mecânica dos Meios Contínuos tal que, novamente, os métodos de DGR são fundamentais para descrever corretamente o comportamento do gás confinado entre as placas.

Atualmente os problemas de Stokes e fluxo de Couette oscilatório possuem grande interesse pois existem microsistemas, e.g. microacelerômetros e sensores de gás, formados por pequenas placas separadas por uma distância de aproximadamente  $1\mu m$  que oscilam lateralmente e um gás, geralmente ar, está confinado entre as placas. Nessa situação, dependendo da pressão do gás entre as placas e da frequência de oscilação da placa oscilatória, as equações da Mecânica dos Meios Contínuos não podem ser utilizadas para descrever o comportamento do gás. Consequentemente,

para tratar o problema de forma geral é necessário utilizar os métodos de DGR para resolver a equação de Boltzmann e assim descrever corretamente o comportamento do gás e prever os possíveis efeitos que tendem a afetar a performance do dispositivo. Nesse tipo de sistema, uma melhor performance é alcançada quando os efeitos da viscosidade do gás confinado entre as placas é pequeno e isso ocorre em condições de baixa pressão, ou seja, em regimes de gás rarefeito. De forma similar, o problema de propagação do som também é de interesse na área de microsistemas pois em alguns tipos de dispositivos existem microestruturas que oscilam na direção normal ao próprio plano de tal forma que os efeitos simultâneos de compressão e expansão no gás causados pelo movimento de oscilação da superfície geram uma onda de pressão, ou onda de som, que se propaga no gás e afeta as propriedades de equilíbrio do mesmo. Portanto, todos os problemas propostos para tese de doutorado possuem não somente importância a nível teórico mas também a nível prático.

Esses quatro problemas são resolvidos para gases monoatômicos e o problema de Stokes também é resolvido para o caso de uma mistura binária de gases monoatômicos. Os problemas são resolvidos numericamente com base em modelos cinéticos para a equação de Boltzmann. Nos limites de rarefação e frequência de oscilação nos quais existe solução analítica uma comparação entre resultados numéricos e analíticos é realizada com o objetivo de averiguar o intervalo de validade das soluções analíticas. A princípio, devido à escassez de resultados na literatura, a confiabilidade dos resultados obtidos no presente trabalho de tese de doutorado é verificada através da utilização de dois métodos numéricos diferentes: método de velocidades discretas [27] e método dos momentos integrais [28]. Toda a metodologia utilizada para resolver os problemas propostos juntamente com os resultados e respectiva discussão são apresentados nos capítulos posteriores, os quais estão estruturados da seguinte forma:

Capítulo 2: os conceitos básicos necessários ao entendimento do presente trabalho são apresentados de forma resumida com a respectiva indicação de referências bibliográficas relevantes para um maior detalhamento de cada tópico apresentado;

Capítulo 3: uma revisão dos trabalhos encontrados na literatura sobre o assunto tratado na presente tese de doutorado é apresentada com o objetivo de mostrar ao leitor o que já foi feito a respeito do assunto com os respectivos resultados e relevância dos mesmos e também ressaltar a importância do estudo proposto para a tese de doutorado.

Capítulo 4: a metodologia utilizada para resolver o problema de Stokes é apresentada juntamente com os resultados obtidos e a respectiva discussão dos mesmos.

Capítulo 5: uma extensão do problema de Stokes tratado no Capítulo 4 é apresentada para o caso de misturas binárias de gases monoatômicos e os resultados para uma mistura de gases Hélio e Argônio são apresentados;

Capítulos 6, 7 e 8: apresentam, respectivamente, a metodologia, os resultados e respectiva discussão dos mesmos para os problemas de fluxo de Couette oscilatório, propagação do som e gás confinado entre fonte e receptor.

Capítulo 9: apresenta uma conclusão do presente trabalho de tese de doutorado e perspectivas de trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Conceitos básicos

Este capítulo tem por objetivo apresentar de forma resumida alguns conceitos fundamentais utilizados no presente trabalho e que são importantes para o entendimento dos próximos capítulos. Maiores detalhes sobre Teoria Cinética de Gases e Dinâmica de Gases Rarefeitos podem ser encontrados nas Refs. [3–7, 28, 29]. Detalhes sobre Mecânica dos Meios Contínuos e propagação do som em gases podem ser encontrados nas Refs. [24–26].

### 2.1 Regimes de escoamento do gás

Em DGR definir o regime de escoamento do gás é extremamente importante pois a escolha do método mais apropriado para a resolução dos problemas associados ao escoamento depende do tipo de escoamento, o qual é caracterizado pelo grau de rarefação do gás.

O número de Knudsen,  $\text{Kn}$ , é o principal parâmetro utilizado em DGR e caracteriza o grau de rarefação do gás. É definido como a razão entre o livre caminho médio molecular,  $\ell_0$ , e um comprimento característico do sistema gasoso,  $L'$ , ou seja,

$$\text{Kn} = \frac{\ell_0}{L'}. \quad (2.1)$$

O livre caminho médio molecular depende do potencial de interação intermolecular e, devido a isso, é mais conveniente utilizar uma quantidade  $\ell$  equivalente ao livre caminho médio molecular e definida da seguinte forma:

$$\ell = \frac{\mu v_m}{P}, \quad v_m = \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^{1/2}, \quad (2.2)$$

onde  $P$  e  $\mu$  são, respectivamente, a pressão e a viscosidade do gás.  $v_m$  é a velocidade molecular mais provável com  $T$  denotando a temperatura do gás,  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $m$  a massa molecular. No presente trabalho a quantidade dada em (2.2) é denominada de livre caminho equivalente.

O número de Knudsen está relacionado aos números de Reynolds, denotado por  $\text{Re}$  e definido como a razão entre forças inerciais e viscosas, e Mach, denotado por  $\text{Ma}$  e definido como a razão

entre a velocidade característica do escoamento e a velocidade do som no meio em estudo, pela seguinte expressão:

$$\text{Kn} = \sqrt{\gamma \frac{\pi}{2}} \frac{\text{Ma}}{\text{Re}}, \quad (2.3)$$

onde  $\gamma = c_p/c_v$  denota a razão entre os calores específicos à pressão e volume constantes e

$$\text{Re} = \frac{\rho U L'}{\mu}, \quad \text{Ma} = \frac{U}{c}, \quad c = \sqrt{\gamma \frac{k_B T}{m}}, \quad (2.4)$$

com  $\rho$  e  $U$  denotando, respectivamente, a densidade de massa e o módulo da velocidade hidrodinâmica do gás.

Costuma-se utilizar com maior frequência o chamado parâmetro de rarefação do gás,  $\delta$ , que é inversamente proporcional ao número de Knudsen e é dado pela seguinte expressão:

$$\delta = \frac{L'}{\ell} = \frac{P L'}{\mu v_m} \sim \frac{1}{\text{Kn}}. \quad (2.5)$$

A expressão (2.5) também é válida para misturas gasosas já que a pressão  $P$  e viscosidade  $\mu$  da mistura são quantidades mensuráveis e a massa  $m$  pode ser assumida como a massa média da mistura, ou seja,

$$m = \sum_{\alpha=1}^N \frac{n_{\alpha}}{n} m_{\alpha}, \quad (2.6)$$

onde  $N$  denota o número de constituintes na mistura,  $n_{\alpha}$  e  $m_{\alpha}$  denotam, respectivamente, a densidade de número de partículas e a massa atômica ou molecular da espécie  $\alpha$  que constitui a mistura.

De acordo com o valor que o parâmetro de rarefação  $\delta$  (ou o número de Knudsen) assume, o regime de escoamento do gás é classificado em três tipos:

- (i) Regime de moléculas livres ( $\delta \rightarrow 0$  ou  $\text{Kn} \rightarrow \infty$ ): nesse regime o livre caminho médio molecular é muito maior que o comprimento característico do escoamento e, portanto, as colisões moleculares ocorrem com muito menos frequência que as colisões das moléculas com a superfície sólida que delimita o fluxo gasoso. Assim, os efeitos da interação intermolecular podem ser desprezados, ou seja, assume-se que as moléculas se movimentam independentemente entre si. Nesse regime de escoamento o meio não é contínuo e, portanto, as equações da Mecânica dos Meios Contínuos não são válidas. Porém, como o termo associado às interações intermoleculares que aparece na equação integro-diferencial de Boltzmann pode ser desprezado, os problemas associados ao escoamento de gases nesse regime são resolvidos com base numa equação diferencial.
- (ii) Regime hidrodinâmico ( $\delta \rightarrow \infty$  ou  $\text{Kn} \rightarrow 0$ ): nesse regime o livre caminho médio molecular é muito menor que o comprimento característico do sistema e, conseqüentemente, o meio gasoso pode ser considerado como um meio contínuo no qual todas as equações da Mecânica dos Meios Contínuos são válidas.

(iii) Regime de transição: quando o comprimento característico do escoamento é da mesma ordem de grandeza do livre caminho médio molecular, o regime é chamado de regime de transição. Nesse regime a interação intermolecular não pode ser desprezada como no regime de moléculas livres. Além disso, o meio não pode ser considerado contínuo como no regime hidrodinâmico e, conseqüentemente, as equações da Mecânica dos Meios Contínuos não são válidas nesse regime de escoamento. Os métodos de Dinâmica de Gases Rarefeitos, que são baseados na solução da equação de Boltzmann ou no método de Monte Carlo, são ferramentas essenciais para a correta descrição de todos os fenômenos de transporte que ocorrem nesse tipo de escoamento. Porém, devido à grande dificuldade em resolver a equação de Boltzmann na forma exata, esse é o regime que apresenta maior dificuldade no tratamento dos problemas associados ao escoamento de gás.

Muitos autores, como por exemplo Bird [15], definem um outro regime de escoamento intermediário aos regimes hidrodinâmico e de transição: o regime de deslizamento, no qual  $0.01 \leq Kn \leq 0.1$ . Esse regime é uma extensão do regime hidrodinâmico onde as equações de Navier-Stokes ainda são válidas desde que as condições de contorno de deslizamento e salto de temperatura do gás na interface gás-sólido [28, 30] sejam utilizadas. Maiores detalhes sobre deslizamento do gás e salto de temperatura na interface são apresentados na Seção 2.2. É importante ressaltar que a classificação de um regime intermediário aos regimes hidrodinâmico e de transição é feito somente com o intuito de estender o intervalo de validade das equações de Navier-Stokes e evitar o uso da equação de Boltzmann. É claro que resolver as equações de Navier-Stokes nem sempre é uma tarefa fácil mas, do ponto de vista computacional, é mais viável do que resolver a equação de Boltzmann.

A Figura 2.1 mostra o intervalo de número de Knudsen abrangido em cada um dos regimes de escoamento citados anteriormente. O intervalo de número de Knudsen mostrado nessa figura para cada regime de escoamento é aproximado já que o mesmo depende da precisão desejada nos resultados. Ao contrário das equações de Euler (usadas para fluidos incompressíveis nos quais os efeitos de viscosidade são desprezíveis) e Navier-Stokes, a equação de Boltzmann pode ser utilizada em todos os regimes de escoamento do gás. Porém, para baixos valores de número de Knudsen há situações nas quais é muito mais viável resolver as equações da Mecânica dos Meios Contínuos do que a equação de Boltzmann.

### 2.1.1 Sistemas não-estacionários

Para sistemas não-estacionários ou transientes, i.e. sistemas com dependência temporal, além do parâmetro de rarefação (ou do número de Knudsen), um outro parâmetro deve ser introduzido para caracterizar o regime de escoamento do gás. Esse novo parâmetro, que no presente trabalho é denotado por  $\theta$  e chamado de parâmetro de oscilação, é definido da seguinte forma:

$$\theta = \frac{\nu}{\omega}, \quad (2.7)$$

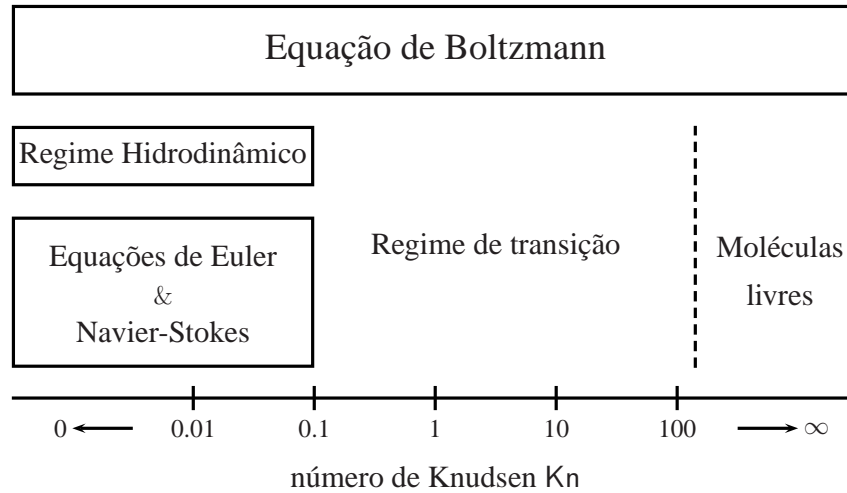


Figura 2.1: Intervalo de número de Knudsen correspondendo a cada regime de escoamento do gás

onde  $\nu$  é uma quantidade da mesma ordem de grandeza da frequência das colisões moleculares e  $\omega$  é a frequência da oscilação. De acordo com a teoria cinética de gases, a frequência das colisões moleculares possui a mesma ordem de grandeza da razão  $P/\mu$ , onde  $P$  e  $\mu$  são, respectivamente, a pressão e viscosidade do gás. Portanto, o parâmetro de oscilação  $\theta$ , definido em (2.7), pode ser reescrito em termos dessas duas grandezas mensuráveis, ou seja,

$$\theta = \frac{P}{\mu\omega}. \quad (2.8)$$

A definição (2.8) também é válida para misturas gasosas com  $P$  e  $\mu$  denotando a pressão e a viscosidade da mistura.

Com base no parâmetro de oscilação  $\theta$  os seguintes regimes de escoamento podem ser definidos:

- (i) Regime de oscilação rápida ( $\theta \rightarrow 0$ ), no qual a frequência de oscilação é muito maior que a frequência das colisões moleculares. Nessa situação há poucas colisões moleculares ocorrendo durante um ciclo da oscilação. Nesse regime, as colisões intermoleculares podem ser desprezadas sob condições de alta rarefação, ou seja,  $\delta \rightarrow 0$ , e nessa situação o regime pode ser chamado de regime de moléculas livres.
- (ii) Regime de oscilação lenta ( $\theta \rightarrow \infty$ ), no qual a frequência de oscilação é muito menor que a frequência das colisões moleculares. Essa situação é oposta à anterior, ou seja, há muitas colisões moleculares ocorrendo durante um ciclo da oscilação.
- (iii) Regime de transição, no qual as frequências de oscilação e colisões moleculares têm a mesma ordem de grandeza.

Em processos não-estacionários as equações da Mecânica dos Meios Contínuos são válidas sob duas condições: (i) o livre caminho médio molecular deve ser muito menor que o comprimento

característico do sistema, ou seja, o gás deve estar no regime hidrodinâmico no qual  $\delta \rightarrow \infty$  e (ii) a frequência das colisões moleculares deve ser muito maior que a frequência da oscilação, ou seja, muitas colisões moleculares ocorrem durante um ciclo da oscilação tal que  $\theta \rightarrow \infty$ . A hipótese de meio contínuo, sob a qual está fundamentada a Mecânica dos Meios Contínuos, é válida somente quando essas duas condições são satisfeitas.

Os parâmetros de rarefação  $\delta$  e oscilação  $\theta$  são independentes já que o primeiro não contém nenhuma informação a respeito da frequência de oscilação do sistema e o segundo não contém informação sobre o comprimento característico do domínio gasoso.

Na literatura o termo número de Reynolds acústico,  $Re_{ac}$ , é comumente encontrado em trabalhos referentes à propagação do som em gases e é definido da seguinte forma:

$$Re_{ac} = \frac{\rho}{\mu} \lambda_0 c_0, \quad (2.9)$$

onde  $\rho$  e  $\mu$  são a densidade e a viscosidade do gás,  $\lambda_0$  é o comprimento da onda e  $c_0$  é a velocidade adiabática do som. O número de Reynolds acústico está relacionado ao parâmetro de oscilação  $\theta$  utilizado no presente trabalho pela seguinte expressão:

$$Re_{ac} = 2\pi \frac{c_p}{c_v} \theta, \quad (2.10)$$

onde  $c_p$  e  $c_v$  são, respectivamente, os calores específicos à pressão e volume constantes.

O número de Stokes, denotado por  $\beta$  e usualmente chamado de parâmetro inercial, também é frequentemente utilizado. Esse número pode ser interpretado como o balanço entre os efeitos transientes e de viscosidade e é definido como a razão entre o tempo de relaxação das partículas gasosas e um tempo característico do sistema oscilatório em estudo. De acordo com [11], o número de Stokes pode ser escrito da seguinte forma:

$$\beta = \sqrt{\frac{\omega \rho L'^2}{\mu}}, \quad (2.11)$$

onde  $\omega$  é a frequência da oscilação,  $L'$  é um comprimento característico do domínio gasoso em estudo e as quantidades  $\rho$  e  $\mu$  são, respectivamente, a densidade e a viscosidade do gás. Quando  $\beta \ll 1$  o sistema pode ser considerado como estacionário ou quase-estacionário já que nessa situação o tempo de relaxação das partículas gasosas é muito pequeno comparado ao período da oscilação de modo que, durante um ciclo da oscilação, as partículas gasosas têm tempo suficiente para voltarem aos seus estados de equilíbrio. Caso contrário, i.e.  $\beta \gg 1$ , o tempo de relaxação das partículas gasosas é tão grande comparado ao período da oscilação tal que, durante um ciclo da oscilação, as partículas não possuem tempo suficiente para voltarem aos seus estados de equilíbrio e, conseqüentemente, um fluxo não-estacionário de gás tende a prevalecer. O número de Stokes está relacionado aos parâmetros de rarefação  $\delta$  e oscilação  $\theta$  do seguinte modo:

$$\beta = \sqrt{\frac{2}{\theta}} \delta. \quad (2.12)$$

## 2.2 Equações de Navier-Stokes

A equação de movimento de Navier-Stokes juntamente com as equações de continuidade e energia, as quais representam os princípios físicos básicos de conservação de massa, momento e energia, são a base da Mecânica dos Meios Contínuos [25] e modelam o escoamento de fluidos em geral. O conjunto dessas três equações geralmente é referenciado na literatura como equações de Navier-Stokes embora, estritamente falando, somente a equação de balanço de momento se deva aos trabalhos de Navier e Stokes. Essas equações são válidas quando o meio gasoso pode ser considerado como um contínuo de massa no qual as propriedades macroscópicas de um elemento de volume do fluido não são influenciadas pelas propriedades de moléculas individuais. Desse modo, as grandezas macroscópicas tais como velocidade, densidade, etc, referem-se a um elemento de fluido como um todo e representam médias sobre todas as moléculas que o compõem. Na ausência de forças externas, as equações de Navier-Stokes podem ser escritas da seguinte forma:

(i) Equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0, \quad (2.13)$$

onde  $\rho$  e  $\mathbf{U}$  denotam, respectivamente, a densidade de massa e a velocidade do gás.

(ii) Equação de balanço de momento de Navier-Stokes:

$$\rho \frac{D\mathbf{U}}{Dt'} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{U} + \left( \zeta + \frac{\mu}{3} \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{U}), \quad (2.14)$$

onde  $P$  denota a pressão do gás,  $\mu$  é o coeficiente de viscosidade cisalhante do gás (fricção interna devida às tensões de cisalhamento) e  $\zeta$  é chamado de segundo coeficiente de viscosidade do gás ou coeficiente de viscosidade volumétrica (fricção interna devida à variações de volume) e, para gases monoatômicos,  $\zeta = 0$ . Note que a equação (2.14) é válida para fluidos Newtonianos, ou seja, fluidos nos quais as tensões viscosas são linearmente proporcionais à taxa de deformação no volume de fluido.

A variação temporal representada pela notação  $D/Dt$  é conceitual e geralmente é chamada de derivada material ou substancial. É dada por

$$\frac{D}{Dt'} = \frac{\partial}{\partial t'} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \quad (2.15)$$

e representa a variação temporal de uma propriedade macroscópica do gás levando em conta que essa propriedade pode ser diferente em cada ponto do escoamento.

(iii) Equação de balanço de energia:

$$\rho \frac{D\epsilon}{Dt'} = \rho \frac{\partial Q}{\partial t'} - \nabla \cdot \mathbf{Q} - P(\nabla \cdot \mathbf{U}) + \Phi, \quad (2.16)$$

onde  $\epsilon$  é a energia interna específica do gás. A quantidade  $\Phi$ , chamada de função de dissipação, é dada por

$$\Phi = \sigma'_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x'_j}, \quad (2.17)$$



onde

$$\sigma'_{ij} = \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right), \quad (2.18)$$

e representa a taxa de dissipação de energia mecânica devido à ação das tensões viscosas.  $\sigma'_{ij}$  é o tensor das tensões viscosas e  $\delta_{ij}$  representa o símbolo de Kronecker.

O vetor  $\mathbf{Q}$  é o vetor fluxo de calor, o qual é dado pela lei de condução de Fourier

$$\mathbf{Q} = -\kappa \nabla T, \quad (2.19)$$

onde  $\kappa$  é o coeficiente de condutividade térmica do gás.

A quantidade  $Q$  denota o calor produzido no elemento de volume do gás sendo que o primeiro e segundo termos do lado direito da equação (2.16) representam, respectivamente,

- (i) a taxa de calor por unidade de massa produzido por agentes externos, como absorção de radiação pelo gás, ou internos, como reações químicas;
- (ii) a transferência de calor por condução através das paredes do elemento de volume do gás, devido à presença de gradientes de temperatura.

As equações de balanço de massa (2.13), momento (2.14) e energia (2.16) representam cinco equações escalares para seis incógnitas:  $\epsilon$ ,  $U_x$ ,  $U_y$ ,  $U_z$ ,  $P$  e  $\rho$ . Portanto, o sistema de equações não está fechado já que existem mais incógnitas que equações. O sistema é fechado com o uso da equação de estado para gases ideais

$$P = \frac{k_B}{m} \rho T, \quad (2.20)$$

e da equação para a energia interna específica do gás que, para o caso de gases monoatômicos, é dada por:

$$\epsilon = c_v T, \quad c_v = \frac{3 k_B}{2 m}, \quad (2.21)$$

onde  $c_v$  denota o calor específico a volume constante. Assim, a pressão  $P$  é determinada via densidade  $\rho$  e temperatura  $T$  via equação de estado, sendo que a temperatura  $T$  está relacionada à energia interna  $\epsilon$  via equação de energia (2.21). Desse modo, as equações (2.13), (2.14), (2.16) juntamente com (2.20) e (2.21) formam um sistema de sete equações escalares para as funções:  $\rho$ ,  $T$ ,  $P$ ,  $\epsilon$  e componentes da velocidade  $\mathbf{U}$ . Os coeficientes de viscosidade  $\mu$  e condutividade térmica  $\kappa$  que aparecem no sistema de equações são obtidos através de dados experimentais, e também via teoria cinética de gases, e são tabelados para diversos valores de pressão e temperatura.

Devido à complexidade matemática das equações de Navier-Stokes, encontrar uma solução analítica para um determinado problema de escoamento nem sempre é possível. De acordo com Fortuna [31], a dificuldade de se encontrar soluções analíticas para as equações de Navier-Stokes decorre do fato de que estas são equações diferenciais parciais não-lineares e a teoria matemática dessa classe de equações ainda não está suficientemente desenvolvida para permitir a obtenção de

soluções analíticas em regiões arbitrárias e com condições de contorno gerais, ou seja, as soluções analíticas ainda são muito restritas. Conseqüentemente, recorre-se a métodos numéricos para resolvê-las. É importante salientar que, em muitas situações, resolver as equações de Navier-Stokes numericamente é uma tarefa extremamente difícil mas, dependendo das propriedades do escoamento e do fluido, simplificações podem ser feitas de modo que as dificuldades numéricas inerentes à solução das equações de Navier-Stokes possam ser reduzidas.

De acordo com Fortuna [31], Prandtl foi o primeiro a mostrar que existe uma fina camada adjacente à uma superfície sólida em contato com um fluido na qual existe um gradiente normal de velocidade, devido às tensões viscosas, cuja influência não pode ser desprezada. Quando  $Kn \rightarrow 0$ , a espessura dessa camada é muito fina tal que os efeitos que ocorrem em tal camada, e.g. deslizamento do gás na superfície, podem ser desprezados. Devido à isso, geralmente a condição de contorno de não-deslizamento do gás na superfície é assumida para escoamentos no regime hidrodinâmico. Entretanto, a espessura da camada limite aumenta à medida que a rarefação do gás aumenta (aumento do número de Knudsen) e, conseqüentemente, os efeitos que ocorrem nessa camada passam a ser predominantes em condições de alta rarefação e não podem ser desprezados.

O fenômeno de deslizamento do gás numa superfície que delimita o domínio gasoso é bastante conhecido e começou a ser analisado por Maxwell [32, 33] que mostrou que esse fenômeno também ocorre quando existe um gradiente longitudinal de temperatura nas proximidades da superfície. Outro fenômeno típico de gases rarefeitos é o fenômeno de salto de temperatura na interface gás-sólido que ocorre quando existe um gradiente de temperatura normal à superfície sólida que delimita o gás de modo que a temperatura do gás na superfície não é igual à temperatura da superfície mas sofre um salto em relação à temperatura da parede. Usualmente, as equações de Navier-Stokes são resolvidas com condições de contorno que não levam em consideração esses fenômenos, i.e. deslizamento do gás e salto de temperatura na interface. Entretanto, nas situações em que  $0.01 \leq Kn \leq 0.1$ , condições de contorno apropriadas devem ser utilizadas para resolver as equações de Navier-Stokes pois nesse intervalo de número de Knudsen os efeitos da rarefação do gás já não podem ser desprezados e os fenômenos de deslizamento do gás e salto de temperatura são significativos.

A Figura 2.2 mostra o perfil da velocidade do gás na direção  $y$ , nas proximidades de uma superfície estacionária, causado por: (a) um gradiente de velocidade normal à parede (deslizamento viscoso) e (b) um gradiente de temperatura longitudinal à parede (deslizamento térmico). Nos perfis apresentados nessa figura, a linha sólida representa a solução numérica obtida via métodos de Dinâmica de Gases Rarefeitos.

Como pode ser visto, nas proximidades da parede existe uma fina camada da ordem de grandeza do livre caminho equivalente  $\ell$  na qual o perfil da velocidade  $U_y(x')$  não é linear em  $x'$  e a velocidade do gás em  $x' = 0$  não é zero devido ao deslizamento do gás. Distante da superfície sólida, i.e.  $x' \geq \ell$ , a velocidade  $U_y(x')$  é proporcional à  $\sigma_p \ell + x'$  na situação (a) e igual a uma constante  $\sigma_T$  na situação (b). Os valores de  $\sigma_p$  e  $\sigma_T$ , chamados de coeficientes de deslizamento viscoso e térmico, são calculados através da extrapolação (linha pontilhada) do perfil em  $x' \gg \ell$ . Na região  $0 \leq x' \leq \ell$ , o desvio entre o perfil real e o extrapolado é muito pequeno e não contribui

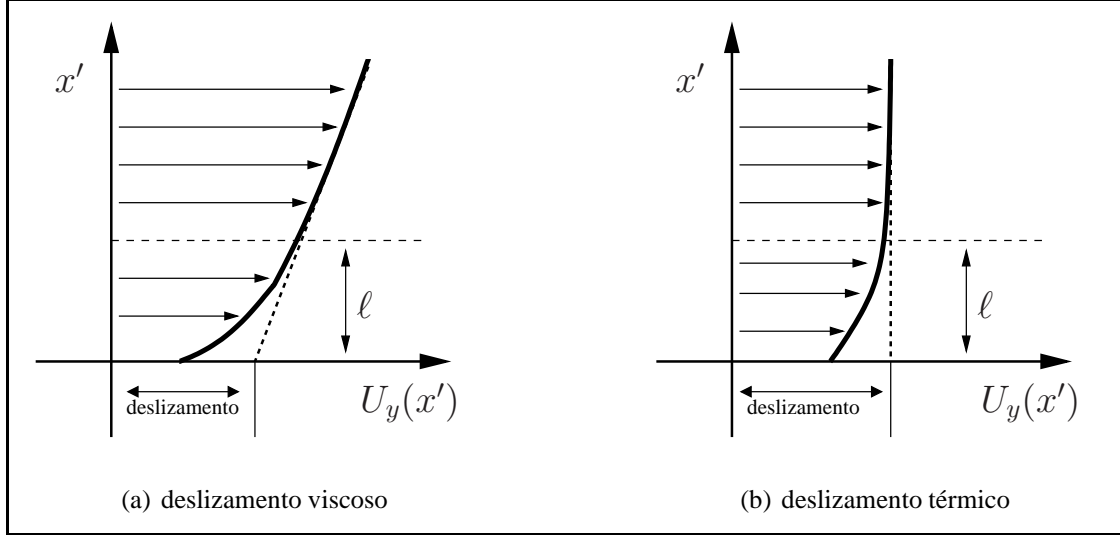


Figura 2.2: Deslizamento do gás na superfície sólida

para uma correção de deslizamento de primeira ordem no número de Knudsen. Portanto, para uma superfície sólida localizada em  $x' = 0$ , a condição de contorno de deslizamento do gás na interface é escrita da seguinte forma:

$$u'_t|_{x'_n=0} = u_w + \sigma_p \ell \frac{\partial u'_t}{\partial x'_n} + \sigma_T \ell v_m \frac{\partial \ln T}{\partial x'_t}, \quad (2.22)$$

onde  $\ell$  e  $v_m$  são, respectivamente, o livre caminho equivalente e a velocidade mais provável das partículas de gás, cujas definições são dadas em (2.2).  $u_w$  denota a velocidade da parede,  $u'_t$  denota a velocidade tangencial do gás,  $x'_n$  e  $x'_t$  são as coordenadas normal e tangencial à superfície sólida na direção parede  $\rightarrow$  gás,  $\mu$  é a viscosidade do gás,  $P_0$ ,  $T_0$  e  $\rho_0$  são, respectivamente, a pressão, temperatura e densidade de massa do gás no estado de equilíbrio. Os coeficientes de deslizamento viscoso  $\sigma_p$  e térmico  $\sigma_T$  dependem do potencial de interação intermolecular e, de acordo com [12], os valores mais recomendados para essas quantidades no caso de espalhamento difuso das partículas gasosas na superfície sólida são  $\sigma_p = 1,018$  e  $\sigma_T = 1,175$ . Detalhes sobre o cálculo desses coeficientes podem ser encontrados nas Refs. [34–37]. Para o caso de misturas de gases rarefeitos ainda existe uma contribuição do gradiente de concentração na condição de contorno (2.22) e, neste caso, maiores detalhes podem ser encontrados nas Refs. [38–40].

O fenômeno de salto de temperatura ocorre quando existe um gradiente de temperatura normal à superfície sólida e, nessa situação, a condição de contorno para a temperatura é escrita da seguinte forma:

$$T|_{x'_n=0} = T_w + \zeta_T \ell \frac{\partial T}{\partial x'_n}, \quad (2.23)$$

onde  $T_w$  denota a temperatura da parede e  $\zeta_T$  é o coeficiente de salto de temperatura do gás que, similarmente aos coeficientes de deslizamento, também depende do potencial de interação intermolecular. De acordo com [12], o valor mais recomendado para esse coeficiente no caso de espalhamento difuso das partículas gasosas na superfície sólida é  $\zeta_T = 1,974$ . Detalhes sobre o cálculo desse coeficiente pode ser encontrado nas Refs. [36,41].

## 2.3 Teoria clássica de propagação do som em gases

Ondas de som, ou ondas de pressão, são devidas aos efeitos de compressibilidade e expansão num gás. Desse modo, qualquer corpo material imerso num gás pode produzir ondas sonoras quando executa um movimento de oscilação já que o gás ao redor do corpo sofre simultâneos efeitos de compressão e expansão que tendem a se propagar e, conseqüentemente, perturbar o estado de equilíbrio do gás. A teoria clássica de propagação do som em gases [24–26, 42] tem por base a Mecânica dos Meios Contínuos, ou seja, todas as características macroscópicas do gás tais como densidade, temperatura, velocidade, etc, são obtidas via equações de Navier-Stokes. Além disso, a teoria clássica assume que os desvios das macrocaracterísticas do gás dos seus respectivos valores no estado de equilíbrio são funções harmônicas no espaço e no tempo. Desse modo, quando uma onda de som se propaga num gás, a densidade  $\varrho$ , velocidade hidrodinâmica  $\mathbf{u}$  e temperatura  $T$  do gás são escritas da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} \varrho \\ \mathbf{u} \\ T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varrho_0 \\ 0 \\ T_0 \end{bmatrix} + \Re \left\{ \begin{bmatrix} \bar{\varrho} \\ \bar{\mathbf{u}} \\ \bar{T} \end{bmatrix} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t')} \right\}, \quad |\bar{\varrho}| \ll \varrho_0, \quad |\bar{T}| \ll T_0, \quad |\bar{\mathbf{u}}| \ll 1, \quad (2.24)$$

onde  $\varrho_0$  e  $T_0$  correspondem ao valores da densidade e temperatura do gás no estado de equilíbrio.  $\Re$  denota a parte real de uma quantidade complexa e  $i = \sqrt{-1}$  é a unidade imaginária. As quantidades  $\bar{\varrho}$  e  $\bar{T}$  são as amplitudes dos desvios de densidade e temperatura do gás e a quantidade  $\bar{\mathbf{u}}$  é a amplitude da velocidade do gás.  $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{j}}$  é o vetor de onda, cuja direção  $\hat{\mathbf{j}}$  corresponde à direção de propagação da onda, o qual é uma quantidade complexa cujo módulo é dado por:

$$k = \frac{\omega}{v_{ph}} + i\alpha, \quad (2.25)$$

onde  $v_{ph}$  é a velocidade de fase do som no gás e  $\alpha$  é o coeficiente de atenuação do som no gás. Portanto, para uma onda de som se propagando na direção  $x'$ , as equações de Navier-Stokes podem ser linearizadas já que as amplitudes dos desvios são muito pequenas. Assim, ao considerarmos a propagação do som num gás monoatômico, das equações (2.13)-(2.16) o seguinte conjunto de equações, escrito na forma matricial, é obtido:

$$\begin{bmatrix} \omega & -\varrho_0 k & 0 \\ -\frac{k_B}{m} T_0 k & \varrho_0 \omega - \frac{4}{3} i \mu k^2 & -\frac{k_B}{m} \varrho_0 k \\ 0 & -i \frac{k_B}{m} \varrho_0 T_0 k & \frac{3}{2} i \frac{k_B}{m} \varrho_0 \omega + \frac{4}{15} \frac{k_B}{m} \mu k^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\varrho} \\ \bar{\mathbf{u}} \\ \bar{T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.26)$$

O sistema de equações (2.26) possui solução não trivial quando o determinante da matriz dos coeficientes das amplitudes é nulo, i.e.

$$\begin{vmatrix} \omega & -\varrho_0 k & 0 \\ -\frac{k_B}{m} T_0 k & \varrho_0 \omega - \frac{4}{3} i \mu k^2 & -\frac{k_B}{m} \varrho_0 k \\ 0 & -i \frac{k_B}{m} \varrho_0 T_0 k & \frac{3}{2} i \frac{k_B}{m} \varrho_0 \omega + \frac{4}{15} \frac{k_B}{m} \mu k^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (2.27)$$

Nas situações em que os efeitos de viscosidade e condutividade térmica podem ser desprezados, a condição (2.27) é satisfeita quando

$$k = \frac{\omega}{c_0}, \quad (2.28)$$

ou seja, o som se propaga no gás monoatômico com velocidade  $c_0$  correspondendo à velocidade adiabática do som no gás e não há atenuação. Caso contrário, i.e. quando os efeitos de viscosidade e condutividade térmica não podem ser desprezados, a condição (2.27) é satisfeita quando

$$k = \frac{\omega}{c_0} \left( 1 + \frac{7}{6} i \frac{\omega \mu}{\rho_0 c_0^2} \right), \quad (2.29)$$

que mostra que nessa situação a velocidade do som no gás monoatômico continua sendo igual a  $c_0$  mas há atenuação, ou seja, a amplitude da perturbação decai exponencialmente na distância  $x$  com  $e^{-\alpha x}$ , onde  $\alpha = 7\omega^2 \mu / (6\rho_0 c_0^3)$  é o coeficiente de atenuação.

De acordo com os resultados previstos pela teoria clássica de propagação do som em gases, quando uma placa infinita em contato com um gás monoatômico no espaço semi-infinito  $x' > 0$  oscila periodicamente na direção  $x'$ , normal ao seu próprio plano, com velocidade  $U_w = U_m \cos(\omega t')$ , após o sistema atingir um estado totalmente desenvolvido, a densidade, velocidade e temperatura do gás são dados pelas seguintes expressões:

$$\rho(t', x') = \rho_0 \left[ 1 + \Re \left( \frac{k}{\omega} U_m e^{i(kx' - \omega t')} \right) \right], \quad (2.30)$$

$$u(t', x') = \Re(U_m e^{i(kx' - \omega t')}), \quad (2.31)$$

$$T(t', x') = T_0 \left\{ 1 + \Re \left[ \left( \frac{k}{\omega} + \frac{\omega \rho_0}{k P_0} - \frac{4}{3} i \frac{k \mu}{P_0} \right) U_m e^{i(kx' - \omega t')} \right] \right\}, \quad (2.32)$$

onde as amplitudes dos desvios de densidade e temperatura são obtidas via (2.26).

Porém, como será visto adiante, os resultados (2.30)-(2.32) são válidos somente distante da fonte sonora, ou seja, distante da placa oscilatória. Nas proximidades da placa oscilatória os resultados baseados na hipótese de onda harmônica no espaço não são válidos. Isso se deve ao fato de que distante da fonte sonora existe invariância translacional, ou seja, o vetor de onda é independente da posição espacial. Por outro lado, nas proximidades da fonte sonora essa invariância translacional é quebrada de modo o vetor de onda depende da posição espacial e, portanto, a solução de onda plana harmônica perde sua validade nessa região.

## 2.4 Função de distribuição das velocidades moleculares e equação de Boltzmann

Na teoria cinética dos gases, um gás é descrito em termos de uma função de distribuição  $f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v})$  que contém informação sobre a distribuição espacial e de velocidades das partículas

gasosas num determinado instante de tempo. Essa função de distribuição é definida de forma que a quantidade

$$f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{r}' d\mathbf{v}$$

representa o número de partículas gasosas que num instante de tempo  $t'$  estão localizadas num elemento de volume entre  $\mathbf{r}'$  e  $\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'$  e cujas velocidades estão no intervalo entre  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ . Desse modo, utilizando conceitos estatísticos, as características macroscópicas do gás (densidade, velocidade, temperatura, etc) são determinadas via função de distribuição através das seguintes expressões:

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

$$n(t', \mathbf{r}') = \int f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad (2.33)$$

- (ii) Velocidade hidrodinâmica

$$\mathbf{U}(t', \mathbf{r}') = \frac{1}{n} \int \mathbf{v} f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad (2.34)$$

- (iii) Componentes do tensor pressão

$$P_{ij}(t', \mathbf{r}') = m \int \mathbf{V}_i \mathbf{V}_j f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad (2.35)$$

onde

$$\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{U},$$

é chamada de velocidade peculiar.

Fisicamente,  $P_{ij}$  representa a força por unidade de área na direção  $i$  exercida numa superfície perpendicular à direção  $j$ . As componentes diagonais ( $i = j$ ) do tensor pressão são pressões normais enquanto que as componentes não-diagonais ( $i \neq j$ ) são tensões de cisalhamento.

O deviante do tensor pressão, denotado por  $P_{\langle ij \rangle}$ , é definido como o tensor de traço nulo dado por

$$P_{\langle ij \rangle} = P_{ij} - \frac{1}{3} P_{rr} \delta_{ij}, \quad (2.36)$$

onde  $P_{rr}$  é o traço do tensor pressão e  $\delta_{ij}$  é o símbolo de Kronecker.

- (iv) Pressão

$$P(t', \mathbf{r}') = \frac{m}{3} \int V^2 f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}. \quad (2.37)$$

Note que a pressão do gás corresponde a 1/3 do traço do tensor pressão, ou seja,

$$P(t', \mathbf{r}') = \frac{1}{3} P_{rr}.$$

(v) Temperatura

$$T(t', \mathbf{r}') = \frac{m}{3nk_B} \int V^2 f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad (2.38)$$

(vi) Vetor fluxo de calor

$$\mathbf{Q}(t', \mathbf{r}') = \frac{m}{2} \int V^2 \mathbf{V} f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) d\mathbf{v}. \quad (2.39)$$

As componentes do vetor fluxo de calor representam a taxa de fluxo de energia cinética através de um elemento de área.

A função de distribuição  $f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v})$  satisfaz à equação de Boltzmann que, na ausência de forças externas, pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t'} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}'} = Q(ff^*), \quad (2.40)$$

onde

$$Q(ff^*) = \int w(\mathbf{v}, \mathbf{v}_*; \mathbf{v}', \mathbf{v}'_*) (f'f'_* - ff_*) d\mathbf{v}' d\mathbf{v}'_* d\mathbf{v}_* \quad (2.41)$$

é chamado de integral das colisões moleculares. Na presente notação  $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_*)$  denota velocidades pré-colisionais e  $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_*)$  as velocidades pós-colisionais de duas partículas gasosas. A quantidade  $w(\mathbf{v}, \mathbf{v}_*; \mathbf{v}', \mathbf{v}'_*)$  é a densidade de probabilidade de duas partículas com velocidades pré-colisionais  $\mathbf{v}'$  e  $\mathbf{v}'_*$  terem velocidades pós-colisionais  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{v}_*$  após um colisão binária. Essa densidade de probabilidade depende do potencial de interação intermolecular e deve satisfazer duas condições:

(i) Condição de normalização

$$\int \int w(\mathbf{v}, \mathbf{v}_*; \mathbf{v}', \mathbf{v}'_*) d\mathbf{v} d\mathbf{v}_* = 1; \quad (2.42)$$

(ii) Condição de reversibilidade no processo de colisão

$$w(\mathbf{v}, \mathbf{v}_*; \mathbf{v}', \mathbf{v}'_*) = w(-\mathbf{v}', -\mathbf{v}'_*; -\mathbf{v}, -\mathbf{v}_*). \quad (2.43)$$

A integral de colisões  $Q(ff^*)$  dada em (2.41) pode ser representada da seguinte forma:

$$Q(ff^*) = \mathcal{G} - \mathcal{L}, \quad (2.44)$$

onde  $\mathcal{L}$  e  $\mathcal{G}$  denotam termos de perda (Loss) e ganho (Gain) tal que  $\mathcal{L} d\mathbf{r}' d\mathbf{v}$  representa o número de partículas no elemento de volume entre  $\mathbf{r}'$  e  $\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'$  e com velocidades entre  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$  que, após um intervalo de tempo  $\Delta t'$ , mudam seus intervalos de posição e velocidade devido as colisões com outras partículas. Ao contrário,  $\mathcal{G} d\mathbf{r}' d\mathbf{v}$  representa o número de partículas que, devido à colisões sofridas no intervalo de tempo  $\Delta t'$ , passam a ocupar o elemento de volume entre  $\mathbf{r}'$  e  $\mathbf{r}' + d\mathbf{r}'$  e ter velocidades no intervalo entre  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ . Na ausência de colisões entre as partículas gasosas os

termos de ganho e perda são nulos e, conseqüentemente, a equação de Boltzmann (2.40) se reduz a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial f}{\partial t'} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}'} = 0. \quad (2.45)$$

A integral das colisões moleculares (2.41) satisfaz as seguintes condições:

- (i) Condição associada às leis de conservação de massa, momento e energia nas colisões intermoleculares

$$\int \psi(\mathbf{v}) Q(ff_*) d\mathbf{v} = 0, \quad (2.46)$$

onde  $\psi(\mathbf{v})$  é um invariante de colisão que pode assumir os valores

$$\psi = m, \quad \psi = m\mathbf{v}, \quad \psi = \frac{1}{2}mv^2.$$

- (ii) Teorema H de Boltzmann

$$\int Q(ff_*) \ln f d\mathbf{v} \leq 0 \quad (2.47)$$

que garante a validade da segunda lei da termodinâmica.

Como mencionado no Capítulo 1, resolver a equação de Boltzmann na forma exata ainda é uma tarefa extremamente difícil devido à presença da integral de colisões  $Q(ff_*)$ . Muito esforço tem sido feito ao longo dos anos na tentativa de encontrar uma solução analítica para a equação de Boltzmann que seja válida para uma determinada classe de problemas. Porém, essa ainda é uma questão em aberto e, justamente por esse motivo, a equação de Boltzmann exerce um grande fascínio em muitos matemáticos que tentam provar a existência e unicidade de uma solução para esta equação que seja válida para um determinado tipo de problema.

Os métodos de análise da equação de Boltzmann mais conhecidos e utilizados são os métodos de Chapman-Enskog [7] e o método de Grad [43]. O método de Chapman-Enskog consiste em expandir a função de distribuição de velocidades numa série perturbativa, ou seja,

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots, \quad (2.48)$$

onde  $\epsilon$  é um parâmetro pequeno que, dependendo do problema, pode ser o número de Knudsen. O primeiro termo da representação (2.48) corresponde à função Maxwelliana de equilíbrio local, i.e.

$$f^{(0)} = f_{loc}^M = n(t', \mathbf{r}) \left[ \frac{m}{2\pi k_B T(t', \mathbf{r}')} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m}{2k_B T(t', \mathbf{r}')} [\mathbf{v} - \mathbf{U}(t', \mathbf{r}')]^2 \right\}, \quad (2.49)$$

na qual  $n$ ,  $T$  e  $\mathbf{U}$  denotam os valores locais da densidade de número de partículas gasosas, temperatura e velocidade hidrodinâmica do gás, e os termos de ordem superior são obtidos via substituição da representação (2.48) na equação de Boltzmann. A aproximação  $f^{(1)}$  fornece a lei de Newton



para o movimento do fluido viscoso e a lei de Fourier para a condução de calor, as quais são escritas, respectivamente, da seguinte forma:

$$P_{ij} = P\delta_{ij} - \sigma'_{ij}, \quad (2.50)$$

$$\mathbf{Q} = -\kappa\nabla T, \quad (2.51)$$

onde  $\sigma'_{ij}$  é o tensor das tensões de cisalhamento dado em (2.18).

O método dos momentos de Grad consiste em expandir a função de distribuição numa série de polinômios de Hermite, i.e.

$$f = f_{loc}^M \left[ a^{(0)} H^{(0)} + a^{(1)} H^{(1)} + \dots + \frac{1}{N!} a^{(N)} H^{(N)} \right], \quad (2.52)$$

onde os coeficientes  $a^{(N)}$  são expressos em termos dos  $N$  momentos da função de distribuição e  $H^{(N)}$  denotam os polinômios ortogonais de Hermite. Numa teoria de 13 campos (densidade de massa  $\rho$ , velocidade hidrodinâmica  $\mathbf{U}$ , tensor pressão  $P_{ij}$  e vetor fluxo de calor  $\mathbf{Q}$ ), a função de distribuição de Grad (2.52) é dada por:

$$f = f^M \left\{ 1 + \frac{1}{2\rho} \left( \frac{m}{k_B T} \right)^2 \left[ P_{\langle ij \rangle} V_i V_j + 2Q_i V_i \left( \frac{mV^2}{5k_B T} - 1 \right) \right] \right\}, \quad (2.53)$$

onde  $P_{\langle ij \rangle}$  denota o deviante do tensor pressão, ou seja,

$$P_{\langle ij \rangle} = P_{ij} - \frac{1}{3} P \delta_{ij}. \quad (2.54)$$

Apesar de serem muito utilizados, esses dois métodos fornecem resultados aproximados que são válidos somente num determinado intervalo de número de Knudsen correspondendo ao regime hidrodinâmico e regimes muito próximos ao hidrodinâmico. De acordo com Sharipov [44], mesmo no regime hidrodinâmico existem alguns fenômenos que não são descritos de forma correta através do uso desses métodos.

Métodos numéricos para a equação de Boltzmann linearizada têm sido desenvolvidos por muitos pesquisadores mas a maioria desses métodos utilizam algum tipo de aproximação, e.g. [45], e se restringem à solução de problemas com geometria simples, como por exemplo fluxo de Poiseuille e Couette, e ao potencial de interação de esferas-rígidas. Em 1989 um grupo de pesquisadores da Universidade de Kyoto, no Japão, desenvolveu um método numérico para resolver a equação de Boltzmann na forma linearizada no qual nenhum tipo de aproximação é utilizada, e.g. [35, 46, 47]. Porém, novamente os problemas se restringem a geometrias simples e potencial de interação de esferas-rígidas. Além disso, o método é tão complexo que, mesmo com o avanço computacional dos dias atuais, utilizar o método ainda é inviável do ponto de vista computacional.

Portanto, devido à dificuldade em trabalhar com a equação de Boltzmann na forma exata, os modelos cinéticos que visam simplificar a equação de Boltzmann mantendo suas propriedades fundamentais (conservação de massa, momento e energia, e teorema H de Boltzmann), e que começaram a ser desenvolvidos em 1954 por Bhatnagar, Gross e Krook [16] e por Welander [48],

ainda são muito utilizados. Quando a equação de Boltzmann é simplificada via uso de um modelo cinético, a equação passa a ser chamada de equação modelo ou equação cinética. Os modelos mais utilizados para um único gás são os modelos propostos por Bhatnagar, Gross e Krook [16], o qual é comumente chamado de modelo BGK, e o modelo proposto por Shakhov [17, 49].

No modelo BGK a integral das colisões é representada da seguinte forma:

$$Q_{\text{BGK}}(ff_*) = \nu[f_{loc}^M(n, T, \mathbf{U}) - f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v})], \quad (2.55)$$

onde  $f_{loc}^M$  é a função Maxwelliana de equilíbrio local cuja expressão é dada em (2.49). A densidade de número  $n(t', \mathbf{r}')$ , a velocidade hidrodinâmica  $\mathbf{U}(t', \mathbf{r}')$  e a temperatura  $T(t', \mathbf{r}')$  do gás são calculadas via função de distribuição  $f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v})$  através das definições dadas em (2.33), (2.34) e (2.38). A quantidade  $\nu = P/\mu$  é a frequência das colisões moleculares.

O modelo BGK satisfaz as condições dadas em (2.46) e (2.47) mas não fornece corretamente o número de Prandtl,  $Pr$ , definido como

$$Pr = c_p \frac{\mu}{\kappa} \quad (2.56)$$

onde  $\mu$  e  $\kappa$  são, respectivamente, os coeficientes de viscosidade e condutividade térmica do gás e  $c_p$  é o calor específico à pressão constante. Portanto, o modelo BGK não fornece simultaneamente os valores corretos para os coeficientes de viscosidade e condutividade térmica do gás. Consequentemente, o modelo é adequado somente para ser usado em processos isotérmicos e quando os processos de transferência de calor podem ser desprezados.

No modelo proposto por Shakhov a integral das colisões é escrita como:

$$Q_s(ff_*) = \frac{P}{\mu} \left\{ f_{loc}^M \left[ 1 + \frac{2m}{15n(k_B T)^2} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{V} \left( \frac{mV^2}{2k_B T} - \frac{5}{2} \right) \right] - f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) \right\}, \quad (2.57)$$

onde  $\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$  denota a chamada velocidade peculiar do gás e a função Maxwelliana local  $f_{loc}^M$  é dada em (2.49).

O modelo de Shakhov consiste numa generalização do modelo BGK e fornece corretamente o número de Prandtl. Esse modelo satisfaz a condição (2.46) mas a condição (2.47) só é satisfeita pelo modelo na forma linearizada. Portanto, o ponto negativo do modelo de Shakhov é que este só pode ser utilizado para processos próximos ao estado de equilíbrio.

## 2.4.1 Misturas gasosas

Para uma mistura de  $N$  gases, a função de distribuição das velocidades moleculares de cada espécie satisfaz a equação de Boltzmann, que na ausência de forças externas, é escrita como:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t'} + \mathbf{v}_\alpha \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{r}'} = \sum_{\beta=1}^N Q(f_\alpha f_\beta), \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (2.58)$$

onde  $f_\alpha(t', \mathbf{r}', \mathbf{v})$  é a função de distribuição do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura e a integral de colisões  $Q(f_\alpha f_\beta)$  é dada por:

$$Q(f_\alpha f_\beta) = \int \int \int w(\mathbf{v}_\alpha, \mathbf{v}_\beta; \mathbf{v}'_\alpha, \mathbf{v}'_\beta) (f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta) d\mathbf{v}'_\alpha d\mathbf{v}'_\beta d\mathbf{v}_\beta. \quad (2.59)$$

Na presente notação,  $(\mathbf{v}'_\alpha, \mathbf{v}'_\beta)$  denota as velocidades pré-colisionais e  $(\mathbf{v}_\alpha, \mathbf{v}_\beta)$  as velocidades pós-colisionais de duas partículas gasosas de mesma espécie ( $\alpha = \beta$ ) ou espécies diferentes ( $\alpha \neq \beta$ ). A quantidade  $w(\mathbf{v}_\alpha, \mathbf{v}_\beta; \mathbf{v}'_\alpha, \mathbf{v}'_\beta)$  é a densidade de probabilidade de duas partículas com velocidades pré-colisionais  $\mathbf{v}'_\alpha$  e  $\mathbf{v}'_\beta$  terem velocidades pós-colisionais  $\mathbf{v}_\alpha$  e  $\mathbf{v}_\beta$  após uma colisão binária entre duas partículas. Essa densidade de probabilidade depende do potencial de interação intermolecular e satisfaz as seguintes condições:

(i) Condição de normalização:

$$\int \int w(\mathbf{v}_\alpha, \mathbf{v}_\beta; \mathbf{v}'_\alpha, \mathbf{v}'_\beta) d\mathbf{v}_\alpha d\mathbf{v}_\beta = 1; \quad (2.60)$$

(ii) Condição de reversibilidade no processo de colisão

$$w(\mathbf{v}_\alpha, \mathbf{v}_\beta; \mathbf{v}'_\alpha, \mathbf{v}'_\beta) = w(-\mathbf{v}'_\alpha, -\mathbf{v}'_\beta; -\mathbf{v}_\alpha, -\mathbf{v}_\beta). \quad (2.61)$$

A integral de colisões também satisfaz as seguintes condições:

(i) Conservação de massa, momento e energia nas colisões entre as partículas gasosas

$$\int \psi_\alpha(\mathbf{v}) Q(f_\alpha f_\beta) d\mathbf{v}_\alpha = 0, \quad (2.62)$$

onde  $\phi_\alpha(\mathbf{v})$  é um invariante de colisão que pode assumir os valores

$$\psi_\alpha = m_\alpha, \quad \psi_\alpha = m_\alpha \mathbf{v}_\alpha, \quad \psi_\alpha = \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2. \quad (2.63)$$

(ii) Teorema H de Boltzmann que garante a validade da segunda lei da termodinâmica

$$\sum_{\alpha, \beta} \int \ln f_\alpha Q(f_\alpha f_\beta) d\mathbf{v}_\alpha \leq 0. \quad (2.64)$$

As características macroscópicas da mistura são obtidas via função de distribuição da seguinte forma:

(i) Densidade de número de partículas

$$n(t', \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N n_\alpha(t', \mathbf{r}'), \quad (2.65)$$

onde

$$n_\alpha(t', \mathbf{r}') = \int f_\alpha(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha \quad (2.66)$$

é a densidade de número da espécie  $\alpha$ .

(ii) Velocidade hidrodinâmica

$$\mathbf{u}(t', \mathbf{r}') = \frac{1}{\varrho} \sum_{\alpha=1}^N \varrho_{\alpha} \mathbf{u}_{\alpha}(t', \mathbf{r}'), \quad (2.67)$$

onde

$$\varrho = \sum_{\alpha=1}^N \varrho_{\alpha}, \quad \varrho_{\alpha} = n_{\alpha} m_{\alpha}, \quad (2.68)$$

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

$$\mathbf{u}_{\alpha}(t', \mathbf{r}') = \frac{1}{n_{\alpha}} \int \mathbf{v}_{\alpha} f_{\alpha}(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha}, \quad (2.69)$$

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

(iii) Componentes do tensor pressão

$$P_{ij}(t', \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \int V_{\alpha i} V_{\alpha j} f_{\alpha}(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha}, \quad (2.70)$$

onde

$$\mathbf{V}_{\alpha} = \mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{u}' \quad (2.71)$$

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

(iv) Vetor fluxo de calor

$$\mathbf{q}(t', \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N \frac{m_{\alpha}}{2} \int V_{\alpha}^2 \mathbf{V}_{\alpha} f_{\alpha}(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha}. \quad (2.72)$$

(v) Pressão

$$P(t', \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N \frac{m_{\alpha}}{3} \int V_{\alpha}^2 f_{\alpha}(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha}. \quad (2.73)$$

(vi) Temperatura

$$T(t', \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N \frac{m_{\alpha}}{3nk_B} \int V_{\alpha}^2 f_{\alpha}(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha}. \quad (2.74)$$

Do mesmo modo que para gás único, devido à dificuldade em resolver a equação de Boltzmann na forma exata, faz-se uso de modelos cinéticos que visam simplificar a integral de colisões (2.59) mantendo suas propriedades fundamentais (2.62) e (2.64). Entre os modelos para misturas gasosas, e.g. [18, 50–53], o mais apropriado é o modelo proposto por McCormack [18] pois este mantém as propriedades da integral de colisões original e fornece corretamente todos os coeficientes de transporte (viscosidade, condutividade térmica, difusão e termo-difusão) da mistura. A integral de colisões de McCormack é dada no Apêndice C. Os demais modelos possuem algum tipo de restrição de uso pois não fornecem corretamente todos os coeficientes de transporte da mistura.

## 2.5 Interação gás-superfície

O estudo da interação gás-superfície é de grande importância em Dinâmica de Gases Rarefeitos pois permite a especificação das condições de contorno nas superfícies sólidas que delimitam o fluxo gasoso. De acordo com a Figura 2.3, quando uma partícula gasosa com velocidade  $\mathbf{v}'$  atinge uma superfície sólida é reemitida da superfície com velocidade  $\mathbf{v}$ . É impossível calcular essa velocidade de reflexão já que esta depende de muitos detalhes tais como a localização e a velocidade das moléculas que constituem a superfície sólida, etc. Entretanto, é possível calcular

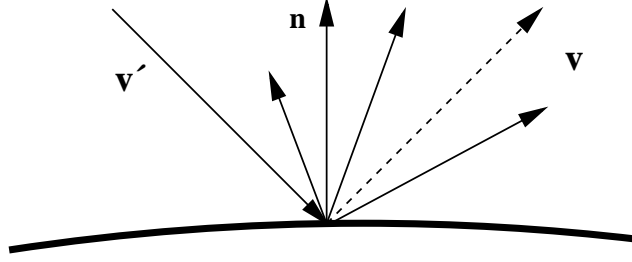


Figura 2.3: Interação gás-superfície

a densidade de probabilidade de que uma partícula gasosa que chega à parede com velocidade  $\mathbf{v}'$  deixe a parede praticamente no mesmo ponto com velocidade entre  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ . Essa densidade de probabilidade, denotada por  $\mathcal{R}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$ , é chamada de núcleo de espalhamento e expressa o tipo de interação que ocorre entre o gás e a superfície que o delimita. O núcleo de espalhamento depende da espécie gasosa em estudo, da composição química e da temperatura da superfície sólida, etc, e é uma quantidade sempre positiva que satisfaz as seguintes condições:

(i) Condição de normalização

$$\int_{v_n > 0} \mathcal{R}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1; \quad (2.75)$$

(ii) Relação de reciprocidade

$$|v'_n| \exp\left(-\frac{mv'^2}{2k_B T_w}\right) \mathcal{R}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = |v_n| \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T_w}\right) \mathcal{R}(-\mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}'), \quad (v_n > 0, v'_n < 0), \quad (2.76)$$

onde  $T_w$  denota a temperatura da superfície sólida.

A prova da relação de reciprocidade (2.76) é apresentada por Cercignani na Ref. [1].

De acordo com a Ref. [1], a condição de contorno na superfície sólida que delimita o gás é dada pela seguinte relação entre as funções de distribuição das partículas gasosas que incidem na parede,  $f^-$ , e das que deixam a parede,  $f^+$ :

$$|v_n| f^+(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) = \int_{v'_n < 0} |v'_n| \mathcal{R}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) f^-(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}') d\mathbf{v}', \quad v_n \geq 0. \quad (2.77)$$

Na prática, o conceito de coeficiente de acomodação, denotado aqui por  $\alpha(\varphi)$ , é frequentemente utilizado. Esse coeficiente é definido da seguinte forma:

$$\alpha(\varphi) = \frac{J^-(\varphi) - J^+(\varphi)}{J^-(\varphi) - J_{dif}^+(\varphi)}, \quad J^\pm(\varphi) = \int_{v_n > 0} |v_n| f(\mathbf{v}) \varphi(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad (2.78)$$

onde  $J^\pm(\varphi)$  representa o fluxo da quantidade  $\varphi$  para moléculas refletidas (+) e incidentes (-) na superfície sólida, e  $J_{dif}^+$  representa o fluxo da quantidade  $\varphi$  para moléculas refletidas difusamente. A função  $\varphi(\mathbf{v})$  é uma função arbitrária da velocidade molecular  $\mathbf{v}$ . Se  $\varphi = mv_t$ , onde  $v_t$  denota a componente tangencial da velocidade  $\mathbf{v}$ , o coeficiente  $\alpha(\varphi)$  tem o significado físico de coeficiente de acomodação de momentum tangencial. Se  $\varphi = mv_n$ , onde  $v_n$  denota a componente normal da velocidade  $\mathbf{v}$ , o coeficiente  $\alpha(\varphi)$  tem o significado físico de coeficiente de acomodação de momento normal. Se  $\varphi = mv^2/2$  o coeficiente  $\alpha(\varphi)$  tem o significado físico de coeficiente de acomodação de energia. A quantidade  $1 - \alpha(\varphi)$  corresponde à parte da quantidade  $\varphi(\mathbf{v})$  que é mantida pelas moléculas de gás após a colisão.

O tipo de interação gás-superfície mais conhecido e muito utilizado em cálculos práticos é a reflexão difusa e, neste caso, o núcleo de espalhamento é escrito do seguinte modo:

$$\mathcal{R}_d(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = \frac{m^2 v_n}{2\pi(k_B T_w)^2} \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T_w}\right), \quad (2.79)$$

onde  $T_w$  é a temperatura da superfície sólida. Fisicamente esse núcleo expressa que todas as partículas são refletidas com uma função de distribuição Maxwelliana que independe da função de distribuição das partículas incidentes, ou seja, a partícula refletida perde toda a informação sobre seu estado anterior à colisão com a superfície sólida. Esse tipo de interação gás-superfície também costuma ser chamada de espalhamento com acomodação perfeita já que, após substituir (2.76) e (2.79) em (2.78), o valor  $\alpha(\varphi) = 1$  é obtido para o coeficiente de acomodação para qualquer função  $\varphi(\mathbf{v})$ .

Apesar da reflexão difusa ser muito utilizada, existem situações nas quais os resultados teóricos obtidos através da consideração desse tipo de interação não concordam com os resultados experimentais. Essa discordância costuma ocorrer com gases leves como Hélio e Neônio, por exemplo. Nesse caso, para eliminar essa discrepância é mais conveniente utilizar o núcleo de espalhamento difuso-especular proposto por Maxwell, cuja expressão é dada por:

$$\mathcal{R}_{sd}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = \alpha \mathcal{R}_d + (1 - \alpha) \delta(\mathbf{v}' - \mathbf{v} + 2\mathbf{n}v_n). \quad (2.80)$$

Nesse núcleo  $\alpha$  corresponde à fração das partículas gasosas refletidas difusamente enquanto que  $1 - \alpha$  corresponde à fração de partículas refletidas especularmente. Porém, também existem situações nas quais o uso do núcleo de Maxwell falha, veja por exemplo as Refs. [54, 55], e tal falha se deve ao fato de que nesse núcleo os coeficientes de acomodação associados a cada função  $\varphi(\mathbf{v})$  são todos iguais à fração de partículas gasosas refletidas difusamente, enquanto que na prática as funções  $\varphi(\mathbf{v})$  estão associadas a coeficientes de acomodação diferentes entre si, ou seja, a interação do gás com a superfície sólida é extremamente complexa para ser descrita somente por um parâmetro.

O núcleo de espalhamento proposto por Cercignani e Lampis [56] fornece resultados mais coerentes com os experimentais pois são introduzidos dois coeficientes de acomodação: um coeficiente de acomodação para a quantidade de movimento tangencial,  $\alpha_t$ , e um coeficiente de acomodação para a energia cinética,  $\alpha_n$ . O núcleo de Cercignani-Lampis é escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\text{CL}}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = & \frac{m^2 v_n}{2\pi \alpha_n \alpha_t (2 - \alpha_t) (k_B T_w)^2} \exp \left\{ -\frac{m[v_n^2 + (1 - \alpha_n)v_n'^2]}{2k_B T_w \alpha_n} \right\} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{\alpha_t (2 - \alpha_t)} \frac{m[v_t - (1 - \alpha_t)v_t']^2}{2k_B T_w} \right\} \mathcal{J}_0 \left( \frac{\sqrt{1 - \alpha_n} m v_n v_n'}{\alpha_n k_B T_w} \right), \end{aligned} \quad (2.81)$$

onde  $v_t$  é a componente tangencial da velocidade  $\mathbf{v}$  e  $\mathcal{J}_0$  denota a função de Bessel de primeiro tipo e ordem zero definida como

$$\mathcal{J}_0(X) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(X \cos \phi) d\phi.$$

Após substituir o núcleo (2.81) em (2.78) e considerar que

$$\int_{v_n > 0} m v_t \mathcal{R}_{\text{CL}}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) d\mathbf{v} = (1 - \alpha_t) m v_t', \quad (2.82)$$

$$\int_{v_n > 0} \frac{m v_n^2}{2} \mathcal{R}_{\text{CL}}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) d\mathbf{v} = \alpha_n k_B T_w + (1 - \alpha_n) \frac{m v_n^2}{2}, \quad (2.83)$$

encontra-se que:

$$\alpha(\varphi) = \alpha_t, \quad \text{se } \varphi(\mathbf{v}) = m v_t, \quad (2.84)$$

$$\alpha(\varphi) = \alpha_n, \quad \text{se } \varphi(\mathbf{v}) = \frac{m v_n^2}{2}, \quad (2.85)$$

onde  $v_t$  denota uma componente tangencial do vetor  $\mathbf{v}_t = (v_{t1}, v_{t2})$ . Portanto,  $\alpha_t$  é um coeficiente de acomodação de momentum tangencial e  $\alpha_n$  é o coeficiente de acomodação de energia cinética associada à velocidade normal  $v_n$ .

O coeficiente de acomodação de momentum tangencial  $\alpha_t$  pode variar no intervalo  $[0, 2]$  enquanto que o coeficiente de acomodação de energia  $\alpha_n$  pode variar no intervalo  $[0, 1]$ . Quando  $\alpha_t = 0$  e  $\alpha_n = 0$  a reflexão é especular e, quando  $\alpha_t = 1$  e  $\alpha_n = 1$ , a reflexão é difusa. Se  $\alpha_t = 2$  e  $\alpha_n = 0$  a reflexão é para trás, ou seja, após a colisão com a parede  $\mathbf{v} = -\mathbf{v}'$ .

O núcleo proposto por Cercignani e Lampis não costuma ser muito utilizado devido à sua complexidade matemática. Entretanto, este núcleo é o único na literatura que fornece resultados mais coerentes com os experimentais e descreve a interação gás-superfície de uma forma física mais correta.

# Capítulo 3

## Revisão de Literatura

Historicamente, os primeiros estudos teóricos sobre propagação do som em gases nas situações em que a frequência das colisões moleculares e a frequência do som possuem a mesma ordem de grandeza se devem a Primakoff [57] e também a Tsien e Schamberg [58]. Naquela época o interesse por tal assunto estava associado em saber como a velocidade do som era modificada em condições de baixa pressão ou alta rarefação. De acordo com o método proposto por Chapman e Enskog [7], as equações hidrodinâmicas são obtidas através de uma aproximação de primeira ordem no parâmetro  $1/\theta$  para a função de distribuição, onde  $\theta$  é a razão entre as frequências das colisões moleculares e do som. Assim, com base nas equações de Navier-Stokes e na hipótese de que todas as variáveis são funções harmônicas no tempo e no espaço, as seguintes expressões para a velocidade e coeficiente de atenuação do som num gás monoatômico, denotados aqui por  $c$  e  $\alpha$ , são obtidas:

$$c(\omega) = c_0 \left( 1 + \frac{141}{72} \frac{\mu^2 \omega^2}{\varrho_0^2 c_0^4} \right), \quad \alpha = \frac{7}{6} \frac{\mu \omega^2}{\varrho_0 c_0^3}, \quad (3.1)$$

onde  $c_0$  denota a velocidade adiabática do som num gás monoatômico,  $\mu$  é o coeficiente de viscosidade do gás,  $m$  denota a massa atômica,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $\omega$  é a frequência do som e  $\varrho_0$  é a densidade do gás no estado de equilíbrio. O termo de dispersão da velocidade possui a ordem de grandeza de  $1/\theta^2$ , ou seja,

$$\frac{\mu^2 \omega^2}{\varrho_0^2 c_0^4} \sim \frac{1}{\theta^2}. \quad (3.2)$$

Primakoff [57] e também Tsien e Schamberg [58] utilizaram uma correção de segunda ordem em  $1/\theta$  para as equações hidrodinâmicas justamente visando verificar se esses termos de segunda ordem eram significativos à medida que a frequência do som se aproximava da frequência das colisões moleculares. Assim, esses pesquisadores utilizaram as expressões de segunda ordem no parâmetro  $1/\theta$ , previamente encontradas por Chapman e Enskog e por Burnett, para o vetor fluxo de calor e tensor pressão e, com base nas equações de balanço de massa, momento e energia e também na hipótese de que todas as variáveis são funções harmônicas no tempo e no espaço eles obtiveram as seguintes expressões para a velocidade e atenuação do som num gás monoatômico



com hipótese de potencial de interação Maxwelliano<sup>1</sup>:

$$c(\omega) = c_0 \left[ 1 + \frac{103}{288} \frac{\mu^2 \omega^2}{\rho_0^2 c_0^4} \right], \quad \alpha = \frac{7}{6} \frac{\mu \omega^2}{\rho_0 c_0^3}, \quad (3.3)$$

De acordo com os resultados desses pesquisadores, os termos originados da aproximação de segunda ordem contribuem para a velocidade do som  $c$  mas não contribuem para a atenuação  $\alpha$ . Além disso, a contribuição do termo de dispersão é praticamente desprezível e, de acordo com Tsien e Schamberg [58], o desvio da velocidade de propagação do som em relação ao valor usual em condições de baixa rarefação não ultrapassa 2% para gás Hélio.

Em meados de 1948, Wang Chang e Uhlenbeck começaram a divulgar uma série de relatórios técnicos referentes ao estudo da propagação do som em gases mas somente em 1970 alguns desses relatórios foram publicados num dos volumes da série intitulada *Studies in Statistical Mechanics*. No primeiro relatório dessa série [59], Wang Chang e Unlenbeck apontaram um erro na expressão de segunda ordem obtida por Chapman e Enskog para o vetor fluxo de calor. Consequentemente, os resultados apresentados nas Refs. [57, 58] para a velocidade de propagação do som estavam incorretos já que tinham por base a expressão obtida por Chapman e Enskog para o vetor fluxo de calor. Wang Chang e Uhlenbeck [60] determinaram as expressões corretas para a velocidade de fase e coeficiente de atenuação do som e determinaram seus respectivos valores para gás Hélio. A expressão obtida por Wang Chang e Unlenbeck [60], com a respectiva correção para o fluxo de calor, é a seguinte:

$$c(\omega) = c_0 \left[ 1 + \frac{215}{72} \frac{\mu^2 \omega^2}{\rho_0^2 c_0^4} \right]. \quad (3.4)$$

Portanto, como pode ser visto das expressões (3.3) e (3.4), após a correção na expressão para o fluxo de calor, o termo de dispersão é em torno de 8 vezes maior que o obtido nas Refs. [57, 58]. Também é possível observar que o termo de dispersão em (3.4) é aproximadamente 50% maior que o respectivo termo de dispersão da expressão (3.1) obtido via equações de Navier-Stokes. Para potencial de interação de Lennard-Jones, Wang Chang e Uhlenbeck encontraram a seguinte expressão para a velocidade do som no gás Hélio:

$$c = c_0 \left[ 1 + \frac{230.9}{72} \frac{\mu^2 \omega^2}{\rho_0^2 c_0^4} \right], \quad (3.5)$$

que mostra a fraca influência do potencial de interação intermolecular na dispersão do som. Das expressões (3.1) e (3.5), os desvios na velocidade do som podem ser escritos da seguinte forma:

$$\frac{\Delta c}{c_0} = \begin{cases} 27, 2\mu^2 \left( \frac{f}{P} \right)^2 & \text{(aproximação de ordem } \theta^{-1}, \text{ Navier-Stokes),} \\ 44, 4\mu^2 \left( \frac{f}{P} \right)^2 & \text{(aproximação de ordem } \theta^{-2}, \text{ Burnett),} \end{cases} \quad (3.6)$$

---

<sup>1</sup>Detalhes sobre os potenciais de interação intermolecular comumente utilizados em teoria cinética do gases são apresentados no Apêndice D.

onde  $f$  é a frequência do som e  $P$  a pressão do gás. A Tabela 3.1, extraída da Ref. [60] e na qual a frequência  $f$  é dada em MHz e a pressão  $P$  em atm, mostra a comparação entre os desvios dados em (3.6) para gás Hélio à diferentes temperaturas.

Tabela 3.1: Dispersão do som: comparação das aproximações de primeira e segunda ordem no parâmetro  $1/\theta$ .

Temperatura $T$ (Kelvin)	$\Delta c/c_0$ em % Navier-Stokes	$\Delta c/c_0$ em % Burnett
203,4	$0,67 \times 10^{-4} (f/P)^2$	$1,10 \times 10^{-4} (f/P)^2$
305,1	1,14	1,86
406,8	1,66	2,71
508,5	2,21	3,61

Os dados da Tabela 3.1 mostram que a contribuição dos termos de segunda ordem em  $1/\theta$  não é tão pequena. Para  $f/P = 335$ , por exemplo, correspondendo a uma pressão de  $10^{-2}$  atm e frequência  $f = 3,35$  MHz, e temperatura  $T = 305,1$  K, o desvio  $\Delta c/c_0$  é igual a 20,8%. Portanto, já que numa aproximação de segunda ordem em  $1/\theta$  o desvio é grande, aproximações de ordem superior ainda tendem a contribuir para a dispersão do som no gás.

A partir de 1950, Martin Greenspan começou a publicar uma série de dados experimentais referentes à propagação do som em gases sob condições de baixa pressão nas quais o livre caminho médio molecular é muito maior que o comprimento da onda de som, e.g. [61, 62]. Ele obteve a velocidade de fase e o coeficiente de atenuação do som em vários gases utilizando um oscilador de cristal quartzo à uma frequência constante de 11 MHz. A atenuação foi obtida com base na variação logarítmica do sinal em função da distância entre a fonte e o receptor. A velocidade de fase do som foi obtida com base em medidas da diferença de fase do sinal em função da distância entre a fonte e o receptor, a qual corresponde à distância percorrida pela onda de som. Greenspan foi responsável por uma grande contribuição na área de acústica pois ele mostrou que as equações de Navier-Stokes e também a aproximação de Burnett fornecem resultados quantitativamente em concordância com os experimentais somente até um certo valor de frequência do som. A partir daí, visando descrever a propagação do som em condições de baixa pressão, estudos baseados na solução da equação de Boltzmann começaram a ser realizados.

Um dos primeiros estudos sobre propagação do som em gases com base na equação de Boltzmann, acredita-se que o primeiro trabalho mais relevante sobre o assunto, foi realizado por Wang Chang e Uhlenbeck [63]. Esse trabalho foi divulgado em 1952 como um relatório técnico mas foi publicado somente mais tarde na Ref. [63]. O estudo feito por esses pesquisadores tem por base o método de autofunções que consiste em expandir a solução da equação de Boltzmann linearizada nas proximidades do estado de equilíbrio local em termos de autofunções do operador das colisões moleculares, as quais dependem do potencial de interação intermolecular. A linearização da equação de Boltzmann é feita através da seguinte representação para a função de distribuição

$f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v})$  das velocidades moleculares:

$$f(t', \mathbf{r}', \mathbf{v}) = f_0[1 + h(t', \mathbf{r}', \mathbf{v})], \quad (3.7)$$

onde  $f_0$  denota a função de distribuição Maxwelliana,  $t'$  é o tempo,  $\mathbf{r}'$  e  $\mathbf{v}$  são, respectivamente, os vetores de posição e velocidade molecular e  $h$  é chamada de função de perturbação que corresponde à solução da equação de Boltzmann linearizada. Wang Chang e Uhlenbeck [63] determinaram as autofunções e autovalores do operador de colisões para moléculas Maxwellianas (neste caso as autofunções são polinômios de Sonine) e, considerando a propagação do som na direção  $z'$ , eles utilizaram a seguinte metodologia para obter a velocidade e o coeficiente de atenuação do som no gás:

- (i) Suposição de dependência harmônica da função de perturbação no tempo e no espaço, ou seja,

$$h(t', z', \mathbf{c}) = \tilde{h}(\mathbf{c}) \exp [i(\omega t' - kz')], \quad \mathbf{c} = \sqrt{\frac{m}{2k_B T}} \mathbf{v} \quad (3.8)$$

onde  $\omega$  é a frequência do som e  $k$  é uma quantidade complexa cuja parte real está associada à velocidade do som enquanto que a parte imaginária corresponde ao coeficiente de atenuação do som no gás.  $\mathbf{c}$  é a velocidade molecular adimensional.

- (ii) Expansão da função  $\tilde{h}(\mathbf{c})$  em autofunções  $\psi_{r,\ell}(\mathbf{c})$  do operador de colisões, ou seja,

$$\tilde{h}(\mathbf{c}) = \sum_{r,\ell=0}^{\infty} \alpha_{r,\ell} \psi_{r,\ell}(\mathbf{c}), \quad (3.9)$$

onde  $\alpha_{r,\ell}$  são coeficientes a determinar e  $\psi_{r,\ell}$  são autofunções do operador de colisões, previamente determinadas;

- (iii) Substituição das representações (3.8) e (3.9) na equação de Boltzmann linearizada de modo a obter o seguinte sistema de equações lineares:

$$i\omega\alpha_{r\ell} - i\sqrt{\frac{2k_B T}{m}}k \sum_{r',\ell'} M_{r\ell,r'\ell'} \alpha_{r'\ell'} = \mathcal{A}\alpha_{r\ell}\gamma_{r\ell}, \quad (3.10)$$

onde  $\mathcal{A}$  é uma constante e

$$M_{r\ell,r'\ell'} = \int c_z \psi_{r\ell} \psi_{r'\ell'} \exp(-c^2) d\mathbf{c}. \quad (3.11)$$

Assim, para cada autovalor  $\gamma$  existe um sistema de equações lineares para  $\alpha_{r\ell}$ . Esse sistema de equações possui solução quando o determinante da matriz dos coeficientes das incógnitas  $\alpha_{r\ell}$  é nulo. Dessa condição resulta uma relação entre  $\omega$  e  $k$ , ou seja, uma relação de dispersão cujas raízes fornecem a velocidade e atenuação do som no gás. A solução da relação de dispersão é obtida com base numa expansão de  $k$  em série de potências de  $1/\theta$ .

Na primeira aproximação de Wang Chang e Uhlenbeck, que corresponde ao primeiro autovalor do operador de colisões, a relação de dispersão obtida corresponde a um gás ideal, ou seja, o som se propaga no gás com velocidade  $c_0$  e não há atenuação. A segunda aproximação corresponde à aproximação de Burnett (3.4) no desenvolvimento de Chapman-Enskog e a terceira aproximação corresponde à aproximação de terceira ordem em  $1/\theta$  no desenvolvimento de Chapman-Enskog (chamada de super-Burnett).

Uma comparação dos resultados obtidos por Wang Chang e Uhlenbeck [63] com dados experimentais de Greenspan [61, 62] para gases nobres mostrou que a teoria proposta na Ref. [63] é válida somente nas proximidades do limite contínuo, ou seja, quando a frequência do som é muito menor que a frequência das colisões moleculares ( $\theta \rightarrow \infty$ ). Portanto, a teoria proposta por Wang Chang e Uhlenbeck [63] ainda não era satisfatória já que também não descrevia de forma correta a propagação do som em condições de baixas pressões.

Pekeris *et al.* [64] desenvolveram uma teoria semelhante à proposta por Wang Chang e Uhlenbeck [63] e, através de um procedimento numérico, os autores utilizaram 483 momentos na expansão da função de perturbação. Uma comparação dos resultados apresentados em [64] com os dados experimentais de Greenspan mostra, novamente, que a teoria não fornece resultados corretos à medida que a frequência do som aumenta. Além disso, a convergência da solução é duvidosa já que o número de momentos utilizados é extremamente grande.

Em todos esses trabalhos citados anteriormente, o problema de propagação do som foi tratado assumindo-se uma onda harmônica se propagando num meio infinito. Porém, visando reproduzir melhor a situação experimental, o problema começou a ser tratado como um problema de valor de contorno no qual uma placa oscilando na direção normal ao seu próprio plano é a fonte de ondas sonoras que se propagam no gás que preenche o espaço semi-infinito em contato com a placa. Utilizando essa nova configuração, estudos sobre propagação do som em gases rarefeitos com base em métodos analíticos de expansões polinomiais para a solução da equação de Boltzmann foram realizados por Kahn e Mintzer [65, 66], Toba [67], Hanson e Morse [68], etc. Nessas referências, visando obter resultados válidos para altas frequências do som, os autores consideraram dependência espacial para o vetor de onda. Porém, os resultados apresentados nessas referências também não estavam em concordância com resultados experimentais. Portanto, todas as tentativas de descrever a propagação do som com base em métodos de expansões da solução da equação de Boltzmann numa série de polinômios ortogonais não tiveram nenhum sucesso na tentativa de descrever a propagação do som em condições de baixas pressões.

O primeiro estudo sobre propagação do som em gases baseado em modelos cinéticos para a equação de Boltzmann foi publicado em 1965 por Sirovich e Thurber [69]. O modelo cinético proposto por Sirovich [50] foi utilizado, o qual prevê a existência de uma frequência crítica acima da qual as soluções não são de onda harmônica. Na verdade o modelo proposto por Sirovich [50] é uma generalização do modelo proposto por Gross e Jackson [70], válido somente para potencial de interação Maxwelliano. O estudo realizado por Sirovich e Thurber [69] consistiu em encontrar uma relação de dispersão válida para frequências do som maiores que a frequência crítica. Os resultados encontrados por esses pesquisadores mostraram uma melhor concordância

com os resultados experimentais de Greenspan [61] e também com os resultados experimentais de Meyer e Sessler [71], os quais concordam com os resultados de Greenspan [61] mas abrangem um intervalo maior de  $\theta$ .

Buckner e Ferziger [72] utilizaram o método de soluções elementares para resolver equação cinética de Gross e Jackson [70] e os resultados deles estão em boa concordância com os dados experimentais nos limites de alta e baixa frequências do som.

As Figuras 3.1 e 3.2, extraídas da Ref. [1], mostram uma comparação entre os resultados obtidos por Sirovich e Thurber [69] e por Buckner e Ferziger [72] com os dados experimentais obtidos por Greenspan [61] e por Meyer e Sessler [71] e também com os resultados obtidos através das equações de Navier-Stokes.

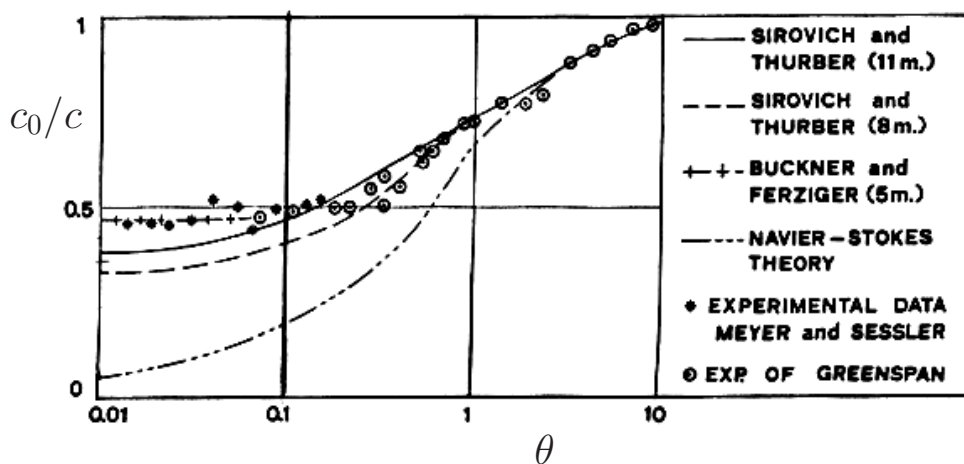


Figura 3.1: Figura extraída da Ref. [1]: Inverso da velocidade adimensional do som versus razão entre as frequências das colisões moleculares e do som.

Na Figura 3.1 o perfil do inverso da velocidade do som adimensional, i.e.  $c_0/c$ , é plotado em função do parâmetro  $\theta$  correspondendo à razão entre as frequências das colisões moleculares e do som. Já na Figura 3.2, o perfil apresentado é para o coeficiente de atenuação  $\alpha$  do som no gás. Note que em cada uma dessas figuras há dois resultados de Sirovich e Thurber [69]: o primeiro corresponde ao modelo de Gross e Jackson [70] obtido para potencial de interação Maxwelliano e 11 momentos enquanto que o segundo corresponde ao modelo de Sirovich [50] para o caso de potencial de esferas-rígidas e 8 momentos. Os resultados de Buckner e Ferziger [72] correspondem a potencial de interação Maxwelliano e 5 momentos.

De acordo com as Figuras 3.1 e 3.2, os resultados obtidos por Sirovich e Thurber [69] e também os resultados de Buckner e Ferziger [72] estão em boa concordância qualitativa com os resultados experimentais. Porém, quantitativamente, os resultados de Buckner e Ferziger [72] estão em melhor concordância com os experimentais que os de Sirovich e Thurber [69]. Na Figura 3.2 é possível notar que os resultados de Buckner e Ferziger [72] para potencial Maxwelliano estão mais próximos dos resultados de Sirovich e Thurber [69] para esferas rígidas do que que para potencial Maxwelliano. Note que os resultados obtidos via equações de Navier-Stokes divergem totalmente

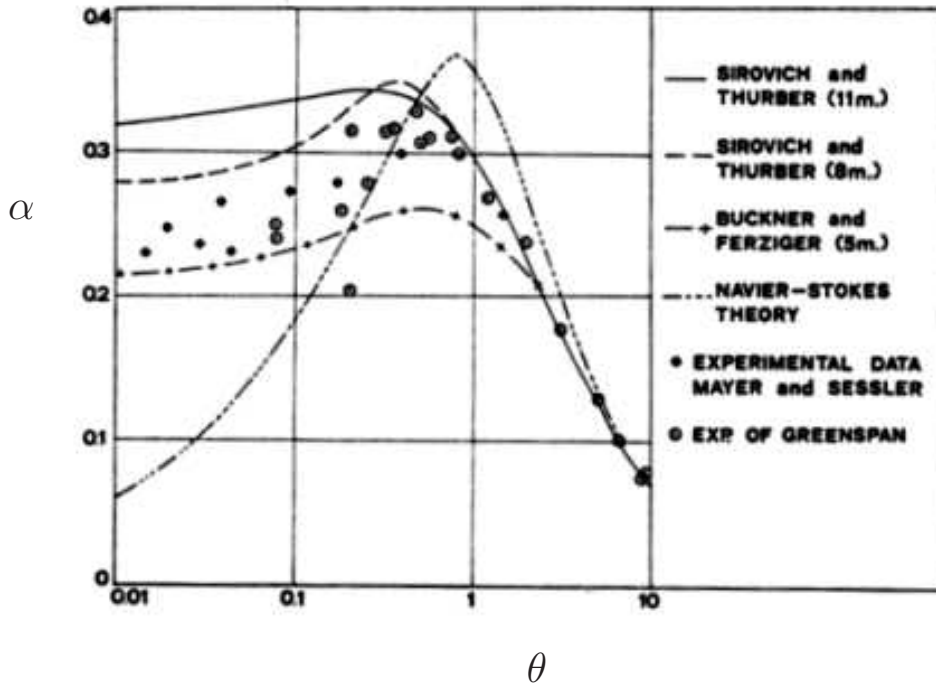


Figura 3.2: Figura extraída da Ref. [1]: Coeficiente de atenuação versus razão entre as frequências das colisões moleculares e do som.

dos resultados experimentais.

Loyalka e Cheng [73] fizeram um estudo da propagação do som em gases rarefeitos com base no modelo BGK [16]. Eles resolveram a equação cinética de BGK através do método dos momentos integrais, o qual consiste em integrar a equação cinética no espaço físico e usar a solução encontrada para expressar os momentos da função de distribuição na forma de equações integrais que, a seguir, são resolvidas de forma numérica. Thomas e Siewert [74] resolveram o mesmo problema via método de soluções elementares. Os resultados das Refs. [73, 74] estão em ótima concordância entre si e também estão em melhor concordância com os resultados experimentais de Greenspan [61] do que os resultados apresentados nas Refs. [69, 72]. Nas referências [73, 74], e também na Ref. [75], é mostrado que a velocidade e a atenuação do som são quantidades dependentes da posição. Esse é o motivo que explica a divergência entre os resultados apresentados em [69, 72] com os resultados obtidos experimentalmente por Greenspan [61] já que nessas referências o vetor de onda é assumido como independente da posição. Loyalka e Cheng [76] utilizaram o modelo de Gross-Jackson [70] e, utilizando a mesma metodologia adotada na Ref. [73], calcularam a velocidade e atenuação do som num amplo intervalo de frequências do som. Do mesmo modo que na Ref. [73], correspondendo ao modelo BGK, os resultados obtidos via modelo de Gross-Jackson estão em melhor concordância com os resultados experimentais de Greenspan [61] do que os encontrados anteriormente por outros pesquisadores. Além disso, de acordo com Cheng e Loyalka, essas duas quantidades, i.e. velocidade e atenuação do som, dependem fracamente do modelo cinético adotado já que a diferença máxima entre os resultados obtidos para modelos diferentes é

menor que 10% para a velocidade do som e menor que 5% para o coeficiente de atenuação.

Marques Jr. [77] realizou o estudo da propagação de som em gases monoatômicos através do uso de um modelo cinético baseado no método dos momentos de Grad. Os resultados obtidos para a velocidade de fase e coeficiente de atenuação utilizando 35 momentos estão em ótima concordância com os resultados experimentais das Refs. [61,71,78] para razão entre as frequências das colisões e do som maior que 0,2. Porém, é importante destacar que a teoria apresentada em [77] é válida somente quando a distância entre a fonte e o receptor de ondas sonoras é muito maior que a distância percorrida pelas partículas de gás durante um ciclo da oscilação. Caso contrário, a solução não é harmônica no espaço já que nas proximidades da fonte o vetor de onda depende da posição. Marques Jr. juntamente com Sharipov e Kremer [79] também investigaram o problema de propagação do som num gás no regime de moléculas livres com o objetivo de averiguar a influência do receptor de ondas sonoras na solução do problema. Eles determinaram a velocidade de fase e a atenuação do som em função da distância entre fonte e receptor e mostraram que a influência do receptor é significativa quando a distância fonte-receptor é pequena.

Garcia e Siewert [80] resolveram o problema de propagação do som com base no método de ordenadas discretas para resolver a equação de Boltzmann linearizada. É importante salientar que a solução da equação de Boltzmann via método de ordenadas discretas não é exata já que o método está baseado numa aproximação para o núcleo de espalhamento e para a função de distribuição das velocidades moleculares feita através do uso de uma série truncada de polinômios de Legendre. Na Ref. [80], além de resolver o problema com base na equação de Boltzmann na forma original, o problema também é resolvido com base nos modelos cinéticos de BGK [16], Shakhov [17,49], Gross-Jackson [70], etc, e os resultados obtidos via diferentes modelos são comparados com os resultados obtidos via equação de Boltzmann e também com dados experimentais apresentados na Ref. [78], na qual a velocidade de fase e a atenuação do som no gás são apresentados para um amplo intervalo de frequência do som e para dois valores de distância da fonte onde são feitas as medidas. Dessa comparação verificou-se que o modelo BGK é o que fornece resultados em maior discordância com os obtidos via equação de Boltzmann e dados experimentais e isso se deve ao fato de que esse modelo não fornece corretamente o número de Prandtl, ou seja, o modelo BGK é incapaz de descrever corretamente os efeitos de viscosidade e condutividade térmica que ocorrem na propagação do som no gás. A comparação dos resultados obtidos via modelos cinéticos e equação de Boltzmann com os dados experimentais de Schotter [78] mostra uma boa concordância em todo o intervalo de frequências do som.

A propagação do som em gases rarefeitos também foi investigada com base no Método de Simulação Direta de Monte Carlo por Hadjiconstantinou *et al.* [81–83]. Na Ref. [81] a velocidade e a atenuação do som foram determinadas e a comparação dos resultados com os dados experimentais obtidos por Greenspan [61] e por Meyer e Sessler [71] mostra boa concordância para  $\theta > 0.1$ . Nas Refs. [82, 83] a simulação da propagação do som no gás Argônio confinado num canal estreito, com largura da ordem de  $\mu m$ , foi realizada. De acordo com os autores dessas referências a teoria desenvolvida por Horace Lamb [84] para propagação de ondas em canais estreitos no regime contínuo pode ser utilizada num intervalo de número de Knudsen que abrange não somente o re-

gime contínuo mas também os regimes de transição e moléculas livres. Porém, como mencionado no Capítulo 2, as equações da Mecânica dos Meios Contínuos possuem um intervalo de validade de número de Knudsen e frequência do som e, portanto, com base nos poucos resultados apresentados pelos autores, essa conclusão não está correta, ou seja, a teoria com base nas equações da Mecânica dos Meios Contínuos possui limitação em relação ao número de Knudsen e frequência do som.

Nas Refs. [85–87] o problema de fluxo de Couette oscilatório é investigado com base no método de Monte Carlo e também via uso das equações de Navier-Stokes com condições de contorno de deslizamento do gás na superfície oscilatória. Apesar da atual importância prática, artigos referentes a esse assunto não são comuns na literatura. Antes de iniciar a abordagem do problema de fluxo de Couette oscilatório essas três referências foram as únicas encontradas na literatura referentes ao assunto em questão com abrangência de regimes de escoamento onde as equações da Mecânica dos Meios Contínuos não são válidas<sup>2</sup>. Bahukudumbi *et al.* [87] desenvolveram expressões analíticas para a velocidade e tensão de cisalhamento do gás para o problema de fluxo de Couette oscilatório com base na equação de movimento de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento do gás na superfície sólida e na introdução de uma viscosidade efetiva que depende do número de Knudsen. A expressão obtida para a velocidade do gás foi obtida com o uso de um coeficiente de deslizamento viscoso, que aparece na condição de contorno de deslizamento dada em (2.22) e que na Ref. [87] é denotado por  $\alpha_m$ , modificado e escrito da seguinte forma:

$$\alpha_m = \beta_0 + \beta_1 \tan^{-1}(\beta_2 \text{Kn}^{\beta_3}), \quad (3.12)$$

onde as constantes  $\beta_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3$ ) foram obtidas via ajuste ao perfil de velocidade obtido por Sone *et al.* [47] através da solução numérica da equação de Boltzmann linearizada e possuem os seguintes valores:  $\beta_0 = 1,298$ ;  $\beta_1 = 0,718$ ;  $\beta_2 = -1,175$  e  $\beta_3 = 0,586$ . O coeficiente de deslizamento modificado é, na verdade, uma correção para a condição de contorno de primeira ordem no número de Knudsen dada em (2.22) feita com o intuito de estender a aplicabilidade da equação de Navier-Stokes a regimes em que a solução com condição de contorno (2.22) já não é válida. Já a tensão de cisalhamento do gás foi obtida com a introdução da viscosidade efetiva  $\mu_{ef}$  cuja expressão é a seguinte:

$$\mu_{ef} = \frac{\mu}{2} \frac{a\text{Kn} + 2b}{a\text{Kn}^2 + c\text{Kn} + b} (1 + 2\alpha_m \text{Kn}), \quad (3.13)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade do gás e as constantes  $a = 0,530$ ;  $b = 0,603$  e  $c = 1,628$  foram obtidas através do ajuste aos resultados obtidos por Sone *et al.* [47] via solução da equação de Boltzmann exata. A expressão (3.13) foi obtida com a hipótese de que o comportamento do gás nos problemas de Couette oscilatório quase-estacionário e Couette estacionário são semelhantes de modo que uma viscosidade efetiva derivada dos resultados obtidos para o problema de Couette estacionário pode ser utilizada como sendo o coeficiente de viscosidade que aparece na lei de Newton para descrever

---

<sup>2</sup>Recentemente duas novas referências podem ser encontradas na literatura sobre esse assunto e comentários sobre elas são feitos posteriormente.



a tensão de cisalhamento no caso quase-estacionário, ou seja,

$$\tau = \mu_{ef} \frac{\partial U}{\partial x_n}, \quad (3.14)$$

onde  $\tau$  e  $U$  denotam, respectivamente, a tensão de cisalhamento e a velocidade do gás e  $x_n$  denota a coordenada normal à superfície oscilatória.

Além do número de Knudsen, os autores também introduziram o número de Stokes  $\beta$  definido em (2.12). A validade das expressões analíticas foi verificada via comparação com resultados obtidos via método de Monte Carlo no regime quase-estacionário, ou seja,  $\beta \ll 1$ . De acordo com os resultados apresentados em tal referência, as expressões analíticas desenvolvidas pelos autores são válidas num amplo intervalo de número de Knudsen quando  $\beta \leq 0,25$  (regime quase-estacionário) e somente no intervalo de número de Knudsen  $\text{Kn} < 0,1$  para outros valores de número de Stokes  $\beta$ . Porém, é importante salientar que os resultados obtidos por Bahukudumbi *et al.* [87] foram obtidos com base no conceito de viscosidade efetiva que é considerado incorreto pela maioria dos pesquisadores da área de DGR.

Park *et al.* [85] utilizaram o método de Simulação Direta de Monte Carlo para simular o problema de fluxo de Couette oscilatório em todo o intervalo de números de Knudsen e Stokes e, através de uma comparação com os resultados obtidos via expressões analíticas apresentadas por Bahukudumbi *et al.* [87], mostraram que os resultados numéricos obtidos via método de Monte Carlo estão em boa concordância com os resultados analíticos previstos em [87] nas situações em que  $\beta \leq 0,25$  e  $\text{Kn} \leq 12$  e no limite em que  $\beta \rightarrow \infty$  e  $\text{Kn} \rightarrow 0$ .

Hadjiconstantinou [86] também investigou o problema de fluxo de Couette oscilatório com base no método de Monte Carlo. Além disso, visando estender o intervalo de validade da solução obtida através da equação de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento de primeira ordem no número de Knudsen, Hadjiconstantinou [86] obteve expressões com base num modelo de segunda ordem no número de Knudsen para a condição de contorno de deslizamento do gás na superfície sólida, ou seja, na condição de contorno (2.22) um termo adicional proporcional à derivada segunda da velocidade é considerado. A comparação dos resultados analíticos com os resultados numéricos obtidos via método de Monte Carlo mostra uma boa concordância entre os resultados para número de Knudsen  $\text{Kn} < 0,4$  mas somente nas situações em que a frequência de oscilação  $\omega$  é muito menor que a frequência das colisões moleculares.

Existem vários artigos referentes a sistemas oscilatórios com aplicações em MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems), como por exemplo, as Refs. [88,89] que têm como objetivo calcular a força de amortecimento em microestruturas que se movem lateralmente considerando os efeitos de rarefação do gás. Porém, os resultados obtidos nesses artigos têm por base as equações de Navier-Stokes e, portanto, similarmente aos resultados obtidos nas Refs. [86,87], os resultados possuem um intervalo de validade para número de Knudsen (geralmente  $\text{Kn} < 0,1$ ) e frequência de oscilação do sistema.

Recentemente, o problema de Couette cilíndrico oscilatório foi investigado por D. Emerson *et al.* [90] via método de Monte Carlo e os problemas de Stokes e fluxo de Couette plano oscilatório foram investigados por Tang *et al.* [91] via método de Lattice Boltzmann para a equação cinética

de BGK. De acordo com D. Emerson *et al.* [90], apesar do problema de Couette cilíndrico estacionário ter sido amplamente resolvido via diferentes métodos, é a primeira vez que o problema não-estacionário em que os cilindros oscilam lateralmente é investigado, embora atualmente esse tipo de problema possua muitas aplicações práticas.

Tang *et al.* [91] apresentam uma comparação dos resultados obtidos via método de Lattice Boltzmann com os resultados obtidos por Park *et al.* [85] via método de Monte Carlo. De acordo com essa comparação, há uma boa concordância entre os resultados obtidos via métodos diferentes no intervalo de número de Knudsen  $Kn < 2, 5$ .

Portanto, com base nas referências bibliográficas citadas neste capítulo, pode-se dizer que o estudo de problemas associados à propagação de ondas em gases confinados em sistemas oscilatórios exige um maior aprofundamento tanto a nível teórico como experimental já que, apesar da atual importância em descrever o que ocorre com o gás em tais sistemas, existem poucos artigos científicos referentes a esse assunto disponíveis na literatura e, em geral, os resultados existentes não são válidos em todos os regimes de escoamento do gás e oscilação do sistema.

Também é importante ressaltar que, embora na prática misturas gasosas são muito mais utilizadas que um único gás, até o momento não há artigos na literatura referentes ao estudo de propagação de ondas em misturas de gases rarefeitos devido à perturbação longitudinal, como nos problemas de Stokes e Couette oscilatório. Somente trabalhos referentes à propagação do som em misturas gasosas são encontrados, e.g. [92–94]. Entretanto, similarmente ao caso de gás único, a propagação do som em misturas de gases rarefeitos é um assunto que vem sendo tratado há muitos anos mas os resultados disponíveis na literatura também possuem um intervalo limitado de validade.

# Capítulo 4

## Problema de Stokes

Como mencionado no Capítulo 1, o problema de Stokes é um problema clássico da Mecânica dos Meios Contínuos e consiste no estudo do movimento de um fluido localizado numa região semi-infinita limitada por uma placa plana e infinita que executa um movimento harmônico simples com frequência de oscilação  $\omega$  numa direção longitudinal ao seu próprio plano.

Nesse problema o número de Knudsen, definido em (2.1), é zero já que esse problema é um caso especial da situação em que um gás se encontra confinado entre duas placas infinitas, planas e paralelas separadas por uma distância  $L' \rightarrow \infty$ .

Stokes descreveu o movimento do fluido em contato com a placa oscilatória utilizando a equação de movimento de Navier-Stokes. Porém, a solução baseada na equação de movimento de Navier-Stokes (2.14) só é válida se a frequência de oscilação  $\omega$  da placa for muito menor que a frequência das colisões moleculares  $\nu$ , ou seja, quando o parâmetro  $\theta$  definido em (2.7) é muito grande ( $\theta \rightarrow \infty$ ). Para frequências de oscilação da mesma ordem de grandeza da frequência das colisões moleculares a equação de movimento de Navier-Stokes não é válida já que, nessa situação, a hipótese de meio contínuo sob a qual está baseada a Mecânica dos Meios Contínuos perde sua validade. Consequentemente, a fim de descrever corretamente o comportamento do gás em todo o intervalo de frequência de oscilação os métodos de DGR devem ser utilizados.

Neste capítulo toda a metodologia utilizada para resolver o problema de Stokes para frequência de oscilação arbitrária é apresentada juntamente com os resultados e discussão.

### 4.1 Esquema do problema e objetivo

Uma placa plana e infinita, localizada em  $x' = 0$  e cujo plano é  $y'z'$ , oscila harmonicamente na direção  $y'$  com frequência  $\omega$  e um gás monoatômico ocupa o espaço semi-infinito  $x' > 0$ , como mostra a Figura 4.1.

A velocidade da placa pode ser escrita da seguinte forma:

$$U_w(t') = \Re[U_m \exp(-i\omega t')], \quad (4.1)$$

onde  $\Re$  denota a parte real de uma expressão complexa ( $i = \sqrt{-1}$  é a unidade imaginária),  $t'$  denota o tempo e  $U_m$  é a amplitude da velocidade da placa, a qual é assumida como sendo muito

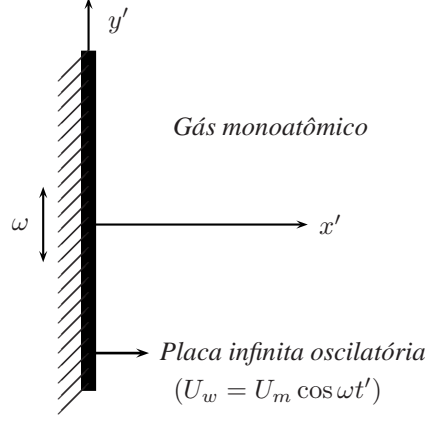


Figura 4.1: Esquema do problema de Stokes

pequena comparada à velocidade mais provável  $v_m$  dos átomos de gás, i.e.

$$U_m \ll v_m, \quad v_m = \left( \frac{2k_B T_0}{m} \right)^{1/2}, \quad (4.2)$$

onde  $m$  é massa atômica,  $T_0$  é a temperatura do gás e  $k_B$  é a constante de Boltzmann. A temperatura da placa é igual à temperatura  $T_0$  do gás no estado de equilíbrio. Como mencionado no Capítulo 2, a oscilação de qualquer corpo material num gás produz ondas que se propagam no gás e afetam as suas características de equilíbrio. Nesta situação de oscilação longitudinal da placa, a onda causa um fluxo de gás na direção  $y'$  caracterizado pela velocidade hidrodinâmica  $U_y(t', x')$  e pela componente  $x'y'$  do tensor pressão denotada por  $P_{xy}(t', x')$  (tensão de cisalhamento). Nesse problema o desvio de temperatura no gás é desprezível pois é de segunda ordem no parâmetro  $U_m/v_m$ . Assume-se que a oscilação da placa é totalmente estabelecida e, conseqüentemente, a dependência temporal é harmônica de modo que as quantidades  $U_y$  e  $P_{xy}$  podem ser representadas do seguinte modo:

$$U_y(t', x') = \Re[\tilde{U}_y(x') \exp(-i\omega t')], \quad (4.3)$$

$$P_{xy}(t', x') = \Re[\tilde{P}_{xy}(x') \exp(-i\omega t')], \quad (4.4)$$

onde  $\tilde{U}_y(x')$  e  $\tilde{P}_{xy}(x')$  são quantidades complexas.

Por questões de conveniência as seguintes quantidades adimensionais são introduzidas:

(i) Tempo  $t$  e coordenada  $x$  adimensionais, cujas definições são

$$t = \omega t', \quad x = \frac{\omega}{v_m} x'; \quad (4.5)$$

(ii) Velocidade hidrodinâmica  $u$  e tensão de cisalhamento  $\Pi$  adimensionais, definidos como

$$u(x) = \frac{\tilde{U}_y}{U_m}, \quad \Pi(x) = \frac{\tilde{P}_{xy}}{2P_0} \frac{v_m}{U_m}. \quad (4.6)$$

A velocidade  $u(x)$  e a tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  são grandezas complexas e, consequentemente, podem ser representadas da seguinte forma:

$$u(x) = u_m(x) \exp [i\varphi_u(x)], \quad (4.7)$$

$$\Pi(x) = \Pi_m(x) \exp [i\varphi_p(x)], \quad (4.8)$$

onde  $u_m(x) = |u(x)|$  e  $\Pi_m(x) = |\Pi(x)|$  são, respectivamente, as amplitudes da velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  e da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  enquanto que

$$\varphi_u = \arctan \left\{ \frac{\Im[u(x)]}{\Re[u(x)]} \right\}, \quad \varphi_p = \arctan \left\{ \frac{\Im[\Pi(x)]}{\Re[\Pi(x)]} \right\} \quad (4.9)$$

são as suas fases.  $\Im$  denota a parte imaginária da quantidade complexa. As atenuações para a velocidade hidrodinâmica e tensão de cisalhamento são introduzidas da seguinte forma:

$$a_u = -\frac{d \ln u_m}{dx}, \quad a_p = -\frac{d \ln \Pi_m}{dx}. \quad (4.10)$$

As amplitudes e fases da velocidade hidrodinâmica e tensão de cisalhamento do gás para parâmetro de oscilação  $\theta$  arbitrário são calculadas e uma análise da influência da interação gás-superfície na solução do problema é realizada assumindo diferentes tipos de interação gás-superfície via uso do núcleo proposto por Cercignani e Lampis [56], cuja expressão é dada em (2.81). Primeiramente o problema é resolvido via equação de movimento de Navier-Stokes, a qual é válida no regime de oscilação lenta correspondendo a  $\theta \rightarrow \infty$ . Posteriormente, para regimes de oscilação nos quais a equação de movimento de Navier-Stokes não é válida, o modelo BGK (2.55) para a equação de Boltzmann não-estacionária é utilizado.

## 4.2 Regime de oscilação lenta ( $\theta \rightarrow \infty$ )

Quando  $\theta \rightarrow \infty$  o problema pode ser resolvido de forma analítica via equação de movimento de Navier-Stokes que, na ausência de forças externas é dada em (2.14). Para o problema em questão (2.14) é escrita da seguinte forma:

$$2i\theta u + \frac{d^2 u}{dx^2} = 0. \quad (4.11)$$

Usualmente a equação de movimento de Navier-Stokes (4.11) é resolvida assumindo-se que a velocidade do gás na parede é igual à velocidade da parede, ou seja,

$$u = 1 \quad \text{em} \quad x = 0. \quad (4.12)$$

Distante da superfície oscilatória a velocidade hidrodinâmica tende a zero, ou seja,

$$\lim_{x \rightarrow \infty} u(x) = 0. \quad (4.13)$$

Portanto, a solução analítica da equação (4.11) que satisfaz as condições (4.12) e (4.13) é a seguinte:

$$u(x) = \exp [(i - 1)\sqrt{\theta}x]. \quad (4.14)$$

A tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  é obtida através da lei de Newton, ou seja,

$$\Pi(x) = -\frac{1}{2\theta} \frac{du}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\theta}} \exp \left[ (i - 1)\sqrt{\theta}x - i\frac{\pi}{4} \right]. \quad (4.15)$$

Usando (4.14) e (4.15), as expressões para as atenuações e fases da velocidade  $u(x)$  e tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  são escritas do seguinte modo:

$$a_u(x) = a_p(x) = \sqrt{\theta}, \quad (4.16)$$

$$\varphi_u(x) = \sqrt{\theta}x, \quad \varphi_p(x) = \sqrt{\theta}x - \frac{\pi}{4}. \quad (4.17)$$

Portanto, no regime de oscilação lenta as atenuações da velocidade do gás e da tensão de cisalhamento são constantes enquanto que as fases dessas quantidades dependem linearmente da coordenada  $x$ . Além disso, a tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  oscila com um atraso de  $\pi/4$  em relação à velocidade  $u(x)$ .

As expressões dadas em (4.14)-(4.17) são válidas quando  $\theta \rightarrow \infty$ . Porém, o intervalo de validade da equação de movimento (4.11) pode ser ampliado via utilização da condição de contorno de deslizamento do gás na superfície sólida. Essa condição de contorno é dada em (2.22) e, para o problema em questão, é escrita da seguinte forma:

$$u = 1 + \sigma_p \ell \frac{\omega}{v_m} \frac{du}{dx} \quad \text{em} \quad x = 0, \quad (4.18)$$

onde  $\sigma_p$  é o coeficiente de deslizamento viscoso. Seguindo a recomendação da Ref. [12], o valor  $\sigma_p = 1.016$  é utilizado para o caso de espalhamento difuso na superfície. O livre caminho equivalente  $\ell$  e a velocidade mais provável  $v_m$  são definidos em (2.2).

Em termos do parâmetro de oscilação  $\theta$ , a condição de contorno (4.18) é reescrita do seguinte modo:

$$u = 1 + \frac{\sigma_p}{\theta} \frac{du}{dx} \quad \text{em} \quad x = 0. \quad (4.19)$$

A solução da equação (4.11) que satisfaz as condições (4.13) e (4.19) é a seguinte:

$$u(x) = \left[ 1 - \frac{\sigma_p}{\sqrt{\theta}}(i - 1) \right]^{-1} \exp \left[ (i - 1)\sqrt{\theta}x \right]. \quad (4.20)$$

A tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  é dada por:

$$\Pi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\theta}} \left[ 1 - \frac{\sigma_p}{\sqrt{\theta}}(i - 1) \right]^{-1} \exp \left[ (i - 1)\sqrt{\theta}x - i\frac{\pi}{4} \right]. \quad (4.21)$$

Mantendo somente os termos proporcionais a  $1/\theta$ , as amplitudes da velocidade  $u(x)$  e da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  são dadas pelas seguintes expressões:

$$u_m(x) = \left(1 - \frac{\sigma_p}{\sqrt{\theta}}\right) \exp(-\sqrt{\theta}x),$$

$$\Pi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{2\theta}} \left(1 - \frac{\sigma_p}{\sqrt{\theta}}\right) \exp(-\sqrt{\theta}x). \quad (4.22)$$

Portanto, de acordo com (4.22), as atenuações  $a_u$  e  $a_p$  não são afetadas pelo uso da condição de contorno de deslizamento na interface gás-sólido e continuam tendo o mesmo valor dado em (4.16). Por outro lado, de acordo com (4.20) e (4.21), as fases sofrem um desvio de  $\sigma_p/\sqrt{\theta}$ , ou seja,

$$\varphi_u(x) = \sqrt{\theta}x + \frac{\sigma_p}{\sqrt{\theta}}, \quad (4.23)$$

$$\varphi_p(x) = \sqrt{\theta}x - \frac{\pi}{4} + \frac{\sigma_p}{\sqrt{\theta}}. \quad (4.24)$$

A Figura 4.2 mostra os perfis da amplitude da velocidade  $u(x)$  obtidos via expressões analíticas (4.14) e (4.20) para dois valores de parâmetro de oscilação:  $\theta = 20$  e  $50$ . Nessa figura a linha sólida representa o perfil obtido sem o uso da condição de contorno de deslizamento do gás na superfície enquanto que a linha tracejada representa o perfil obtido com condição de contorno de deslizamento na superfície.

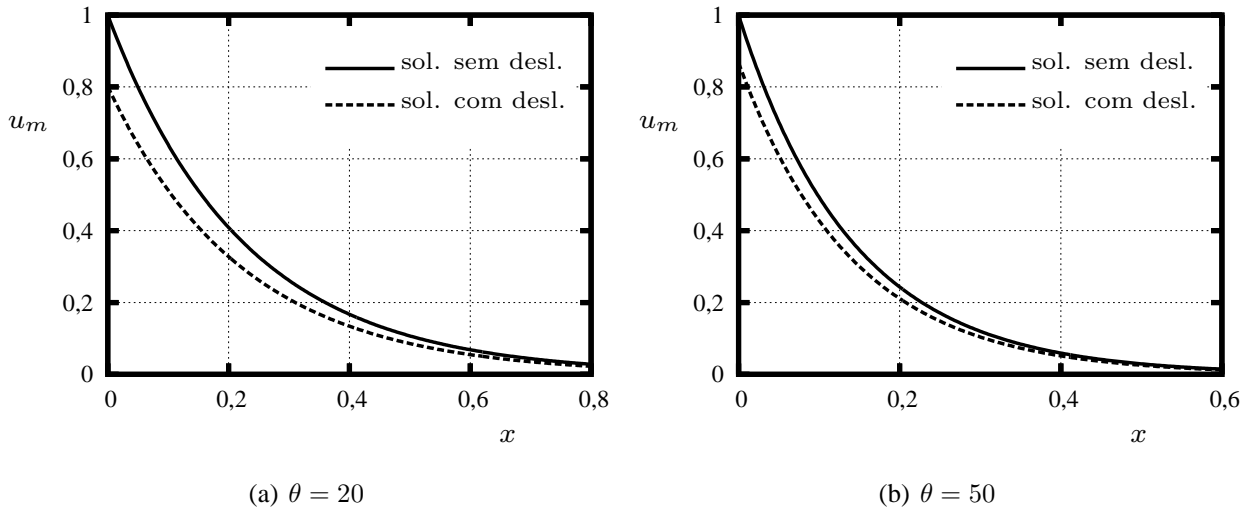


Figura 4.2: Comparação das soluções analíticas com deslizamento e sem deslizamento.

Dos perfis apresentados na Figura 4.2 é possível visualizar que as soluções obtidas sem condição de contorno de deslizamento (4.14) e com condição de contorno de deslizamento (4.20) tendem a ser iguais somente quando  $\theta$  é muito grande. Para  $\theta = 50$  a diferença entre as soluções ainda não é desprezível. Como será visto adiante, na seção de resultados, para  $\theta \geq 50$  solução da equação cinética tende à solução obtida via equação de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento, ou seja, para valores de  $\theta \geq 50$  a solução analítica (4.20) é válida para descrever o comportamento do gás no presente problema enquanto que a solução (4.14) só pode ser utilizada quando  $\theta \rightarrow \infty$ .

### 4.3 Equação cinética

Para considerar valores arbitrários de  $\theta$  o problema deve ser resolvido com base na equação de Boltzmann não-estacionária (2.40), a qual para o problema em questão é escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t'} + v_x \frac{\partial f}{\partial x'} = Q(ff_*). \quad (4.25)$$

De acordo com Cercignani [1], devido à condição (4.2), a equação (4.25) pode ser linearizada através do uso de uma expansão da função de distribuição em série de potências do parâmetro  $U_m/v_m$  ao redor da função Maxwelliana de equilíbrio. Assim, desprezando os termos não-lineares em  $U_m/v_m$ , a função de distribuição é representada por:

$$f(t', x', \mathbf{v}) = \frac{n}{(\sqrt{\pi}v_m)^3} \exp(-c^2) \left\{ 1 + \Re[h(x, c_x, c_y)e^{-i\omega t'}] \frac{U_m}{v_m} \right\}, \quad (4.26)$$

onde  $h(x, c_x, c_y)$  é chamada de função de perturbação,  $\mathbf{c} = \mathbf{v}/v_m$  denota a velocidade molecular adimensional.  $U_m$  é a amplitude da velocidade da placa e  $v_m$  é definida em (4.2). Note que as quantidades adimensionais dadas em (4.5) também são introduzidas em (4.26).

Assim, substituindo a representação (4.26) na equação (4.25) e utilizando as quantidades adimensionais dadas em (4.5), a seguinte equação linearizada é obtida:

$$-ih + c_x \frac{\partial h}{\partial x} = \hat{L}h, \quad (4.27)$$

onde  $\hat{L}h$  denota o operador de colisões linearizado.

A velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  e a tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  do gás são escritas em termos da função de perturbação  $h(x, c_x, c_y)$  da seguinte forma:

$$u(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_y h(x, c_x, c_y) \exp(-c^2) \mathbf{dc}, \quad (4.28)$$

$$\Pi(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_x c_y h(x, c_x, c_y) \exp(-c^2) \mathbf{dc}. \quad (4.29)$$

A equação (4.27) satisfaz a seguinte condição de contorno em  $x = 0$ , a qual é obtida a partir da linearização da condição de contorno dada em (2.77):

$$h^+ = \hat{A}h^- + h_w - \hat{A}h_w, \quad (4.30)$$

onde  $h^+$  e  $h^-$  são, respectivamente, as funções de perturbação das partículas gasosas refletidas (+) e incidentes (-) na placa.  $h_w$  denota a função de perturbação na placa devida ao movimento de oscilação da mesma e é dada por:

$$h_w = 2c_y. \quad (4.31)$$

O operador  $\hat{A}$  que aparece em (4.30) é chamado de operador de espalhamento e é escrito como:

$$\hat{A}\Psi = \frac{1}{c_x} \int_{c'_x < 0} |c'_x| \exp(c_x^2 - c_x'^2) \mathcal{R}(\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) \Psi(\mathbf{c}') \mathbf{dc}', \quad (4.32)$$



onde  $\mathcal{R}$  é o núcleo de espalhamento e  $\Psi$  denota uma função arbitrária.

Usando o núcleo de espalhamento proposto por Cercignani e Lampis [56], cuja expressão é dada em (2.81), (4.32) se reduz a:

$$\hat{A}h^- = \hat{A}_x \hat{A}_y \hat{A}_z h^-, \quad (4.33)$$

onde

$$\hat{A}_x h^- = \frac{1}{c_x} \int_{c'_x < 0} |c'_x| \exp(c_x^2 - c_x'^2) \mathcal{R}_x(c'_x \rightarrow c_x) h(c'_x) \mathrm{d}c'_x, \quad c_x \geq 0, \quad (4.34)$$

$$\hat{A}_\tau h^- = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(c_\tau^2 - c_\tau'^2) \mathcal{R}_\tau(c'_\tau \rightarrow c_\tau) h(c'_\tau) \mathrm{d}c_\tau, \quad \tau = y, z, \quad (4.35)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_x(c'_x \rightarrow c_x) &= \frac{c_x}{\pi \alpha_n} \exp \left[ -\frac{c_x^2 + (1 - \alpha_n) c_x'^2}{\alpha_n} \right] \\ &\quad \times \int_0^{2\pi} \exp \left[ \frac{2\sqrt{1 - \alpha_n} c_x c'_x \cos \phi}{\alpha_n} \right] \mathrm{d}\phi, \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\mathcal{R}_\tau(c'_\tau \rightarrow c_\tau) = \frac{1}{[\pi \alpha_t (2 - \alpha_t)]^{1/2}} \exp \left[ -\frac{[c_\tau - (1 - \alpha_t) c'_\tau]^2}{\alpha_t (2 - \alpha_t)} \right], \quad \tau = y, z. \quad (4.37)$$

Utilizando (4.34)-(4.37), e fazendo as devidas manipulações algébricas, a condição de contorno (4.30) é reescrita do seguinte modo:

$$h^+ = 2(1 - \alpha_t) c_y \hat{A}_x h^- + 2\alpha_t c_y. \quad (4.38)$$

No regime de oscilação rápida, que corresponde a  $\theta \rightarrow 0$ , o problema é resolvido analiticamente como mostrado na próxima seção. Caso contrário, a equação (4.27) é resolvida numericamente conforme metodologia apresentada posteriormente na seção intitulada Regime de transição.

## 4.4 Regime de oscilação rápida ( $\theta \rightarrow 0$ )

Quando  $\theta \rightarrow 0$  há poucas colisões ocorrendo durante um ciclo da oscilação e, consequentemente, o termo associado às colisões intermoleculares na equação (4.27) pode ser desprezado. Dessa forma a solução do problema tem por base a seguinte equação diferencial:

$$-ih + c_x \frac{\partial h}{\partial x} = 0, \quad (4.39)$$

que satisfaz a condição de contorno (4.38).

A solução da equação (4.39) é obtida via integração da mesma na variável  $x$  e respectivo uso da condição de contorno (4.38). Assim, a solução é dada por:

$$h(x, c_x, c_y) = \begin{cases} 2\alpha_t c_y \exp\left(\frac{ix}{c_x}\right), & c_x > 0, \\ 0, & c_x < 0. \end{cases} \quad (4.40)$$

Substituindo a solução (4.40) em (4.28) e (4.29), as seguintes expressões para a velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  e tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  do gás são obtidas:

$$u(x) = \frac{\alpha_t}{\sqrt{\pi}} I_0(-ix), \quad (4.41)$$

$$\Pi(x) = \frac{\alpha_t}{\sqrt{\pi}} I_1(-ix), \quad (4.42)$$

onde as funções  $I_n(\xi)$  são definidas como

$$I_n(\xi) = \int_0^\infty c^n \exp\left(-c^2 - \frac{\xi}{c}\right) dc \quad (4.43)$$

e são calculadas numericamente usando as aproximações dadas no Apêndice A.

Analiticamente é impossível obter expressões para as fases e atenuações de  $u(x)$  e  $\Pi(x)$  usando as expressões (4.41) e (4.42). Porém, é possível encontrar os valores dessas quantidades na placa oscilatória, i.e.  $x = 0$ , e também o comportamento dessas quantidades no limite  $x \rightarrow \infty$ . Para isso as aproximações dadas no Apêndice A para as funções  $I_0$  e  $I_1$  são utilizadas. Desse modo as atenuações e fases da velocidade  $u(x)$  e da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  em  $x = 0$  são dadas por:

$$a_u = \sqrt{\pi}, \quad a_p = 0, \quad (4.44)$$

$$\varphi_u = \varphi_p = 0, \quad (4.45)$$

enquanto que os comportamentos assintóticos quando  $x \rightarrow \infty$  são dados por:

$$a_u(x) = a_p(x) = \frac{1}{(4x)^{1/3}}, \quad (4.46)$$

$$\varphi_u(x) = \frac{3\sqrt{3}}{2} \left(\frac{x}{2}\right)^{2/3}, \quad \varphi_p(x) = \varphi_u(x) - \frac{\pi}{6}. \quad (4.47)$$

De acordo com as expressões (4.44)-(4.47), o comportamento das atenuações e fases da velocidade e da tensão de cisalhamento do gás no regime de oscilação rápida é totalmente diferente do comportamento dessas quantidades no regime de oscilação lenta. As atenuações não são mais constantes e tendem a diminuir com o aumento de  $x$ . Já as fases não apresentam mais um perfil linear em  $x$  e diferem em  $\pi/6$ .

## 4.5 Regime de transição

De acordo com as Seções 4.2 e 4.4, nos limites  $\theta \rightarrow 0$  e  $\theta \rightarrow \infty$  o problema possui solução analítica. Porém, no regime de transição o problema é resolvido numericamente. Para isso o modelo de BGK, cuja expressão é dada em (2.55), é utilizado de modo que a equação (4.27) é escrita do seguinte modo:

$$(\theta - i)h + c_x \frac{\partial h}{\partial x} = 2\theta c_y u, \quad (4.48)$$

onde  $u(x)$  é dado em (4.28).

Visando eliminar a variável  $c_y$  (componente  $y$  da velocidade molecular adimensional) uma nova função de perturbação é introduzida, a qual é definida como:

$$\Phi(x, c_x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int c_y h(x, c_x, c_y) \exp(-c_y^2) dc_y. \quad (4.49)$$

Assim, multiplicando a equação (4.48) por  $c_y \exp(-c_y^2)/\sqrt{\pi}$  e integrando em relação à variável  $c_y$  no intervalo  $(-\infty, \infty)$ , a seguinte equação para  $\Phi(x, c_x)$  é obtida:

$$(\theta - i)\Phi + c_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \theta u, \quad (4.50)$$

que, de acordo com (4.38), satisfaz a seguinte condição de contorno em  $x = 0$ :

$$\Phi^+ = (1 - \alpha_t) \hat{A}_x \Phi^- + \alpha_t. \quad (4.51)$$

As quantidades  $u(x)$  e  $\Pi(x)$ , cujas expressões são dadas em (4.28) e (4.29), também são reescritas em termos da nova função  $\Phi(x, c_x)$  da seguinte forma:

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int \exp(-c_x^2) \Phi(x, c_x) dc_x, \quad (4.52)$$

$$\Pi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int \exp(-c_x^2) \Phi(x, c_x) c_x dc_x. \quad (4.53)$$

Portanto, as quantidades de interesse, i.e. a velocidade  $u(x)$  e a tensão  $\Pi(x)$ , são determinadas via solução da equação cinética (4.50) com condição de contorno (4.51). Como  $u(x)$  e  $\Pi(x)$  são quantidades complexas, suas amplitudes e fases são obtidas utilizando as representações dadas em (4.7) e (4.8). As atenuações são determinadas utilizando (4.10).

Dois métodos diferentes foram utilizados para resolver a equação cinética (4.50) numericamente: método de velocidades discretas e método dos momentos integrais.

O método dos momentos integrais consiste em obter uma equação integral para  $u(x)$  e  $\Pi(x)$  e, a seguir, resolver essas equações integrais através de um método direto de cálculo. Este método requer muita memória computacional e tempo de CPU mas, apesar disso, tem a vantagem de que somente a coordenada  $x$  precisa ser discretizada, ou seja, não é necessário se preocupar com a variável  $c_x$ . Neste trabalho o método dos momentos integrais é utilizado somente para o caso de reflexão difusa na interface gás-sólido pois para outro tipo de interação gás-superfície é impossível encontrar as equações integrais para os momentos  $u(x)$  e  $\Pi(x)$ . Essa impossibilidade do uso do método dos momentos integrais nos casos onde assume-se que a reflexão das partículas gasosas na superfície sólida não é difusa está associada ao fato de que a dependência da solução integral na função de distribuição das partículas gasosas incidentes na superfície sólida é eliminada somente no caso de reflexão difusa.

O método de velocidades discretas, além de ser computacionalmente mais vantajoso comparado ao método dos momentos integrais, permite a escolha de qualquer tipo de interação gás-superfície. Porém, diferentemente do método dos momentos integrais, no qual somente a coordenada  $x$  é discretizada, no método de velocidades discretas também é necessário discretizar a

velocidade  $c_x$  e, devido ao comportamento oscilatório da função  $\Phi(x, c_x)$  na velocidade  $c_x$ , encontrar uma malha adequada para a variável  $c_x$  é a dificuldade do método.

A seguir, ambos os métodos são descritos.

### 4.5.1 Método dos Momentos Integrais

Considera-se que as partículas gasosas sofrem reflexão difusa na superfície, ou seja, ambos os coeficientes de acomodação  $\alpha_t$  e  $\alpha_n$  que aparecem no núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis são iguais a um e, conseqüentemente, o núcleo tende ao núcleo de espalhamento difuso dado em (2.79). Desse modo, integrando a equação cinética (4.50) na variável  $x$  e usando a condição de contorno dada em (4.51) com  $\alpha_t = \alpha_n = 1$ , a seguinte solução integral para a equação cinética é obtida:

$$\begin{aligned} \Phi(x, c_x) = \eta(c_x) \exp \left[ -\frac{(\theta - i)}{c_x} x \right] + \frac{\theta}{c_x} \left\{ \eta(c_x) \int_0^x u(\tilde{x}) \exp \left[ \frac{(\theta - i)}{c_x} (\tilde{x} - x) \right] d\tilde{x} \right. \\ \left. + \eta(-c_x) \int_x^\infty u(\tilde{x}) \exp \left[ \frac{(\theta - i)}{c_x} (\tilde{x} - x) \right] d\tilde{x} \right\}, \end{aligned} \quad (4.54)$$

onde  $\eta(\gamma)$  é a função de Heaviside definida como

$$\eta(\gamma) = \begin{cases} 1, & \text{se } \gamma > 0; \\ 0, & \text{se } \gamma < 0. \end{cases} \quad (4.55)$$

Substituindo a solução (4.54) em (4.52) e (4.53) as seguintes equações integrais são obtidas para a velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  e tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$ :

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_0[(\theta - i)x] + \frac{\theta}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty u(\tilde{x}) I_{-1}[(\theta - i)(|\tilde{x} - x|)] d\tilde{x}; \quad (4.56)$$

$$\Pi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_1[(\theta - i)x] + \frac{\theta}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty u(\tilde{x}) \text{sign}(\tilde{x} - x) I_0[(\theta - i)(|\tilde{x} - x|)] d\tilde{x}; \quad (4.57)$$

onde as funções  $I_n(\xi)$  são definidas em (4.43).

A seguir, um método direto de cálculo é utilizado, que consiste no seguinte procedimento:

- (i) A coordenada  $x$  é regularmente discretizada num intervalo  $[0, x_{max}]$ , ou seja,

$$x_k = x_{k-1} + \Delta x, \quad 1 \leq k \leq N_x, \quad x_0 = 0, \quad \Delta x = \frac{x_{max}}{N_x}, \quad (4.58)$$

onde  $N_x$  é um número inteiro e corresponde ao número de pontos utilizados na discretização da coordenada  $x$ . A distância  $x_{max}$  corresponde à distância na qual a amplitude da função de perturbação  $\Phi(x, c_x)$  tende a zero.

- (ii) As equações integrais dadas em (4.56) e (4.57) são substituídas pelos seguintes sistemas de equações algébricas:

$$u_k = B_k + \sum_{\ell=1}^{N_x} A_{k\ell} u_\ell, \quad 1 \leq k \leq N_x; \quad (4.59)$$

$$\Pi_k = C_k + \sum_{\ell=1}^{N_x} D_{k\ell} u_\ell, \quad (4.60)$$

onde

$$u_k = u(x_k - \Delta x/2), \quad (4.61)$$

$$\Pi_k = \Pi(x_k - \Delta x/2), \quad (4.62)$$

$$B_k = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_0[(\theta - i)(x_k - \Delta x/2)], \quad (4.63)$$

$$C_k = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_1[(\theta - i)(x_k - \Delta x/2)], \quad (4.64)$$

$$A_{k\ell} = \frac{\theta}{\sqrt{\pi}} \int_{x_{\ell-1}}^{x_\ell} I_{-1}[(\theta - i)|\tilde{x} - x_k + \Delta x/2|] d\tilde{x}, \quad (4.65)$$

$$D_{k\ell} = \frac{\theta}{\sqrt{\pi}} \int_{x_{\ell-1}}^{x_\ell} \text{sign}[\tilde{x} - x_k + \Delta x/2] I_0[(\theta - i)|\tilde{x} - x_k + \Delta x/2|] d\tilde{x}, \quad (4.66)$$

(iii) As matrizes  $A_{k\ell}$  e  $D_{k\ell}$  juntamente com  $B_k$  e  $C_k$  são calculadas usando as aproximações dadas no Apêndice A para as integrais  $I_{-1}$ ,  $I_0$  e  $I_1$  e os sistemas de equações lineares (4.59) e (4.60) são resolvidos via método iterativo. A precisão dos cálculos é de 0.1% e é estimada via variação dos parâmetros  $N_x$  e  $x_{max}$ .

O cálculo das matrizes  $A_{k\ell}$  e  $D_{k\ell}$  é a etapa que exige maior tempo de CPU e memória computacional pois para atingir a precisão desejada é necessário aumentar  $N_x$  e, conseqüentemente, à medida que  $N_x$  aumenta a ordem das matrizes também aumenta tal que a realização dos cálculos exige mais recursos computacionais.

A seguir, os valores dos parâmetros  $x_{max}$  e  $N_x$  usados para atingir a precisão de 0,1% são apresentados para alguns valores de parâmetro de oscilação  $\theta$ :

$$\theta = 0,01 \quad \rightarrow \quad x_{max} = 10 \quad \rightarrow \quad N_x = 50000;$$

$$\theta = 1 \quad \rightarrow \quad x_{max} = 5 \quad \rightarrow \quad N_x = 50000;$$

$$\theta = 50 \quad \rightarrow \quad x_{max} = 2 \quad \rightarrow \quad N_x = 50000.$$

Como pode ser visto, o número de pontos utilizados na discretização da coordenada  $x$  é muito grande. Observe que a distância  $x_{max}$  também aumenta à medida que o parâmetro  $\theta$  diminui, ou seja, o gás é mais perturbado à medida que a oscilação da placa aumenta (o comprimento de penetração da onda, definido como a distância na qual a amplitude da velocidade do gás é igual a 1% da amplitude da velocidade da placa, é maior para  $\theta$  menor).

## 4.5.2 Método de Velocidades Discretas

Neste método, como mencionado anteriormente, além de discretizar a coordenada  $x$ , uma discretização no espaço da velocidade  $c_x$  também é necessária. A discretização da coordenada  $x$

é feita do mesmo modo que no método dos momentos integrais e é dada em (4.58). A grande dificuldade desse método é encontrar uma malha adequada para a velocidade  $c_x$  pois a função  $\Phi(x, c_x)$  tem um comportamento oscilatório nessa variável. Para exemplificar esse comportamento oscilatório, a Figura 4.3 mostra o perfil da função de perturbação  $\Phi(x, c_x)$  versus  $c_x$  para parâmetro de oscilação  $\theta=0,01$  e  $0,1$  quando  $x = 0,5; 1; 5$  e  $8$ , respectivamente.

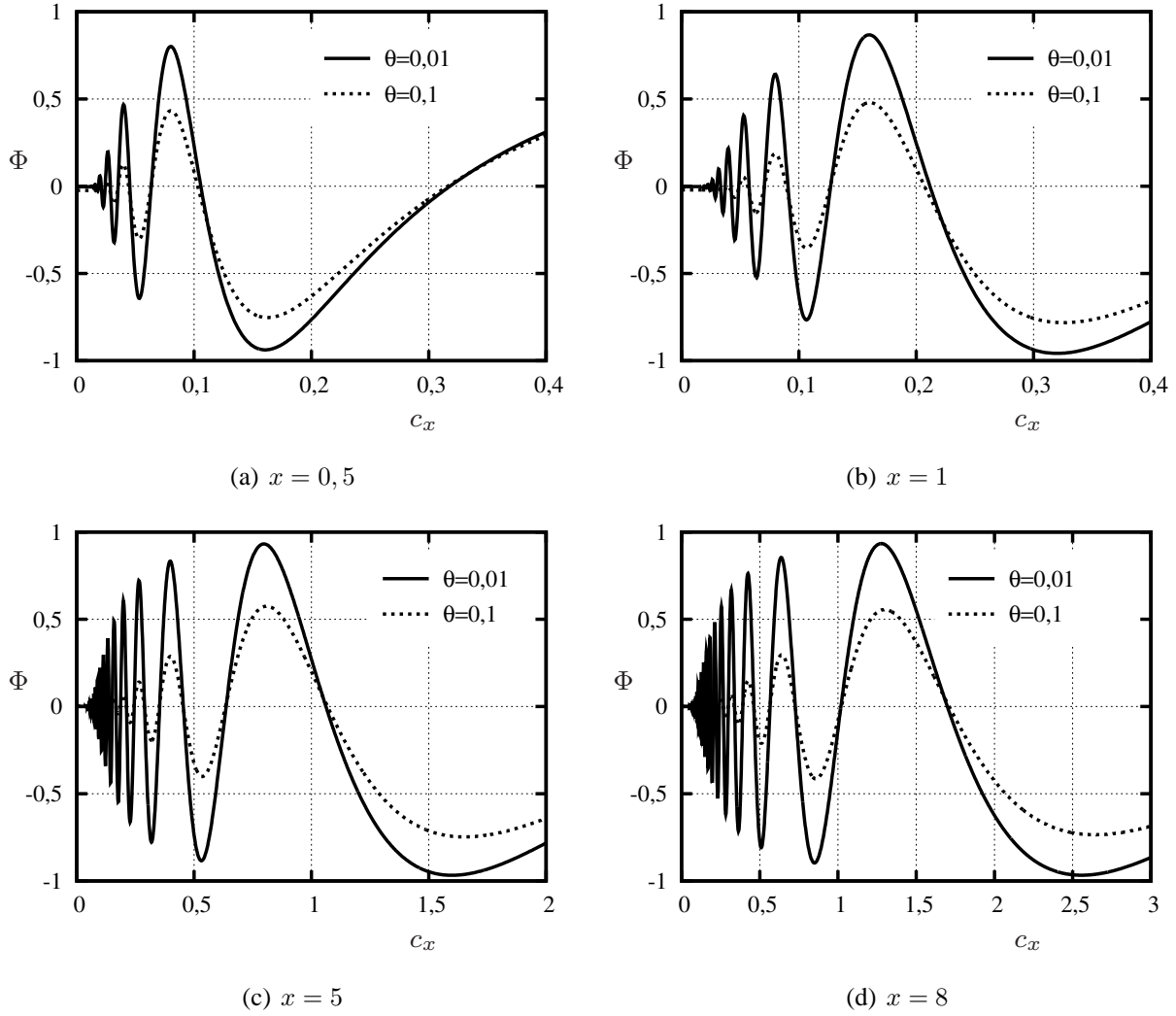


Figura 4.3: Perfil da função de perturbação  $\Phi$  versus velocidade  $c_x$ .

Da figura 4.3 é possível observar que o comportamento oscilatório da função  $\Phi$  é mais acentuado para valores pequenos de velocidade  $c_x$ . Devido a isso, a velocidade  $c_x$  é discretizada utilizando uma distribuição de pontos  $c_{xj}$  ( $1 \leq j \leq N_c$ ) mais densa para valores pequenos de  $c_x$  e uma distribuição de pontos  $c_{xj}$  menos densa para valores grandes de  $c_x$ .

A equação cinética (4.50) é discretizada utilizando um esquema explícito de diferenças finitas de primeira ordem. Assim, a função  $\Phi(x_k, c_{xi})$  é calculada do seguinte modo:

$$\Phi_{k,j} = \left( \theta u_k + \frac{c_{xj}}{\Delta x} \Phi_{k-1,j} \right) \left[ (\theta - i) + \frac{c_{xj}}{\Delta x} \right]^{-1}, \quad (4.67)$$

onde  $k = 0, 1, \dots, N_x$  e  $j = 1, \dots, N_c$ .

Os momentos dados em (4.52) e (4.53) são calculados através das seguintes fórmulas de quadratura trapezoidal estendida:

$$u_k = \sum_{j=1}^{N_c} \Phi_{k,j} W_j, \quad (4.68)$$

$$\Pi_k = \sum_{j=1}^{N_c} \Phi_{k,j} c_{xj} W_j, \quad (4.69)$$

onde  $W_j$  ( $j = 1, \dots, N_c$ ) são pesos correspondendo aos pontos  $c_{xj}$ .

O processo iterativo consiste em realizar, para cada ponto  $c_{xj}$ , os seguintes passos:

- (i) Assume-se  $u_k$  e  $\Pi_k$  e calcula-se  $\Phi_{k,j}$  via equação (4.67).
- (ii) Novos valores para  $u_k$  e  $\Pi_k$  são calculados através das fórmulas de quadratura (4.68) e (4.69).
- (iii) Volta-se ao passo (i) e usa-se os valores dos momentos  $u_k$  e  $\Pi_k$  obtidos na iteração anterior para calcular novos valores para  $\Phi_{k,j}$ . O processo iterativo é finalizado quando um critério de convergência é satisfeito.

O critério de convergência é escrito como:

$$\left| u_k^{(n)} - u_k^{(n-1)} \right| \leq \epsilon, \quad \left| \Pi_k^{(n)} - \Pi_k^{(n-1)} \right| \leq \epsilon, \quad (4.70)$$

onde  $n$  denota a iteração atual e  $n - 1$  a iteração anterior.  $\epsilon = 10^{-10}$  é o erro máximo aceitável.

Os valores dos parâmetros  $x_{max}$ ,  $N_x$  e  $N_c$  usados para atingir precisão de 0,1% para alguns valores de  $\theta$  são os seguintes:

$$\begin{aligned} \theta = 0,01 & \rightarrow x_{max} = 10 & \rightarrow N_x = 10000 & \rightarrow N_c = 6000; \\ \theta = 1 & \rightarrow x_{max} = 5 & \rightarrow N_x = 10000 & \rightarrow N_c = 4000; \\ \theta = 50 & \rightarrow x_{max} = 2 & \rightarrow N_x = 10000 & \rightarrow N_c = 4000. \end{aligned}$$

Como pode ser visto, o número de pontos necessários na discretização da coordenada  $x$  é menor que o número de pontos utilizados no método dos momentos integrais mas é necessário um grande número de pontos na discretização da velocidade  $c_x$ . Mesmo assim, o método de velocidades discretas é computacionalmente mais vantajoso comparado ao método dos momentos integrais e uma comparação dos resultados obtidos via ambos os métodos mostra uma diferença menor que 0,1%, ou seja, os métodos fornecem resultados com uma excelente concordância entre si.

### 4.5.3 Resultados numéricos e discussão

A tabela 4.1 apresenta as amplitudes e fases da velocidade  $u(x)$  e da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  na placa oscilatória, i.e.  $x = 0$ , assumindo-se espalhamento difuso na superfície sólida e considerando valores de parâmetro de oscilação  $\theta$  que abrangem todos os regimes de oscilação.

Tabela 4.1: Amplitudes e fases em  $x = 0$  e comprimento de penetração (reflexão difusa)

$\theta$	$u_m$	$\Pi_m$	$\varphi_u$	$-\varphi_p$	$\lambda$
0	0,5	0,2821	0	0	8,8710
0,01	0,5000	0,2821	0,0025	0,0019	8,7315
0,1	0,5008	0,2819	0,0250	0,0190	7,5355
1	0,5539	0,2688	0,1791	0,1662	3,6010
5	0,7291	0,2017	0,2062	0,4138	1,7615
10	0,7988	0,1625	0,1699	0,5063	1,3080
20	0,8531	0,1261	0,1319	0,5798	0,9590
50	0,9067	0,08496	0,08758	0,6517	0,6210
$\infty$	1	$(2\theta)^{-1/2}$	0	$\pi/4$	$\frac{4,6051}{\sqrt{\theta}}$

Dos dados apresentados na Tabela 4.1 observa-se que a amplitude  $u_m$  da velocidade do gás na parede varia de 0,5 a 1 à medida que o parâmetro de oscilação  $\theta$  varia de 0 até infinito. Já a amplitude  $\Pi_m$  da tensão de cisalhamento varia de  $(2\sqrt{\pi})^{-1}$  até zero quando  $\theta$  varia de 0 até  $\infty$ . A fase  $\varphi_u$  é igual a zero em ambos os limites  $\theta \rightarrow 0$  e  $\theta \rightarrow \infty$  que correspondem, respectivamente, aos regimes de oscilação rápida e lenta. No regime de transição, i.e.  $\theta \sim 1$ , a fase  $\varphi_u$  tem um valor máximo. A fase  $\varphi_p$  tende a zero quando  $\theta \rightarrow 0$  e, à medida  $\theta$  aumenta, tende a  $-\pi/4$ .

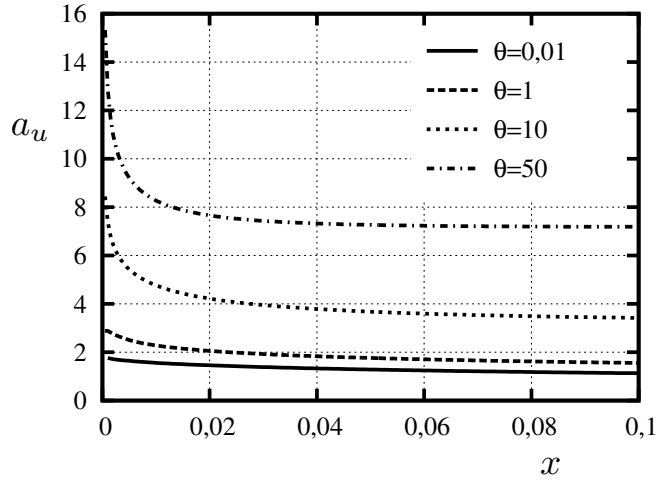
Ainda na Tabela 4.1 o comprimento de penetração da onda, denotado por  $\lambda$ , é apresentado. Essa quantidade é definida como a distância  $x$  na qual a amplitude da velocidade do gás decai até 1% do valor da amplitude  $U_m$  da velocidade da placa oscilatória. Como pode ser visto, o comprimento de penetração  $\lambda$  diminui à medida que o parâmetro de oscilação  $\theta$  aumenta e, no regime de oscilação lenta ( $\theta \rightarrow \infty$ ),  $\lambda$  é proporcional a  $\theta^{-1/2}$ .

Na Figura 4.4 os perfis das atenuações da velocidade  $u(x)$  e da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  em função da distância  $x$  são mostrados para parâmetro de oscilação  $\theta = 0, 01; 1; 10$  e  $50$ .

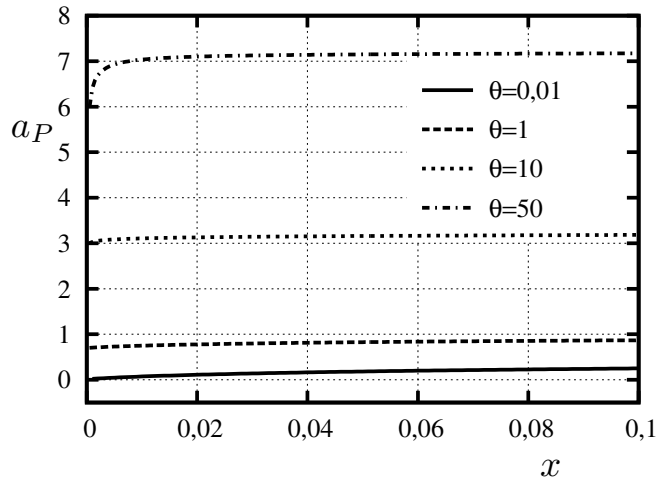
As atenuações variam nas proximidades da placa oscilatória mas distante da mesma são quantidades constantes. Por esse motivo os perfis são mostrados somente até  $x = 0, 1$ . Da Figura 4.4 observa-se que:

- (i) As atenuações tendem a aumentar com o aumento do parâmetro de oscilação  $\theta$ , ou seja, com a diminuição da frequência de oscilação da placa. Isso ocorre porque os efeitos de viscosidade do gás, que são responsáveis pela dissipação de energia, tendem a aumentar com a diminuição da frequência de oscilação em relação à frequência das colisões moleculares.
- (ii) Distante da placa oscilatória, no regime de oscilação lenta (que corresponde a  $\theta = 50$ ), as atenuações tendem ao valor constante dado em (4.16), ou seja,  $a_u = a_p \rightarrow \sqrt{\theta}$ .
- (iii) Para um valor fixo de  $\theta$ , a atenuação da velocidade  $u(x)$  aumenta nas proximidades da placa oscilatória enquanto que a atenuação da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  diminui nas proximidades da placa oscilatória.





(a) Atenuação de  $u(x)$



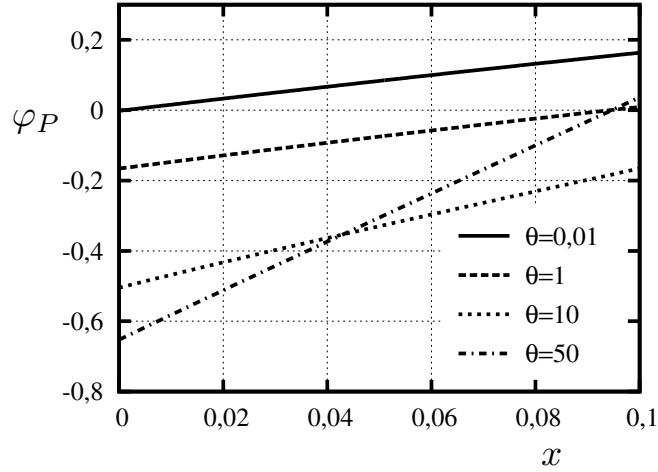
(b) Atenuação de  $\Pi(x)$

Figura 4.4: Perfis das atenuações da velocidade  $u(x)$  e da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$

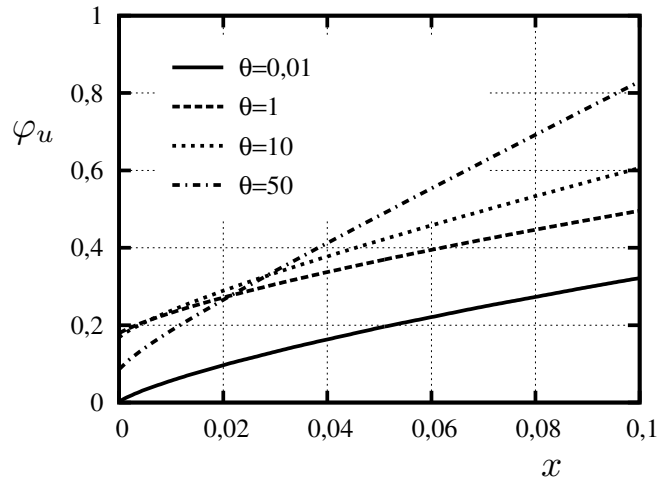
Na Figura 4.5 os perfis das fases da velocidade  $u(x)$  e da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  são mostrados e, desses perfis é possível observar que:

- (i) As fases tendem a aumentar rapidamente com o aumento do parâmetro de oscilação  $\theta$ .
- (ii) No regime de oscilação lenta (que corresponde a  $\theta = 50$ ) as fases  $\varphi_u$  e  $\varphi_P$  são funções lineares da coordenada  $x$  exceto numa pequena região nas proximidades da placa oscilatória.
- (iii) No regime de oscilação rápida (que corresponde a  $\theta = 0,01$ ) as fases aumentam com  $x^{2/3}$ , ou seja, aumentam mais lentamente que no regime oscilação lenta.
- (iv) Para  $\theta = 50$ , comparando os perfis das fases  $\varphi_u$  é possível observar que a diferença de fase tende a  $\pi/4$ , como previsto em (4.24).

A influência da interação gás-superfície pode ser verificada nas Tabelas 4.2-4.5. Nas Tabelas 4.2 e 4.3 os valores das amplitudes  $u_m$  e  $\Pi_m$  na placa oscilatória, i.e.  $x = 0$ , são apresentados



(a) Fase de  $u(x)$



(b) Fase de  $\Pi(x)$

Figura 4.5: Perfis para as fases da velocidade  $u(x)$  e da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$

para parâmetro de oscilação  $\theta = 0,01; 1$  e  $50$ , respectivamente. Nas Tabelas 4.4 e 4.5 o mesmo é apresentado para as fases  $\varphi_u$  e  $\varphi_P$ . Considera-se o coeficiente de acomodação de momentum tangencial  $\alpha_t$  variando no intervalo  $[0, 25; 2]$  e o coeficiente de acomodação de energia  $\alpha_n$  variando no intervalo  $[0, 25; 1]$ . Somente os valores na parede oscilatória são apresentados pois, caso a influência da interação gás-superfície na solução do problema seja significativa, esta é maior em  $x = 0$ .

Das Tabelas 4.2-4.5 verifica-se que:

- (i) Para  $\theta = 0,01$  as amplitudes e fases não são afetadas pela variação do coeficiente de acomodação de energia  $\alpha_n$ . Este resultado está de acordo com as expressões (4.41) e (4.42), segundo as quais no regime de oscilação rápida ( $\theta \rightarrow 0$ ) a velocidade do gás e a tensão de cisalhamento independem do coeficiente de acomodação  $\alpha_n$  e só há dependência no coeficiente de acomodação de momentum tangencial  $\alpha_t$ .

Tabela 4.2: Influência dos coeficientes de acomodação na amplitude  $u_m$ .

$\theta$	$u_m$								
	$\alpha_n$	$\alpha_t = 0,25$	0,5	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2
0,01	0,25	0,1250	0,2500	0,3750	0,5000	0,6250	0,7500	0,8750	1,0000
	0,5	0,1250	0,2500	0,3750	0,5000	0,6250	0,7500	0,8750	1,0000
	1,0	0,1250	0,2500	0,3750	0,5000	0,6250	0,7500	0,8750	1,0000
1	0,25	0,1454	0,2865	0,4229	0,5539	0,6792	0,7986	0,9118	1,0189
	0,5	0,1447	0,2856	0,4222	0,5539	0,6803	0,8012	0,9163	1,0256
	1,0	0,1439	0,2846	0,4215	0,5539	0,6816	0,8042	0,9215	1,0334
50	0,25	0,5121	0,7313	0,8423	0,9067	0,9362	0,9753	0,9948	1,0090
	0,5	0,5079	0,7283	0,8408	0,9067	0,9493	0,9784	0,9994	1,0150
	1,0	0,5028	0,7238	0,8384	0,9067	0,9517	0,9832	1,0066	1,0246

Tabela 4.3: Influência dos coeficientes de acomodação na amplitude  $\Pi_m$ .

$\theta$	$\Pi_m$								
	$\alpha_n$	$\alpha_t = 0,25$	0,5	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2
0,01	0,25	0,0705	0,1410	0,2116	0,2821	0,3526	0,4231	0,4936	0,5642
	0,5	0,0705	0,1410	0,2116	0,2821	0,3526	0,4231	0,4936	0,5642
	1,0	0,0705	0,1410	0,2116	0,2821	0,3526	0,4231	0,4936	0,5642
1	0,25	0,0699	0,1381	0,2045	0,2688	0,3306	0,3899	0,4467	0,5007
	0,5	0,0698	0,1381	0,2045	0,2688	0,3307	0,3900	0,4468	0,5010
	1,0	0,0698	0,1381	0,2045	0,2688	0,3307	0,3902	0,4471	0,5014
50	0,25	0,0468	0,0674	0,0783	0,0850	0,0895	0,0928	0,0954	0,0974
	0,5	0,0467	0,0676	0,0784	0,0850	0,0893	0,0925	0,0950	0,0969
	1,0	0,0471	0,0678	0,0786	0,0850	0,0892	0,0921	0,0944	0,0960

Tabela 4.4: Influência dos coeficientes de acomodação na fase  $\varphi_u$ .

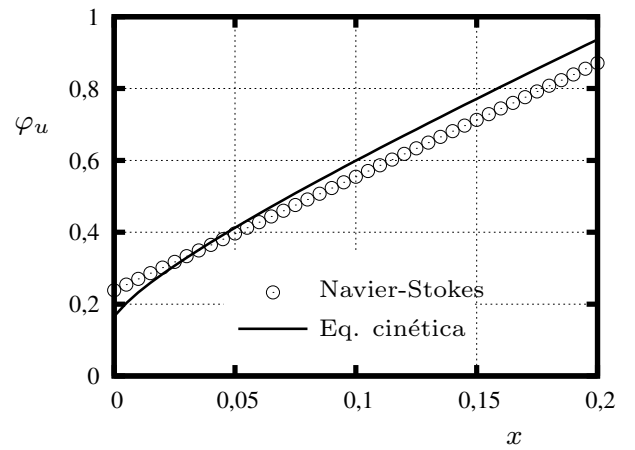
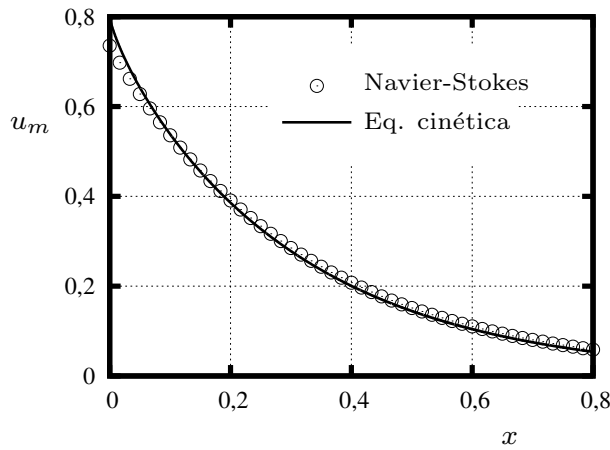
$\theta$	$\varphi_u$								
	$\alpha_n$	$\alpha_t = 0,25$	0,5	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2
0,01	0,25	0,0041	0,0035	0,0030	0,0025	0,0020	0,0014	0,0009	0,0003
	0,5	0,0041	0,0035	0,0030	0,0025	0,0020	0,0014	0,0009	0,0003
	1,0	0,0041	0,0035	0,0030	0,0025	0,0020	0,0014	0,0009	0,0003
1	0,25	0,3165	0,2694	0,2236	0,1791	0,1359	0,09421	0,0540	0,0153
	0,5	0,3103	0,2654	0,2216	0,1791	0,1378	0,09793	0,0594	0,0224
	1,0	0,3022	0,2602	0,2191	0,1791	0,1402	0,1027	0,0664	0,0315
50	0,25	0,3860	0,2276	0,1410	0,0876	0,0518	0,0263	0,0075	-0,0068
	0,5	0,3898	0,2301	0,1422	0,0876	0,0507	0,0243	0,0054	-0,0106
	1,0	0,3963	0,2339	0,1439	0,0876	0,0493	0,0215	0,0006	-0,0158

Tabela 4.5: Influência dos coeficientes de acomodação na fase  $\varphi_p$ .

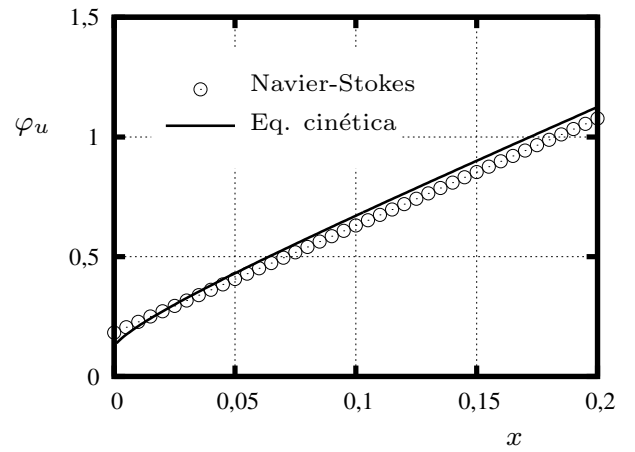
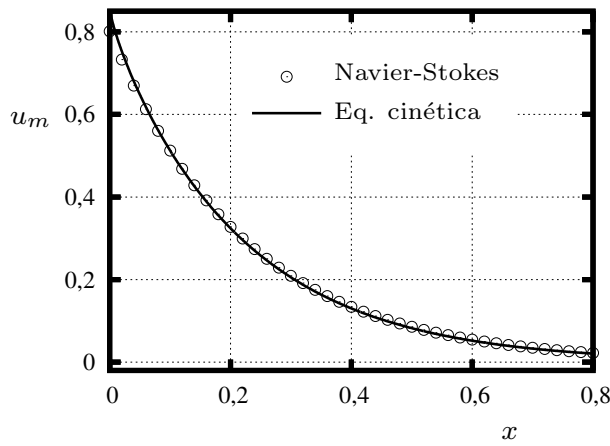
$\theta$	$-\varphi_p$								
	$\alpha_n$	$\alpha_t = 0,25$	0,5	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2
0,01	0,25	0,0471	0,0942	0,1413	0,1884	0,2356	0,2827	0,3298	0,3769
	0,5	0,0471	0,0942	0,1413	0,1884	0,2356	0,2827	0,3298	0,3769
	1,0	0,0471	0,0942	0,1413	0,1884	0,2356	0,2827	0,3298	0,3769
1	0,25	0,0432	0,0854	0,1264	0,1662	0,2046	0,2415	0,2770	0,3110
	0,5	0,0431	0,0853	0,1264	0,1662	0,2047	0,2420	0,2778	0,3122
	1,0	0,0430	0,0851	0,1262	0,1662	0,2050	0,1026	0,2788	0,3138
50	0,25	0,3443	0,5057	0,5952	0,6517	0,6902	0,7182	0,7396	0,7573
	0,5	0,3431	0,5056	0,5952	0,6517	0,6900	0,7181	0,7395	0,7571
	1,0	0,3429	0,5052	0,5951	0,6517	0,6904	0,7171	0,7384	0,7552

A fase  $\varphi_u$  tende a diminuir com o aumento do coeficiente  $\alpha_t$ . Isso indica que a velocidade hidrodinâmica do gás tende a oscilar simultaneamente com a superfície oscilatória à medida que o coeficiente de acomodação de momentum tangencial  $\alpha_t$  aumenta. Já a fase  $\varphi_p$  tende a aumentar com o aumento de  $\alpha_t$ . Porém, note que a fase  $\varphi_p$  é negativa, ou seja, a tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  está atrasada em relação à oscilação da placa.

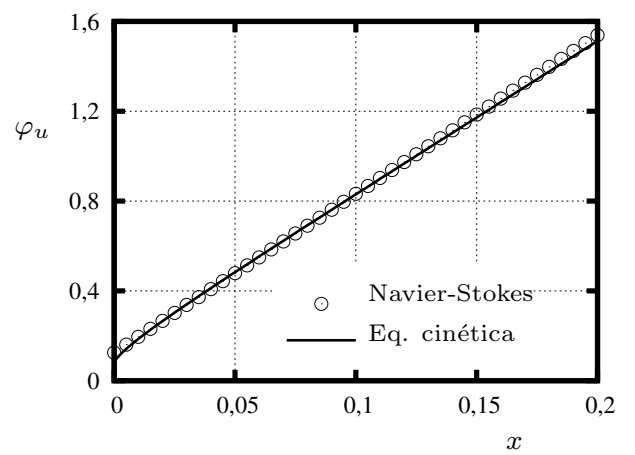
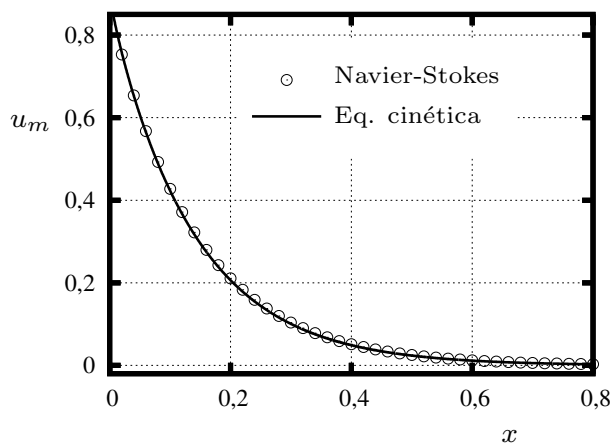
- (ii) Com relação à dependência no coeficiente de acomodação de momentum tangencial  $\alpha_t$  observa-se que existe uma forte dependência para todas as quantidades. As amplitudes  $u_m$  e  $\Pi_m$  tendem a aumentar com o aumento de  $\alpha_t$ . O aumento de  $\alpha_t$  de 0,25 até 1 corresponde ao aumento do número de partículas gasosas que, ao colidir com a parede, se acomodam ao estado de momentum tangencial da parede e, após a colisão, são refletidas com momentum tangencial igual ao da parede oscilatória. A escolha  $\alpha_t = 1$  corresponde à situação em que todas as partículas gasosas se acomodam ao estado da parede e são refletidas com momentum tangencial igual ao da parede. Note que no regime de oscilação lenta, i.e.  $\theta \rightarrow \infty$ , a velocidade do gás na parede tende a ser igual à velocidade da parede ( $u_m = 1$  e  $\varphi_u = 0$ ) enquanto que, no regime de oscilação rápida, i.e.  $\theta \rightarrow 0$ , a velocidade do gás na parede tende a ser igual à metade da velocidade da parede ( $u_m = 0.5$  e  $\varphi_u = 0$ ). No intervalo  $1 < \alpha_t \leq 2$ , as partículas gasosas são refletidas em direção oposta à velocidade de incidência.
- (iii) Para  $\theta = 1$  os comportamentos das amplitudes e fases são semelhantes ao caso em que  $\theta = 0,01$ , ou seja, todas as quantidades não são afetadas pelo coeficiente de acomodação de energia  $\alpha_n$  mas são fortemente afetadas pelo coeficiente de acomodação de momentum tangencial  $\alpha_t$ .
- (iv) Para  $\theta = 50$  todas as quantidades dependem fracamente do coeficiente de acomodação de energia  $\alpha_n$ . Quando  $\alpha_t = 1$  não há dependência nesse parâmetro. Como nos casos anteriores, há uma forte dependência de todas as quantidades no coeficiente de acomodação de momentum tangencial  $\alpha_t$ .



(a) Parâmetro de oscilação  $\theta = 10$



(b) Parâmetro de oscilação  $\theta = 20$



(c) Parâmetro de oscilação  $\theta = 50$

Figura 4.6: Amplitude da velocidade: comparação da solução numérica com a solução analítica obtida via equação de movimento de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento.

A Figura 4.6 mostra uma comparação para a amplitude e fase da velocidade  $u(x)$  obtidas numericamente via solução da equação cinética e via expressão (4.20) obtida via solução da equação de movimento de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento do gás na superfície sólida. Em tal figura a linha representa a solução numérica obtida via equação cinética enquanto que os símbolos representam a solução analítica obtida via equação de Navier-Stokes.

De acordo com a Figura 4.6, a diferença entre as amplitudes e fases obtidas via equação cinética e equação de Navier-Stokes tende a diminuir à medida que  $\theta$  aumenta. Para  $\theta = 50$  a diferença entre as soluções é muito pequena de modo que para  $\theta \geq 50$  a equação de Navier-Stokes pode ser utilizada para descrever o comportamento do gás no presente problema. Porém, note que nas situações em que  $\theta = 10$  e  $20$ , embora a diferença entre as amplitudes seja pequena, a diferença entre as fases é significativa. Portanto, pode-se dizer que nos casos em que  $\theta < 50$  o comportamento do gás é descrito de forma correta e precisa somente via uso da equação cinética.

# Capítulo 5

## Problema de Stokes para uma mistura binária de gases monoatômicos

Neste capítulo o problema de Stokes é apresentado para o caso de uma mistura binária de gases monoatômicos. O esquema do problema é o mesmo apresentado na Figura 4.1 do Capítulo 4 com a diferença que agora uma mistura binária de gases monoatômicos ocupa o espaço semi-infinito  $x' > 0$ . A concentração molar da mistura é dada por

$$C = \frac{n_1}{n}, \quad (5.1)$$

onde  $n_1$  denota a densidade de número de partículas da primeira espécie que constitui a mistura e  $n = n_1 + n_2$  denota a densidade de número da mistura.

O parâmetro de oscilação é definido como:

$$\theta = \frac{P}{\mu\omega}, \quad (5.2)$$

onde  $P$  e  $\mu$  denotam, respectivamente, a pressão e a viscosidade da mistura e  $\omega$  é a frequência de oscilação da placa.

A velocidade e a componente  $xy$  do tensor pressão da mistura são dados nas expressões (2.67) e (2.70) do Capítulo 2. Como a dependência temporal é harmônica, essas duas quantidades são escritas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} U(t', x') &= \Re[\tilde{U}(x') \exp(-i\omega t')] \\ P_{xy}(t', x') &= \Re[\tilde{P}_{xy}(x') \exp(-i\omega t')]. \end{aligned} \quad (5.3)$$

onde  $\tilde{U}(x)$  e  $\tilde{P}_{xy}(x)$  são quantidades complexas.

Introduzindo as quantidades adimensionais

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{\tilde{U}(x)}{U_m}, \quad u_\alpha(x) = \frac{\tilde{U}_\alpha(x)}{U_m}, \\ \Pi(x) &= \frac{\tilde{P}_{xy}(x)}{2P_0} \frac{v_m}{U_m}, \quad \Pi_\alpha(x) = \frac{\tilde{P}_{\alpha xy}(x)}{2P_\alpha} \frac{v_m}{U_m}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde  $U_m$  denota a amplitude da velocidade da placa e  $P_\alpha = n_\alpha k_B T_0$  é a pressão parcial da mistura, e utilizando as expressões (2.67) e (2.70), as seguintes expressões são obtidas para  $u(x)$  e  $\Pi(x)$ :

$$u(x) = C \frac{m_1}{m} u_1(x) + (1 - C) \frac{m_2}{m} u_2(x), \quad (5.5)$$

$$\Pi(x) = C \Pi_1(x) + (1 - C) \Pi_2(x), \quad (5.6)$$

onde

$$m = C m_1 + (1 - C) m_2 \quad (5.7)$$

é a massa média da mistura.

O objetivo é determinar as características macroscópicas da mistura, i.e. velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  e tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$ , para diferentes valores de concentração  $C$  e em todo o intervalo de parâmetro de oscilação  $\theta$ . Como os resultados qualitativos são os mesmos encontrados no caso de gás único, maior ênfase é dada às peculiaridades que ocorrem no caso de misturas gasosas.

## 5.1 Regime de oscilação lenta ( $\theta \rightarrow \infty$ )

Do mesmo modo que na Seção (4.2) do Capítulo 4, quando  $\theta \rightarrow \infty$  o problema pode ser resolvido analiticamente com base na equação de movimento de Navier-Stokes. Para uma mistura de gases monoatômicos a equação de movimento de Navier-Stokes é a mesma dada em (2.14). Assim, assumindo que a velocidade da mistura na placa oscilatória é igual à velocidade da placa, ou seja, é assumido que não há deslizamento da mistura gasosa na superfície sólida, a solução da equação de Navier-Stokes é a mesma dada na expressão (4.14), ou seja,

$$u(x) = \exp \left[ (i - 1) \sqrt{\theta} x \right]. \quad (5.8)$$

Portanto, no regime de oscilação lenta a velocidade hidrodinâmica da mistura independe da concentração da mesma e das espécies constituintes. Assim, por exemplo, a velocidade hidrodinâmica de uma mistura de gases Hélio-Argônio é a mesma de uma de mistura de gases Hélio-Xenônio.

O fluxo de difusão do constituinte  $\alpha$  na direção  $j$ , denotado por  $J_{\alpha j}$ , é definido da seguinte forma:

$$J_{\alpha j} = \varrho_\alpha (u_{\alpha j} - u_j), \quad (5.9)$$

onde  $\varrho_\alpha$  é a densidade de massa da espécie  $\alpha$  e as quantidades  $u_{\alpha j}$  e  $u_j$  denotam, respectivamente, a componente  $j$  das velocidades da espécie  $\alpha$  e da mistura. De forma geral, o fluxo de difusão dos constituintes da mistura na direção  $j$  é dado pela lei de Fick através das seguintes expressões:

$$J_{1j} = -J_{2j} \quad (5.10)$$



onde

$$J_{1j} = -\frac{n^2 m_1 m_2}{\rho} \mathcal{D}_{12} \left[ d_1 + \frac{k_T}{T} \frac{\partial T}{\partial y'} \right], \quad (5.11)$$

onde  $\mathcal{D}_{12}$  é o coeficiente de difusão e  $k_T$  é a razão de termo-difusão, cujas expressões podem ser encontradas na Ref. [6]. A quantidade  $d_1$  é a força de difusão e é dada por:

$$d_1 = -d_2 = \frac{\partial C}{\partial y'} + \left( C - \frac{\rho_1}{\rho} \right) \frac{\partial \ln P}{\partial y'} - \frac{\rho_1 \rho_2}{P \rho} (F_1 - F_2). \quad (5.12)$$

O primeiro termo em (5.12) representa um fluxo que tende a reduzir a não homogeneidade da mistura quando a concentração da mesma não é uniforme. O segundo termo em (5.12) representa um fluxo devido a um gradiente de pressão e o terceiro termo representa o fluxo devido à ação de forças externas. Na expressão (5.11), o termo proporcional à derivada da temperatura representa o fluxo de difusão devido a um gradiente de temperatura, comumente conhecido como termo-difusão.

Para o problema em questão, (5.12) se reduz a:

$$d_1 = 0, \quad (5.13)$$

e

$$\frac{\partial T}{\partial y'} = 0. \quad (5.14)$$

Consequentemente, o fluxo de difusão dado em (5.11) é nulo, ou seja, segundo a lei de Fick não há difusão dos constituintes na mistura. Porém, isso é válido distante da placa oscilatória pois na região próxima à placa os constituintes da mistura se difundem numa fina camada próxima à superfície devido ao fenômeno de deslizamento viscoso da mistura gasosa na superfície sólida, ou seja, a difusão é devida a um gradiente de velocidade normal à superfície sólida.

Utilizando a condição de contorno de deslizamento viscoso da mistura gasosa na superfície sólida, dada em (2.22), a seguinte expressão para a velocidade da mistura é obtida:

$$u(x) = \left[ 1 - \frac{\sigma_p}{\sqrt{\theta}} (i - 1) \right]^{-1} \exp [(i - 1)\sqrt{\theta}x], \quad (5.15)$$

onde  $\sigma_p$  é o coeficiente de deslizamento viscoso da mistura que depende do potencial de interação intermolecular e da concentração da mistura em questão. Na Ref. [38] o coeficiente  $\sigma_p$  é tabulado para algumas misturas de gases nobres num amplo intervalo de concentração.

## 5.2 Equação cinética

Devido à condição de que a amplitude da velocidade da placa é muito menor que a velocidade mais provável das partículas de gás, a equação de Boltzmann não-estacionária para o

$\alpha$ -ésimo constituinte da mistura de gases monoatômicos, dada em (2.58), pode ser linearizada via representação da função de distribuição da espécie  $\alpha$  que constitui a mistura da seguinte forma:

$$f_\alpha(t', x', \mathbf{v}_\alpha) = f_\alpha^M \left( 1 + \Re[h_\alpha(x', \mathbf{v}_\alpha) e^{-i\omega t'}] \frac{U_m}{v_m} \right), \quad (5.16)$$

onde

$$f_\alpha^M(\mathbf{v}_\alpha) = n_{0\alpha} \left( \frac{m_\alpha}{2\pi k_B T_0} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{m_\alpha}{2k_B T_0} v_\alpha^2 \right] \quad (5.17)$$

é a função Maxwelliana de equilíbrio global.

O tempo  $t$  e coordenada  $x$  adimensionais e também a velocidade adimensional das partículas de gás da espécie  $\alpha$ , denotada por  $\mathbf{c}_\alpha$ , são introduzidas da seguinte forma:

$$t = \omega t', \quad x = \frac{\omega}{v_m} x', \quad \mathbf{c}_\alpha = \frac{\mathbf{v}_\alpha}{v_m}. \quad (5.18)$$

Introduzindo (5.16) em (2.58) e utilizando as quantidades adimensionais dadas em (5.18), a seguinte equação integro-diferencial linearizada é obtida para o  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura:

$$\frac{\partial h_\alpha}{\partial t} + \left( \frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha}{\partial x} = \frac{1}{\omega} \sum_{\beta=1}^2 L_{\alpha\beta} h_\alpha, \quad (5.19)$$

onde o termo do lado direito da equação está associado às colisões entre espécies  $\alpha$ - $\alpha$  e  $\alpha$ - $\beta$  que constituem a mistura. Como no problema em questão uma mistura binária de gases monoatômicos é considerada, a solução do problema tem por base um sistema de duas equações integro-diferenciais dadas em (5.19) para  $\alpha=1,2$ . Assumindo reflexão difusa das partículas gasosas na superfície sólida, a solução  $h_\alpha(x, c_x, c_y)$ ,  $\alpha = 1, 2$ , deve satisfazer as seguintes condições de contorno em  $x = 0$ :

$$h_\alpha(0, c_x, c_y) = \begin{cases} 2c_{\alpha y} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}}, & c_{\alpha x} > 0, \\ 0, & c_{\alpha x} < 0. \end{cases} \quad (5.20)$$

A velocidade hidrodinâmica e a componente  $xy$  do tensor pressão do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura são dados, respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$u_\alpha(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int c_{\alpha y} h_\alpha(x, c_x, c_y) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (5.21)$$

$$\Pi_\alpha(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_{\alpha x} c_{\alpha y} h_\alpha(x, c_x, c_y) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha. \quad (5.22)$$

Desse modo, a fim de resolver o problema para parâmetro de oscilação  $\theta$  arbitrário, é necessário resolver o sistema de equações dado em (5.19) com condições de contorno (5.20) e então determinar  $u_\alpha$  e  $\Pi_\alpha$  via expressões (5.21) e (5.22).

### 5.3 Regime de oscilação rápida ( $\theta \rightarrow 0$ )

Quando  $\theta \rightarrow 0$  o termo de colisões que aparece na equação (5.19) pode ser desprezado já que nessa situação as colisões gás-superfície são muito mais comuns do que as colisões entre as partículas gasosas. Como consequência, a equação (5.19) se reduz a:

$$-ih_\alpha + \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha}{\partial x} = 0, \quad \alpha = 1, 2. \quad (5.23)$$

A solução da equação (5.23) que satisfaz a condição de contorno de espalhamento difuso, dada em (5.20), é a seguinte:

$$h_\alpha(x, c_{\alpha x}, c_{\alpha y}) = \begin{cases} 2\sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} c_{\alpha y} \exp\left[i\sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \frac{x}{c_{\alpha x}}\right], & c_{\alpha x} > 0 \\ 0, & c_{\alpha x} < 0. \end{cases} \quad (5.24)$$

Substituindo a solução (5.24) em (5.21) e (5.22), as seguintes expressões para as quantidades  $u_\alpha(x)$  e  $\Pi_\alpha(x)$  são obtidas:

$$u_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_0 \left[ -i\sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} x \right], \quad (5.25)$$

$$\Pi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} I_1 \left[ -i\sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} x \right], \quad (5.26)$$

onde as funções  $I_0$  e  $I_1$  são definidas em (4.43).

Assim, a velocidade e a componente  $xy$  do tensor pressão da mistura são obtidos através da substituição das expressões (5.25) e (5.26) em (5.5) e (5.6) de modo que são escritos da seguinte forma:

$$u(x) = \frac{C}{\sqrt{\pi}} \frac{m_1}{m} I_0 \left[ -i\sqrt{\frac{m_1}{m}} x \right] + \frac{(1-C)}{\sqrt{\pi}} \frac{m_2}{m} I_0 \left[ -i\sqrt{\frac{m_2}{m}} x \right], \quad (5.27)$$

$$\Pi(x) = \frac{C}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m_1}{m}} I_1 \left[ -i\sqrt{\frac{m_1}{m}} x \right] + \frac{(1-C)}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m_2}{m}} I_1 \left[ -i\sqrt{\frac{m_2}{m}} x \right]. \quad (5.28)$$

### 5.4 Regime de transição

Para valores arbitrários de  $\theta$ , a equação (5.19) é resolvida numericamente e o operador de colisões é substituído pelo modelo de McCormack, cuja expressão é dada no Apêndice C, que é escrito do seguinte modo para o problema em questão:

$$\begin{aligned} L_{\alpha\beta} h_\alpha = & -\gamma_{\alpha\beta} h_\alpha + 2\sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \left[ \gamma_{\alpha\beta} u_\alpha - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} (u_\alpha - u_\beta) \right] c_{\alpha y} \\ & + 4 \left[ \left( \gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)} \Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_\beta \right) \right] c_{\alpha x} c_{\alpha y} - \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_\alpha - u_\beta) c_{\alpha y} \left( c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right), \end{aligned} \quad (5.29)$$

onde os momentos  $u_\alpha(x)$  e  $\Pi_\alpha(x)$  são dados em (5.25) e (5.26).

As quantidades  $\nu_{\alpha\beta}^{(n)}$  ( $n = 1, \dots, 4$ ) que aparecem em (5.29) são definidas no Apêndice C e dependem do potencial de interação intermolecular que está implícito nas integrais  $\Omega_{\alpha\beta}^{(jk)}$  (chamadas de integrais de Chapman-Cowling). Para potencial de interação de esferas-rígidas as integrais de Chapman-Cowling possuem expressões conhecidas, dadas em (C.19), e portanto, por questões de conveniência, as seguintes quantidades adimensionais são introduzidas:

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(jk)*} = \frac{\Omega_{\alpha\beta}^{(jk)}}{[\Omega_{\alpha\beta}^{(jk)}]_{er}}, \quad (5.30)$$

onde  $[\Omega_{\alpha\beta}^{(jk)}]_{er}$  são as integrais de Chapman-Cowling para esferas rígidas.

As quantidades  $\gamma_{\alpha\beta}$  são proporcionais à frequência das colisões moleculares e, como sempre aparecem em combinações, o parâmetro  $\gamma_\alpha$  é introduzido da seguinte forma:

$$\gamma_\alpha = \gamma_{\alpha\alpha} + \gamma_{\alpha\beta}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (5.31)$$

Introduzindo as quantidades adimensionais dadas em (5.31) na equação (5.19), a seguinte equação é obtida para a espécie  $\alpha$  que constitui a mistura:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_\alpha}{\partial t} + \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha}{\partial x} = \theta_\alpha \left\{ -h_\alpha + 2\sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} [u_\alpha - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)}(u_\alpha - u_\beta)] c_{\alpha y} \right. \\ \left. + 4 \left[ (1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)}) \Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)} \Pi_\beta \right] c_{\alpha x} c_{\alpha y} \right. \\ \left. - \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_\alpha - u_\beta) c_{\alpha y} \left( c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) \right\}, \quad \alpha = 1, 2. \end{aligned} \quad (5.32)$$

O parâmetro  $\theta_\alpha$  está relacionado ao parâmetro de oscilação  $\theta$ , definido em (5.2), pela seguinte expressão:

$$\theta_\alpha = \eta_\alpha \frac{\mu}{\mu_\alpha}, \quad (5.33)$$

onde  $\eta_1 = C$  e  $\eta_2 = 1 - C$ .  $\mu$  é a viscosidade da mistura, dada pela seguinte expressão:

$$\mu = \mu_1 + \mu_2, \quad \mu_\alpha = P_\alpha \frac{(\Xi_\beta + \nu_{\alpha\beta}^{(4)})}{(\Xi_\alpha \Xi_\beta - \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \nu_{\beta\alpha}^{(4)}), \quad \Xi_\alpha = \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} - \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} + \nu_{\alpha\beta}^{(3)}. \quad (5.34)$$

Para eliminar as variáveis  $c_{\alpha y}$  e  $c_{\alpha z}$ , a seguinte função é introduzida:

$$\Phi_\alpha(x, c_{\alpha x}) = \frac{1}{\pi} \int c_{\alpha y} h_\alpha(x, c_{\alpha x}, c_{\alpha y}) \exp(-c_{\alpha y}^2 - c_{\alpha z}^2) \mathbf{d}c_{\alpha y} \mathbf{d}c_{\alpha z}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (5.35)$$

Assim, multiplicando a equação (5.32) por  $c_{\alpha y} \exp(-c_{\alpha y}^2 - c_{\alpha z}^2)/\pi$  e integrando nas variáveis  $c_{\alpha y}$  e  $c_{\alpha z}$  no intervalo  $(-\infty, \infty)$  a seguinte equação para a função  $\Phi_\alpha(x, c_{\alpha x})$  é obtida:

$$\begin{aligned} (\theta_\alpha - i) \Phi_\alpha + \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} c_{\alpha x} \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x} = \theta_\alpha \left\{ \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} [u_\alpha - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)}(u_\alpha - u_\beta)] + 2c_{\alpha x} \left[ (1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} \right. \right. \\ \left. \left. - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)}) \Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)} \Pi_\beta \right] - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \left( c_{\alpha x}^2 - \frac{1}{2} \right) \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_\alpha - u_\beta) \right\}, \end{aligned} \quad (5.36)$$

onde

$$u_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int \Phi_\alpha(x, c_{\alpha x}) \exp(-c_{\alpha x}^2) dc_{\alpha x}, \quad (5.37)$$

$$\Pi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int c_{\alpha x} \Phi_\alpha(x, c_{\alpha x}) \exp(-c_{\alpha x}^2) dc_{\alpha x}. \quad (5.38)$$

A condição de contorno de espalhamento difuso, dada em (5.20), é escrita em termos da nova função  $\Phi(x, c_x)$  como:

$$\Phi_\alpha(0, c_{\alpha x}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}}, & c_{\alpha x} > 0, \\ 0, & c_{\alpha x} < 0. \end{cases} \quad (5.39)$$

O método de solução para resolver o sistema de equações (5.36) para  $\alpha=1, 2$  é descrito a seguir.

### 5.4.1 Método de solução

Similarmente ao caso de gás único, a função de perturbação  $\Phi_\alpha(x, c_x)$  do  $\alpha$ -ésimo constituinte da mistura possui um comportamento oscilatório na variável  $c_{\alpha x}$  e, conseqüentemente, a fim de resolver o sistema de equações (5.36) um grande número de pontos no espaço de velocidades  $c_{\alpha x}$  é necessário. Portanto, visando diminuir o comportamento oscilatório da função de perturbação, a mesma metodologia utilizada no Capítulo 4 de dividir a função de perturbação em duas partes é utilizada.

Assim, a função  $\Phi_\alpha$  é representada da seguinte forma:

$$\Phi_\alpha(x, c_x) = \Phi_{\alpha 0}(x, c_x) + \tilde{\Phi}_\alpha(x, c_x), \quad (5.40)$$

onde a função  $\Phi_{\alpha 0}(x, c_x)$  satisfaz a seguinte equação diferencial

$$(\theta_\alpha - i)\Phi_{\alpha 0} + \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} c_{\alpha x} \frac{\partial \Phi_{\alpha 0}}{\partial x} = 0, \quad \alpha = 1, 2, \quad (5.41)$$

com condição de contorno em  $x = 0$

$$\Phi_{\alpha 0}(0, c_x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}}, & c_x > 0, \\ 0, & c_x < 0. \end{cases} \quad (5.42)$$

A solução da equação (5.41) que satisfaz a condição de contorno dada em (5.42) é a seguinte:

$$\Phi_{\alpha 0}(x, c_x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \exp\left[-\frac{(\theta_\alpha - i)}{c_{\alpha x}} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} x\right], & c_{\alpha x} > 0 \\ 0, & c_{\alpha x} < 0. \end{cases} \quad (5.43)$$

Substituindo a representação (5.40) na equação (5.36) e utilizando (5.43), a seguinte equação é obtida para a função  $\tilde{\Phi}(x, c_x)$ :

$$(\theta_\alpha - i)\tilde{\Phi}_\alpha \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} c_{\alpha x} \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial x} = \theta_\alpha \left\{ \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} [u_\alpha - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)}(u_\alpha - u_\beta)] + 2c_{\alpha x} \left[ (1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)})\Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)}\Pi_\beta \right] - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} \left( c_{\alpha x}^2 - \frac{1}{2} \right) \nu_{\alpha\beta}^{*(2)}(u_\alpha - u_\beta) \right\}, \quad (5.44)$$

na qual os momentos  $u_\alpha(x)$  e  $\Pi_\alpha(x)$  também são divididos em duas partes, i.e.

$$u_\alpha(x) = u_{\alpha 0}(x) + \tilde{u}_\alpha(x), \quad (5.45)$$

$$\Pi_\alpha(x) = \Pi_{\alpha 0}(x) + \tilde{\Pi}_\alpha(x), \quad (5.46)$$

onde as quantidades com índice 0 são dadas pelas expressões

$$u_{\alpha 0}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_0 \left[ (\theta_\alpha - i) \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} x \right], \quad (5.47)$$

$$\Pi_{\alpha 0}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} I_1 \left[ (\theta_\alpha - i) \sqrt{\frac{m_\alpha}{m}} x \right], \quad (5.48)$$

e  $\tilde{u}(x)$  e  $\tilde{\Pi}(x)$  são dadas pelas expressões (5.37) e (5.38) substituindo a função  $\Phi_\alpha(x, c_x)$  por  $\tilde{\Phi}_\alpha(x, c_x)$ .

O procedimento de dividir a função  $\Phi_\alpha(x, c_x)$  em duas partes viabiliza os cálculos numéricos já que este processo faz com que a maior parte do comportamento oscilatório da função  $\Phi_\alpha(x, c_x)$  seja devido à função analítica  $\Phi_{\alpha 0}$  e, como consequência, o número de pontos no espaço de velocidade  $c_x$  necessário nos cálculos numéricos é menor que na situação onde o processo de divisão da função  $\Phi_\alpha$  não é utilizado. Similarmente ao esquema utilizado no capítulo anterior, o sistema de equações (5.44) é resolvido via método de velocidades discretas com precisão de 0.1%, a qual é estimada via variação dos parâmetros  $N_x$  (número de pontos no espaço da coordenada  $x$ ),  $N_c$  (número de pontos no espaço de velocidade  $c_{\alpha x}$ ) e  $X_{max}$  (distância em que  $\Phi_\alpha$  tende a zero).

## 5.4.2 Resultados numéricos e discussão

Os cálculos numéricos foram realizados para a mistura Hélio-Argônio ( $m_{\text{He}}=4,0026$  u.m.a,  $m_{\text{Ar}}=39,948$  u.m.a) considerando potencial de interação de esferas-rígidas. Para parâmetro de oscilação  $\theta = 1$ , a influência no potencial de interação entre as partículas gasosas na solução do problema foi verificada com o uso de um potencial realístico [95] de interação. É importante notar que a dependência no potencial de interação está implícita nas integrais de Chapman-Cowling que aparecem nas quantidades definidas nas expressões (C.10)-(C.15) do Apêndice C. Na Ref. [95] as integrais de Chapman-Cowling são expressas em função de parâmetros obtidos experimentalmente para um potencial realístico de interação intermolecular.

De acordo com os resultados apresentados no Capítulo 4, para o caso de um gás único o comprimento de penetração  $\lambda$  da onda depende do parâmetro de oscilação  $\theta$  e tende a diminuir à

medida que  $\theta$  aumenta. No caso de uma mistura de gases monoatômicos, além da dependência em  $\theta$ , o comprimento de penetração da onda também depende da concentração  $C$  da mistura. As Figuras 5.1-5.3 mostram o perfil do comprimento de penetração  $\lambda$  da onda em função da concentração  $C$  da mistura Hélio-Argônio para parâmetro de oscilação  $\theta=0,1; 1$  e  $10$ . Na Figura 5.2 os resultados obtidos para potencial de interação de esferas-rígidas são comparados com os resultados obtidos através do uso do potencial realístico [95] de interação.

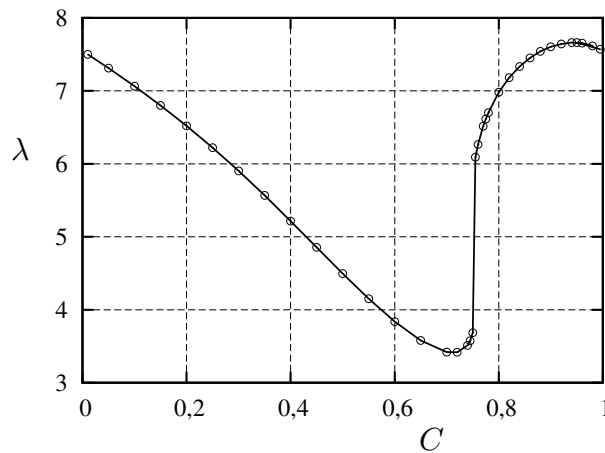


Figura 5.1: Comprimento de penetração da onda,  $\lambda$ , versus concentração,  $C$ , quando  $\theta = 0,1$ .

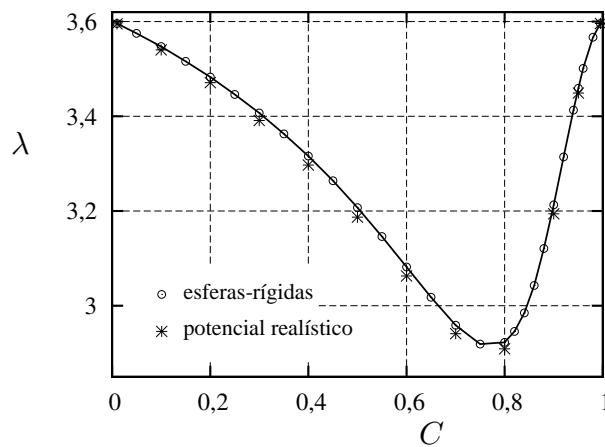


Figura 5.2: Comprimento de penetração da onda,  $\lambda$ , vs concentração,  $C$ , quando  $\theta = 1$ .

De acordo com as Figuras 5.1-5.3, o comprimento de penetração da onda  $\lambda$  é uma função não monotônica da concentração  $C$ . Note que nos limites em que a concentração molar  $C \rightarrow 0$  e  $C \rightarrow 1$  o comprimento de penetração  $\lambda$  tende ao valor encontrado no Capítulo 4 para o caso de um gás único. À medida que a concentração  $C$  da mistura aumenta, o comprimento  $\lambda$  diminui até um certo valor de concentração e então tende a aumentar até atingir novamente o valor correspondendo a um gás único. Esse comportamento se deve ao fato de que o coeficiente de atenuação  $a_u$ , definido

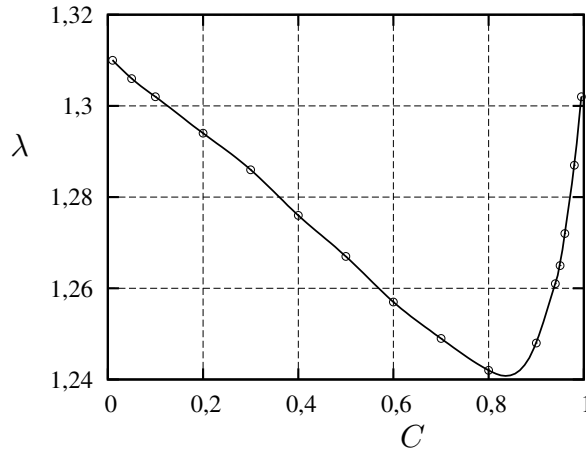


Figura 5.3: Comprimento de penetração da onda,  $\lambda$ , versus concentração,  $C$ , quando  $\theta = 10$ .

como

$$a_u = -\frac{d \ln A_u}{dx}, \quad (5.49)$$

onde  $A_u$  é a amplitude da velocidade  $u(x)$ , depende da concentração da mistura. Assim, até um certo valor de concentração  $C$ , o aumento da concentração de gás Hélio na mistura tende a aumentar a atenuação  $a_u$  e, conseqüentemente, o comprimento de penetração  $\lambda$  diminui.

Além disso, a variação de  $\lambda$  em relação ao valor correspondendo a gás único é maior quando  $\theta$  é menor. Isso ocorre devido à dependência de  $a_u$  no parâmetro de oscilação  $\theta$ . Do mesmo modo que para gás único, a atenuação é maior para  $\theta$  grande, ou seja, os efeitos viscosos responsáveis pela atenuação do gás aumentam à medida que a frequência das colisões entre as partículas gasosas aumenta em relação à frequência da oscilação. Assim, o comprimento de penetração da onda sempre é menor para  $\theta$  maior.

De acordo com a Figura 5.2, quando  $\theta = 1$  existe uma fraca dependência do comprimento de penetração da onda no potencial de interação entre as partículas gasosas pois a diferença máxima entre os resultados para esferas-rígidas e potencial realístico de interação é menor que 1%.

As Tabelas 5.1-5.3 apresentam os valores para as amplitudes e fases das quantidades  $u(x)$  e  $\Pi(x)$  na superfície oscilatória, i.e.  $x = 0$ , para a mistura Hélio-Argônio com concentração  $C = 0, 1; 0,5$  e  $0,9$  e considerando vários valores de parâmetro de oscilação  $\theta$ . O comprimento de penetração da onda também é apresentado.

De acordo com as Tabelas 5.1-5.3, no regime de oscilação rápida ( $\theta \rightarrow 0$ ), a amplitude e fase da velocidade  $u(x)$  tendem aos valores previstos pela expressão (5.27), ou seja, na placa oscilatória a amplitude  $u_m$  independente da concentração da mistura e a fase  $\varphi_u$  é igual a zero. Já a amplitude e fase da quantidade  $\Pi(x)$  depende da concentração da mistura quando  $\theta \rightarrow 0$ . No limite oposto, i.e.  $\theta \rightarrow \infty$ , as amplitudes e fases independem da concentração da mistura e possuem os mesmos valores encontrados no caso de gás único. Para valores intermediários de  $\theta$  o comportamento qualitativo das amplitudes e fases em  $x = 0$  é o mesmo que no caso de gás único mas, quantitativamente, essas quantidades são afetadas pela concentração da mistura.



Tabela 5.1: Amplitudes e fases em  $x = 0$  e comprimento de penetração da onda,  $C = 0, 1$ .

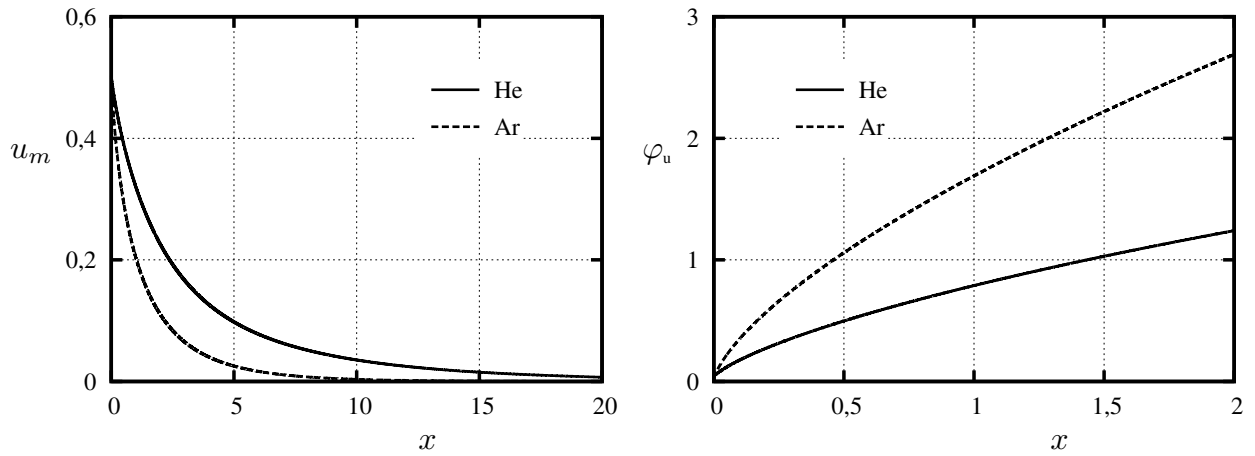
$\theta$	$C = 0, 1$				
	$u_m$	$\Pi_m$	$\varphi_u$	$-\varphi_p$	$\lambda$
0	0,5000	0,2755	0,0000	0,0000	8,176
0,01	0,5000	0,2755	0,0024	0,0018	8,044
0,1	0,5007	0,2753	0,0238	0,0182	7,064
1	0,5503	0,2632	0,1748	0,1602	3,547
5	0,7241	0,1993	0,2083	0,4065	1,749
10	0,7952	0,1609	0,1722	0,5005	1,302
20	0,8504	0,1253	0,1341	0,5752	0,956
50	0,9030	0,0863	0,0916	0,6469	0,653
$\infty$	1	$(2\theta)^{-1/2}$	0	$\pi/4$	$\frac{4,6051}{\sqrt{\theta}}$

Tabela 5.2: Amplitudes e fases em  $x = 0$  e comprimento de penetração da onda,  $C = 0, 5$ .

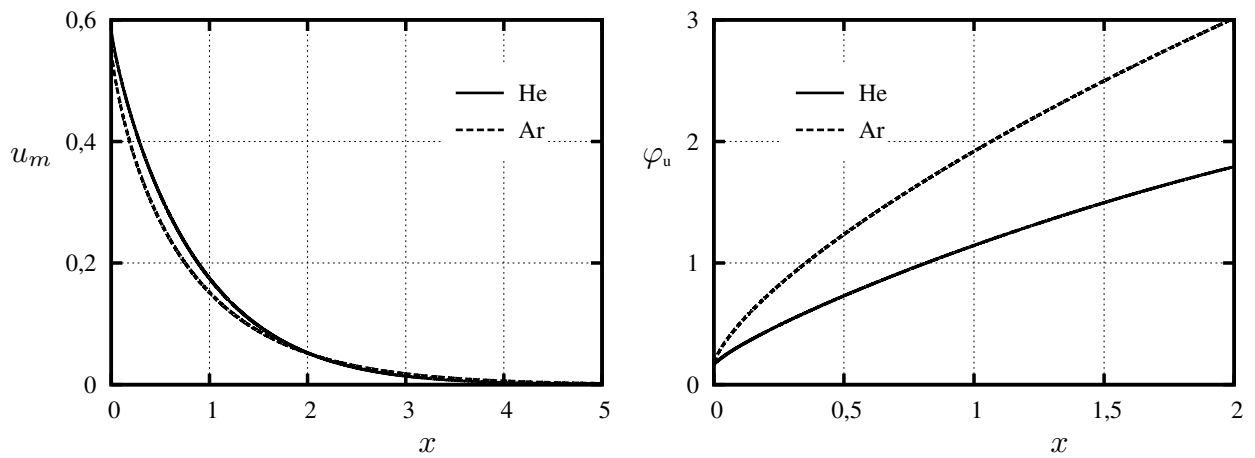
$\theta$	$C = 0, 5$				
	$u_m$	$\Pi_m$	$\varphi_u$	$-\varphi_p$	$\lambda$
0	0,5000	0,2504	0,0000	0,0000	4,612
0,01	0,5000	0,2504	0,0020	0,0017	4,597
0,1	0,5005	0,2502	0,0198	0,0165	4,495
1	0,5374	0,2403	0,1546	0,1392	3,207
5	0,7013	0,1895	0,2172	0,3742	1,684
10	0,7773	0,1554	0,1844	0,4736	1,267
20	0,8374	0,1222	0,1451	0,5545	0,936
50	0,8945	0,0847	0,0989	0,6318	0,612
$\infty$	1	$(2\theta)^{-1/2}$	0	$\pi/4$	$\frac{4,6051}{\sqrt{\theta}}$

Tabela 5.3: Amplitudes e fases em  $x = 0$  e comprimento de penetração da onda,  $C = 0, 9$ .

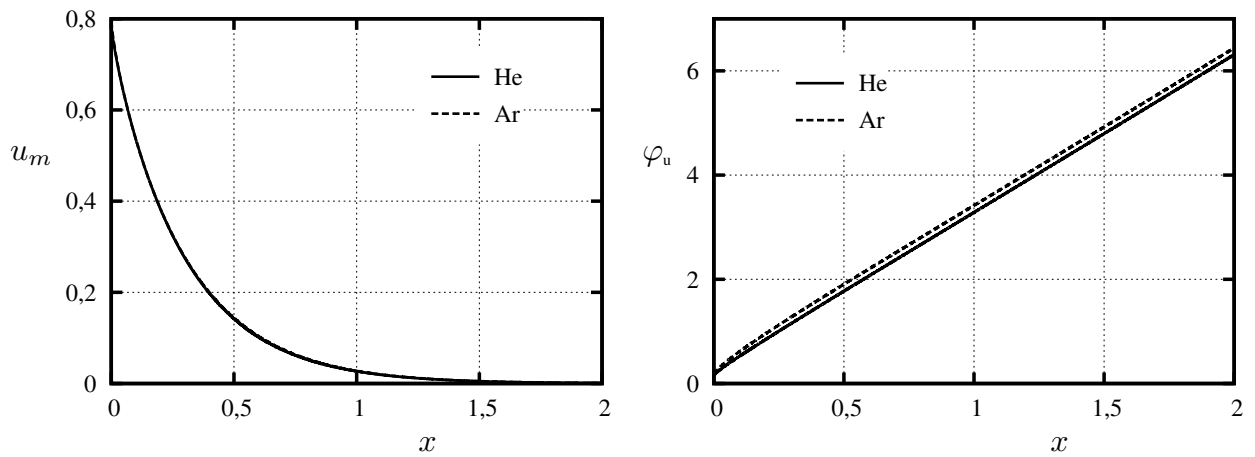
$\theta$	$C = 0, 9$				
	$u_m$	$\Pi_m$	$\varphi_u$	$-\varphi_p$	$\lambda$
0	0,5000	0,2490	0,0000	0,0000	9,100
0,01	0,5000	0,2490	0,0019	0,0018	8,918
0,1	0,5005	0,2488	0,0194	0,0177	7,605
1	0,5372	0,2369	0,1472	0,1489	3,213
5	0,6910	0,1860	0,2188	0,3654	1,653
10	0,7699	0,1538	0,1906	0,4634	1,248
20	0,8334	0,1216	0,1506	0,5469	0,932
50	0,8928	0,0847	0,1026	0,6294	0,617
$\infty$	1	$(2\theta)^{-1/2}$	0	$\pi/4$	$\frac{4,6051}{\sqrt{\theta}}$



(a) Parâmetro de oscilação  $\theta=0,1$

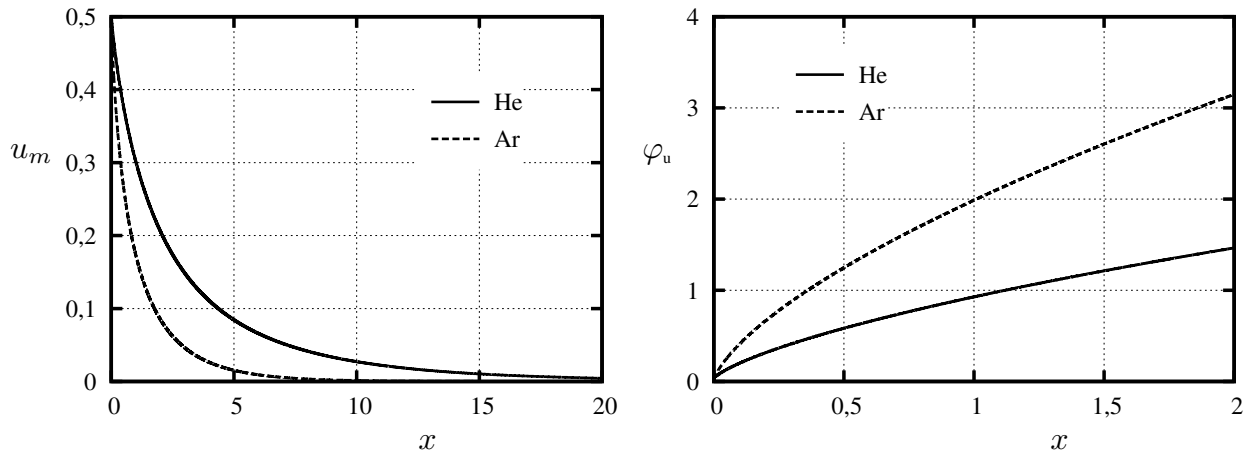


(b) Parâmetro de oscilação  $\theta=1$

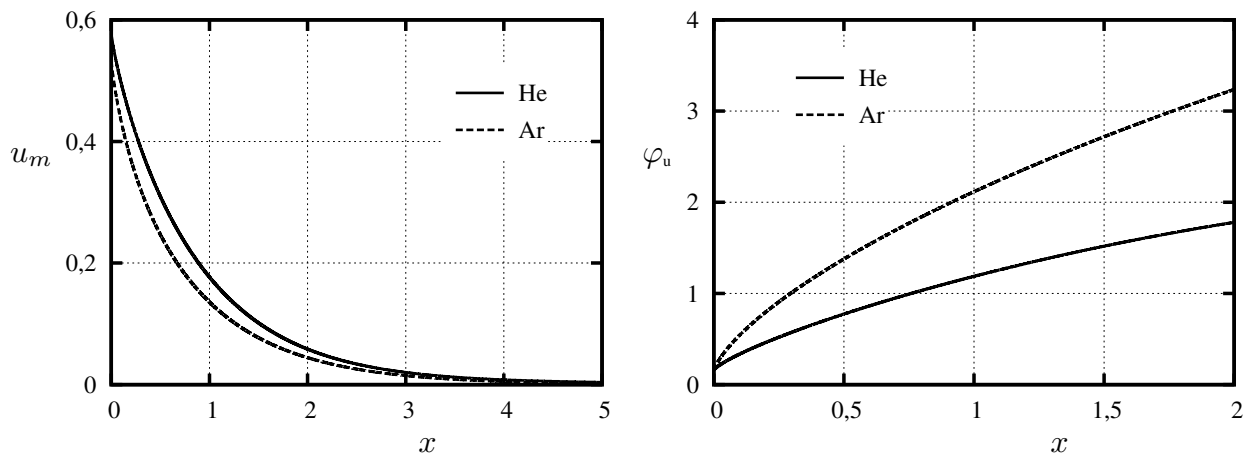


(c) Parâmetro de oscilação  $\theta=10$

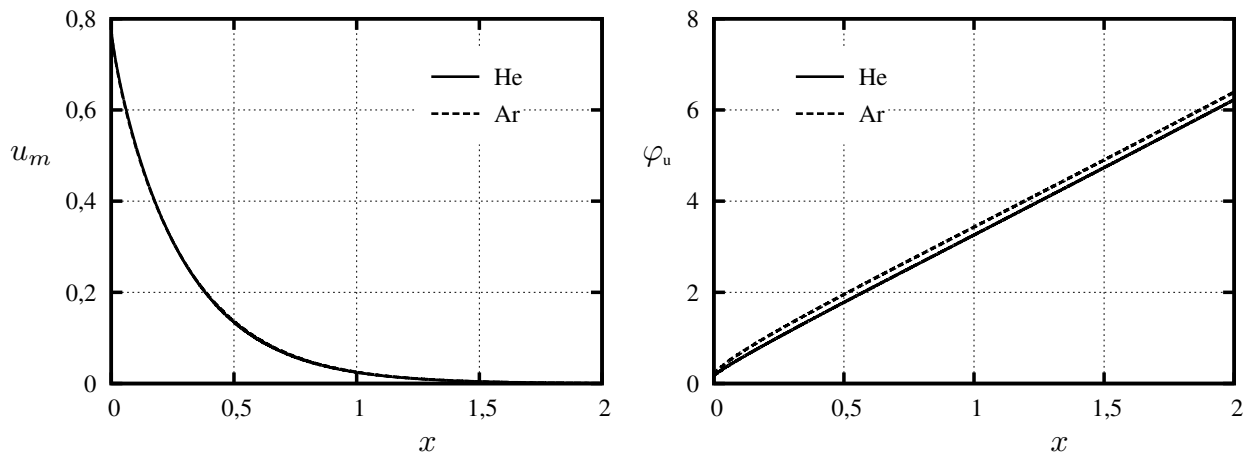
Figura 5.4: Amplitude e fase da velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração  $C = 0, 1$ .



(a) Parâmetro de oscilação  $\theta=0,1$



(b) Parâmetro de oscilação  $\theta=1$



(c) Parâmetro de oscilação  $\theta=10$

Figura 5.5: Amplitude e fase da velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração  $C = 0,5$ .

A amplitude da velocidade do gás varia de 0,5 a 1 à medida que o parâmetro de oscilação  $\theta$  varia de 0 até  $\infty$  e, nesse mesmo intervalo de variação de  $\theta$ , a amplitude da tensão de cisalhamento

$\Pi(x)$  varia de

$$\frac{C}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m_1}{m}} + \frac{(1-C)}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m_2}{m}}$$

até zero. A fase  $\varphi_u$  é igual a zero em ambos os limites  $\theta \rightarrow 0$  e  $\theta \rightarrow \infty$  enquanto que a fase  $\varphi_p$  varia de zero  $-\pi/4$  quando  $\theta$  varia de 0 até  $\infty$ . Para cada valor de concentração, o comprimento de penetração da onda tende a diminuir com o aumento de  $\theta$  e, no limite em que  $\theta \rightarrow \infty$ ,  $\lambda$  tende a  $4,6051/\sqrt{\theta}$ .

As Figuras 5.4 e 5.5 mostram os perfis da amplitude e fase da velocidade  $u_\alpha(x)$  dos constituintes da mistura Hélio-Argônio com concentração  $C=0,1$  e  $0,5$  e, em cada figura, três valores de  $\theta$  são considerados: 0,1; 1 e 10. Note que nessas figuras, para simplificar a notação, a amplitude e a fase dos constituintes da mistura são denotados por  $u_m$  e  $\varphi_u$ .

De acordo com essas figuras, nas proximidades da placa oscilatória há difusão dos constituintes da mistura. À medida que  $\theta$  aumenta a difusão tende a diminuir e, como mencionado na Seção 5.1, no limite em que  $\theta \rightarrow \infty$  a espessura da camada na qual há difusão é tão pequena que o efeito é desprezível.

# Capítulo 6

## Fluxo de Couette Oscilatório

O problema de fluxo de Couette oscilatório consiste num gás confinado entre duas placas planas e paralelas sendo que uma das placas oscila na direção longitudinal ao seu próprio plano enquanto a outra permanece estacionária. Esse problema é uma generalização do problema de Stokes, apresentado nos Capítulos 4 e 5, pois quando a distância de separação entre as placas é muito grande a influência da placa estacionária pode ser desprezada de modo que os resultados obtidos anteriormente são válidos para descrever o comportamento do gás.

Como mencionado no Capítulo 1, atualmente esse tipo de problema é de grande interesse pois existem muitas MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems) com partes móveis que podem oscilar e, conseqüentemente, perturbar o estado de equilíbrio do gás em contato com as mesmas. Similarmente ao problema de Stokes, é um problema que pode ser facilmente resolvido via equação de movimento de Navier-Stokes mas para que essa equação seja válida duas condições devem ser satisfeitas: (i) a frequência da oscilação deve ser muito menor que a frequência das colisões intermoleculares no gás e (ii) o livre caminho médio molecular deve ser muito pequeno quando comparado a um comprimento característico do domínio gasoso. Se essas duas condições não forem satisfeitas, o problema deve ser resolvido a nível cinético, ou seja, com base na equação de Boltzmann.

Neste trabalho o problema de fluxo de Couette oscilatório é resolvido para rarefação do gás e oscilação da placa arbitrários com base no modelo de Bhatnagar, Gross e Krook para a equação não-estacionária de Boltzmann. De acordo com os resultados apresentados no Capítulo 4, há uma excelente concordância entre os resultados obtidos via método de velocidades discretas e método dos momentos integrais. Portanto, devido ao fato de que o método dos momentos integrais exige o uso de muita memória computacional e tempo de CPU e ainda se restringe ao uso de espalhamento difuso na superfície, a solução do presente problema é feita via método de velocidades discretas. Porém, como mostrado no Capítulo 4, devido ao comportamento oscilatório da função de perturbação na velocidade molecular  $c_x$ , para utilizar o método de velocidades discretas visando obter resultados com alta precisão é necessário empregar um grande número de pontos de espaço de velocidade  $c_x$  e isso torna o método inviável do ponto de vista computacional. Assim, para resolver o problema de fluxo de Couette oscilatório uma nova metodologia é introduzida visando

diminuir o comportamento oscilatório da função de perturbação e assim diminuir o número de pontos no espaço de velocidade  $c_x$  necessários para obter resultados com a precisão desejada. Além disso, como a convergência do algoritmo tende a ficar muito lenta com o aumento dos parâmetros de oscilação e rarefação, um método de aceleração de convergência baseado em momentos de Hermite também é utilizado.

## 6.1 Formulação do problema e objetivo

Considera-se um gás monoatômico confinado entre duas placas planas, paralelas e infinitas e separadas por uma distância  $L'$ , como esquematizado na Figura 6.1. Uma das placas, localizada em  $x' = 0$  e com plano  $y'z'$ , oscila harmonicamente na direção longitudinal ao seu próprio plano (direção  $y'$ ) com frequência de oscilação  $\omega$ . A outra placa, localizada em  $x' = L'$ , é estacionária. A temperatura de ambas as placas é igual à temperatura de equilíbrio do gás, denotada por  $T_0$ .

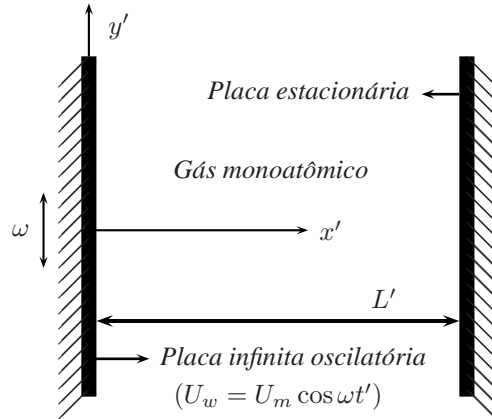


Figura 6.1: Esquema do problema de fluxo de Couette oscilatório

A velocidade da placa oscilatória é escrita da seguinte forma:

$$U_w(t') = \Re[U_m \exp(-i\omega t')], \quad (6.1)$$

onde  $U_m$  denota sua amplitude. Do mesmo modo que no problema de Stokes, assume-se que a amplitude  $U_m$  é muito menor que a velocidade mais provável  $v_m$  das partículas de gás, ou seja,

$$U_m \ll v_m, \quad v_m = \left( \frac{2k_B T_0}{m} \right)^{1/2}, \quad (6.2)$$

onde  $m$  é a massa atômica do gás,  $T_0$  é a temperatura do gás e  $k_B$  é a constante de Boltzmann. A oscilação da placa perturba o estado de equilíbrio do gás tal que, na direção  $y'$ , há um fluxo de gás caracterizado pela velocidade hidrodinâmica  $U_y(t', x')$  e pela componente do tensor pressão  $P_{xy}(t', x')$  (tensão de cisalhamento). A placa estacionária atua como um receptor de ondas. A oscilação da placa é totalmente estabelecida de modo que a dependência temporal é harmônica

tal que a velocidade hidrodinâmica e a tensão de cisalhamento do gás podem ser representadas da seguinte forma:

$$U_y(t', x') = \Re[\tilde{U}_y(x') \exp(-i\omega t')], \quad (6.3)$$

$$P_{xy}(t', x') = \Re[\tilde{P}_{xy}(x') \exp(-i\omega t')], \quad (6.4)$$

onde  $\tilde{U}_y(x')$  e  $\tilde{P}_{xy}(x')$  são quantidades complexas.

As quantidades adimensionais dadas em (4.5) e (4.6) e as representações dadas em (4.7) e (4.8) também são utilizadas na solução do problema em questão.

Na solução desse problema, além do parâmetro de oscilação  $\theta$ , também é necessário utilizar o parâmetro de rarefação  $\delta$ . Esses parâmetros são definidos da seguinte forma:

$$\theta = \frac{P}{\mu\omega}, \quad \delta = \frac{P L'}{\mu v_m}, \quad (6.5)$$

onde  $P$  e  $\mu$  são a pressão e viscosidade do gás e  $L'$  é a distância de separação entre as placas.

O objetivo é calcular as amplitudes e fases da velocidade hidrodinâmica e da tensão de cisalhamento do gás considerando valores arbitrários para ambos os parâmetros de oscilação  $\theta$  e rarefação  $\delta$ . Espalhamento difuso das partículas gasosas na superfície é assumido.

## 6.2 Regime de oscilação lenta e rarefação baixa

De acordo com os conceitos apresentados no Capítulo 2, neste regime, que corresponde ao limites  $\theta \rightarrow \infty$  e  $\delta \rightarrow \infty$ , além do livre caminho médio ser muito pequeno comparado com a distância de separação entre as placas, durante um ciclo da oscilação ocorrem muitas colisões entre as partículas de gás. Conseqüentemente, o meio gasoso pode ser considerado como um meio contínuo de modo que a equação de movimento de Navier-Stokes (2.14) pode ser utilizada para descrever o comportamento do gás devido à perturbação causada pela oscilação da placa. Esse regime também é usualmente chamado de hidrodinâmico.

Para este problema a equação de movimento de Navier-Stokes, dada em (2.14), é reescrita da seguinte forma:

$$2i\theta u + \frac{d^2 u}{dx^2} = 0. \quad (6.6)$$

Assumindo condições de contorno de não-deslizamento do gás em ambas as superfícies, ou seja, a velocidade do gás nas placas é igual à velocidade das mesmas, a equação (6.6) deve satisfazer as seguintes condições de contorno:

$$u(x) = \begin{cases} 1 & \text{em } x = 0, \\ 0 & \text{em } x = L, \end{cases} \quad (6.7)$$

onde  $L$  é distância adimensional entre as placas que, de acordo com (4.5), é definida como:

$$L = \frac{\omega}{v_m} L' = \frac{\delta}{\theta}. \quad (6.8)$$

Desse modo, a solução da equação (6.6) que satisfaz as condições de contorno dadas em (6.7) é a seguinte:

$$u(x) = \sin \left[ (1+i)\sqrt{\theta} \left( \frac{\delta}{\theta} - x \right) \right] \sin^{-1} \left[ (1+i) \frac{\delta}{\sqrt{\theta}} \right]. \quad (6.9)$$

A tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  é obtida via lei de Newton, i.e.

$$\Pi(x) = -\frac{1}{2\theta} \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{(1+i)}{2\sqrt{\theta}} \cos \left[ (1+i)\sqrt{\theta} \left( \frac{\delta}{\theta} - x \right) \right] \sin^{-1} \left[ (1+i) \frac{\delta}{\sqrt{\theta}} \right]. \quad (6.10)$$

As expressões (6.9) e (6.10) são válidas para  $\theta \rightarrow \infty$  e  $\delta \rightarrow \infty$ . Para estender o intervalo de validade da equação de movimento de Navier-Stokes é necessário utilizar condições de contorno de deslizamento do gás em ambas as placas. De acordo com (2.22), essas condições de contorno são escritas do seguinte modo:

$$u(x) = \begin{cases} 1 + \frac{\sigma_P}{\theta} \frac{du}{dx} & \text{em } x = 0, \\ -\frac{\sigma_P}{\theta} \frac{du}{dx} & \text{em } x = L, \end{cases} \quad (6.11)$$

onde  $\sigma_P$  é o coeficiente de deslizamento viscoso cujo valor, de acordo com [12], é 1,016 para o caso de espalhamento difuso das partículas gasosas na superfície.

A solução da equação (6.6) que satisfaz as condições de contorno de deslizamento dadas em (6.11) é a seguinte:

$$u(x) = \left\{ \sin \left[ (1+i)\sqrt{\theta} \left( \frac{\delta}{\theta} - x \right) \right] + (1+i) \frac{\sigma_P}{\sqrt{\theta}} \cos \left[ (1+i)\sqrt{\theta} \left( \frac{\delta}{\theta} - x \right) \right] \right\} G^{-1}, \quad (6.12)$$

onde

$$G = \left( 1 - 2i \frac{\sigma_P^2}{\theta} \right) \sin \left[ (1+i) \frac{\delta}{\sqrt{\theta}} \right] + 2(1+i) \frac{\sigma_P}{\sqrt{\theta}} \cos \left[ (1+i) \frac{\delta}{\sqrt{\theta}} \right]. \quad (6.13)$$

A tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  é dada por:

$$\Pi(x) = \left\{ \frac{(1+i)}{2\sqrt{\theta}} \cos \left[ (1+i)\sqrt{\theta} \left( \frac{\delta}{\theta} - x \right) \right] - i \frac{\sigma_P}{\theta} \sin \left[ (1+i)\sqrt{\theta} \left( \frac{\delta}{\theta} - x \right) \right] \right\} G^{-1}. \quad (6.14)$$

Para comparar as soluções analíticas obtidas com condições de contorno de não-deslizamento (6.9) e deslizamento (6.12), o perfil da amplitude da velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  versus distância  $x$  é mostrada no Figura 6.2 para alguns valores de  $\delta$  e  $\theta$ .

De acordo com a Figura 6.2, a diferença quantitativa entre os resultados obtidos via expressões (6.9) e (6.12) é significativa mas tende a diminuir à medida que os parâmetros  $\delta$  e  $\theta$  aumentam. Posteriormente, na seção de resultados, a solução numérica obtida via solução da equação cinética de BGK é comparada à solução analítica (6.12).

Nesse regime é interessante considerar dois casos limites:



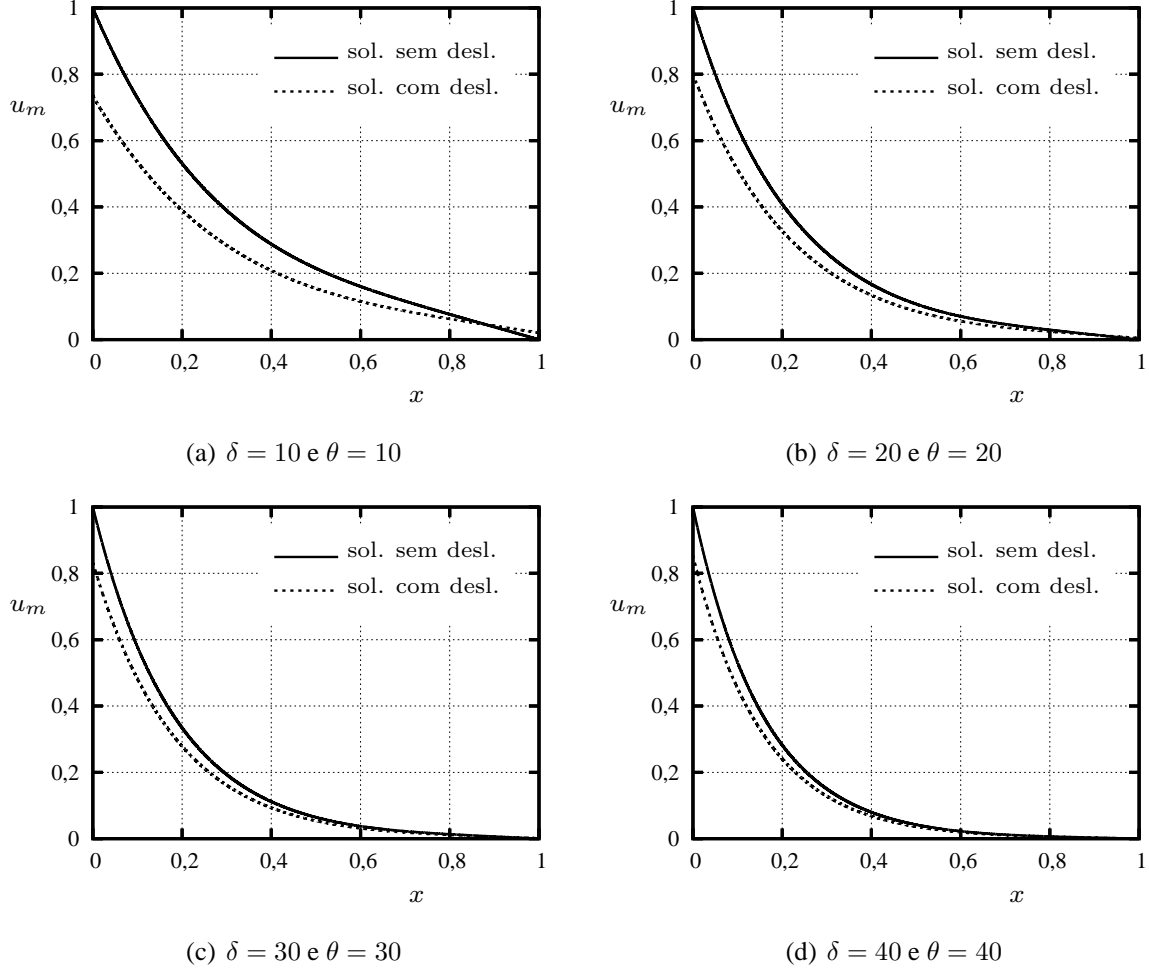


Figura 6.2: Comparação das soluções analíticas obtidas com condições de contorno de não-deslizamento e deslizamento do gás na superfície sólida.

- (i) O primeiro limite corresponde às situações nas quais  $\sqrt{\theta} \gg \delta \gg 1$ . Nesse limite as expressões (6.12) e (6.14) são expandidas em série de Taylor com relação ao parâmetro pequeno  $\delta/\sqrt{\theta}$  e, após desprezar os termos não lineares em  $\delta/\sqrt{\theta}$ , as seguintes expressões são obtidas:

$$u(x) = \left(1 - \frac{x}{L} + \frac{\sigma_p}{\delta}\right) \left(1 + \frac{2\sigma_p}{\delta}\right)^{-1}, \quad (6.15)$$

$$\Pi(x) = \frac{1}{2\delta} \left(1 + \frac{2\sigma_p}{\delta}\right)^{-1}. \quad (6.16)$$

Essas expressões são idênticas às obtidas para a velocidade e tensão de cisalhamento do gás no problema de Couette estacionário com deslizamento nas paredes, ou seja, quando  $\sqrt{\theta} \gg \delta$  o problema pode ser tratado como Couette estacionário.

- (ii) O segundo limite é oposto ao primeiro, ou seja,  $\delta \gg \sqrt{\theta} \gg 1$ . Do mesmo modo que no limite anterior, as expressões (6.12) e (6.14) são expandidas em séries de Taylor mas agora o parâmetro pequeno é  $\sqrt{\theta}/\delta$ . Após fazer a expansão e manter somente os termos principais,

as expressões obtidas para a velocidade  $u(x)$  e tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  correspondem às obtidas no problema de Stokes, que são em dadas em (4.20) e (4.21). Portanto, nesse limite a influência da placa estacionária pode ser desprezada e todos os resultados obtidos no Capítulo 4 para  $\theta \rightarrow \infty$  são válidos para descrever o comportamento do gás no problema de fluxo de Couette oscilatório.

### 6.3 Equação cinética

As equações utilizadas na Seção 4.5 do Capítulo 4 são válidas aqui. A única diferença é que agora, além da condição de contorno na placa oscilatória, há uma condição de contorno na placa estacionária, i.e. em  $x = L$ . Assim, para parâmetros  $\delta$  e  $\theta$  arbitrários a solução do problema tem por base a seguinte equação:

$$(\theta - i)\Phi + c_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \theta u, \quad (6.17)$$

onde a velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  é dada em (4.52).

A condição de contorno de espalhamento difuso em ambas as superfícies sólidas é dada por:

$$\Phi(x, c_x) = \begin{cases} 1, & \text{em } x = 0 \text{ e } c_x > 0, \\ 0, & \text{em } x = L \text{ e } c_x < 0. \end{cases} \quad (6.18)$$

Quando ambos os parâmetros de rarefação  $\delta$  e oscilação  $\theta$  tendem a zero (regime de oscilação rápida e rarefação alta) o problema pode ser resolvido analiticamente conforme mostrado na próxima seção.

Em outros regimes de rarefação do gás e oscilação da placa, a equação (6.17) deve ser resolvida numericamente.

### 6.4 Regime de oscilação rápida e rarefação alta

Quando  $\theta \rightarrow 0$  e  $\delta \rightarrow 0$  o problema é resolvido de forma analítica. Quando  $\theta \ll \delta \ll 1$  o termo de colisões que aparece na equação de Boltzmann pode ser desprezado já que nessa situação as colisões moleculares durante um ciclo da oscilação são desprezíveis. Portanto, a equação (6.17) se reduz a uma simples equação diferencial dada por:

$$-i\Phi + c_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \quad (6.19)$$

que satisfaz as condições de contorno dadas em (6.18).

A solução da equação (6.19) que satisfaz as condições de contorno dadas em (6.18) é a seguinte:

$$\Phi(x, c_x) = \begin{cases} \exp\left(\frac{ix}{c_x}\right), & c_x > 0 \\ 0, & c_x < 0. \end{cases} \quad (6.20)$$

Substituindo a solução (6.20) em (4.52) e (4.53) as seguintes expressões para a velocidade hidrodinâmica e tensão de cisalhamento do gás são obtidas:

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_0(-ix), \quad (6.21)$$

$$\Pi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_1(-ix), \quad (6.22)$$

onde as funções  $I_0$  e  $I_1$  são definidas em (4.43).

As expressões (6.21) e (6.22) correspondem às encontradas no Capítulo 4 quando  $\theta \rightarrow 0$ . Portanto, nas situações em que  $\theta \rightarrow 0$  a solução do problema de Couette oscilatório independe do parâmetro de rarefação  $\delta$ , ou seja, não há influência da placa estacionária na solução do problema.

No limite  $\delta \ll \theta \ll 1$ , a solução é obtida através da solução integral para a equação (6.17), a qual é obtida multiplicando a equação (6.17) por  $\exp[(\theta - i)x/c_x]$ , integrando-a na coordenada  $x$  e utilizando as condições de contorno dadas em (6.18). Assim, a seguinte solução integral para a equação (6.17) é obtida, a qual é válida para parâmetros  $\delta$  e  $\theta$  arbitrários:

$$\Phi(x, c_x) = \begin{cases} \exp\left[-(\theta - i)\frac{x}{c_x}\right] + \frac{\theta}{c_x} \int_0^x u(\xi) \exp\left[(\theta - i)\frac{\xi - x}{c_x}\right] d\xi, & c_x > 0, \\ -\frac{\theta}{c_x} \int_x^L u(\xi) \exp\left[(\theta - i)\frac{\xi - x}{c_x}\right] d\xi, & c_x < 0. \end{cases} \quad (6.23)$$

Como  $L = \delta/\theta$  e a coordenada  $x \leq L$ , quando  $\delta \ll \theta$ ,  $L \rightarrow 0$  de modo que as integrais que aparecem em (6.23) também tendem a zero e, portanto, podem ser desprezadas. Além disso, o termo exponencial tende a um. Conseqüentemente, a solução da equação (6.23) se reduz a:

$$\Phi(x, c_x) = \begin{cases} 1, & c_x > 0, \\ 0, & c_x < 0. \end{cases} \quad (6.24)$$

Após substituir a solução (6.24) nas expressões (4.52) e (4.53) para a velocidade hidrodinâmica e tensão de cisalhamento do gás, obtém-se que:

$$u(x) = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad \Pi(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}, \quad (6.25)$$

que correspondem aos valores encontrados para o problema de fluxo de Couette estacionário quando a rarefação do gás é alta, i.e.  $\delta \rightarrow 0$ .

Portanto, no limite  $\delta \ll \theta \ll 1$ , a velocidade e a tensão de cisalhamento do gás são independentes da coordenada  $x$  e de ambos os parâmetros  $\delta$  e  $\theta$ . Além disso, nesse limite os resultados obtidos para fluxo de Couette estacionário são válidos.

Note que no limite oposto, i.e.  $\theta \ll \delta \ll 1$ ,  $L$  não é pequeno mas uma análise dos termos integrais que aparecem na solução (6.23) mostra que os termos proporcionais às integrais tendem a zero mesmo quando  $L$  é grande. Além disso, o termo exponencial tende a  $\exp(ix/c_x)$ . Portanto, quando  $\theta \ll \delta \ll 1$ , a solução (6.23) tende à solução (6.20).

## 6.5 Regime de transição

A fim de considerar valores arbitrários para os parâmetros  $\delta$  e  $\theta$ , a equação (6.17) é resolvida numericamente via método de velocidades discretas. Porém, visando diminuir o comportamento oscilatório da função  $\Phi(x, c_x)$  na variável  $c_x$ , um processo de otimização é utilizado. Essa otimização tem por base a divisão da função de perturbação  $\Phi(x, c_x)$  em duas partes, ou seja,

$$\Phi(x, c_x) = \Phi_0(x, c_x) + \tilde{\Phi}(x, c_x), \quad (6.26)$$

onde  $\Phi_0(x, c_x)$  satisfaz a seguinte equação diferencial

$$(\theta - i)\Phi_0 + c_x \frac{\partial \Phi_0}{\partial x} = 0, \quad (6.27)$$

que satisfaz as condições de contorno:

$$\Phi_0(x, c_x) = \begin{cases} 1 & \text{em } x = 0 \text{ e } c_x > 0, \\ 0 & \text{em } x = L \text{ e } c_x < 0. \end{cases} \quad (6.28)$$

A solução da equação diferencial (6.27) que satisfaz as condições de contorno dadas em (6.28) é a seguinte:

$$\Phi_0(x, c_x) = \begin{cases} \exp\left[-(\theta - i)\frac{x}{c_x}\right], & c_x > 0, \\ 0, & c_x < 0. \end{cases} \quad (6.29)$$

Portanto, substituindo a representação (6.26) na equação cinética (6.17) e utilizando (6.27), a seguinte equação é obtida para a função  $\tilde{\Phi}(x, c_x)$ :

$$(\theta - i)\tilde{\Phi} + c_x \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial x} = \theta u. \quad (6.30)$$

Do mesmo modo, após substituir (6.26) nas condições de contorno dadas em (6.18) e utilizar (6.28), as seguintes condições de contorno são obtidas para a função  $\tilde{\Phi}(x, c_x)$ :

$$\tilde{\Phi}(x, c_x) = \begin{cases} 0 & \text{em } x = 0 \text{ e } c_x > 0, \\ 0 & \text{em } x = L \text{ e } c_x < 0. \end{cases} \quad (6.31)$$

A quantidade  $u(x)$  que aparece em (6.30) também é dividida em duas partes, i.e.

$$u(x) = \tilde{u}(x) + u_0(x), \quad (6.32)$$

onde

$$\tilde{u}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int \exp(-c_x^2) \tilde{\Phi}(x, c_x) dc_x, \quad (6.33)$$

$$u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_0 [(\theta - i)x]. \quad (6.34)$$

Similarmente,

$$\Pi(x) = \Pi_0(x) + \tilde{\Pi}(x), \quad (6.35)$$

onde

$$\tilde{\Pi}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int c_x \exp(-c_x^2) \tilde{\Phi}(x, c_x) \, dc_x, \quad (6.36)$$

$$\Pi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_1 [(\theta - i)x]. \quad (6.37)$$

As funções  $I_0$  e  $I_1$ , que aparecem nas equações (6.34) e (6.37), são definidas em (4.43).

Portanto, para determinar a velocidade  $u(x)$  e a tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  é necessário resolver a equação (6.30) e determinar somente  $\tilde{u}(x)$  e  $\tilde{\Pi}(x)$  já que as quantidades  $u_0(x)$  e  $\Pi_0(x)$  são conhecidas analiticamente.

A equação cinética (6.30) é resolvida via método de velocidades discretas mas, como a convergência do esquema numérico tende a ficar muito lenta à medida que os parâmetros  $\delta$  e  $\theta$  aumentam, o método de aceleração de convergência proposto por Valourgeorgis e Naris [96] é utilizado. Maiores detalhes sobre o método de aceleração de convergência podem ser encontrados no Apêndice B. Nesse método a equação cinética (6.30) é reescrita em termos dos momentos de Hermite, definidos como

$$F_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int H_n(c_x) \exp(-c_x^2) \tilde{\Phi}(x, c_x) \, dc_x, \quad (6.38)$$

onde  $H_n(c_x)$  denota o polinômio de Hermite de ordem  $n$ . Quando a equação cinética é reescrita em termos dos momentos de Hermite a equação passa a ser chamada de equação sintética. No presente trabalho um esquema de aceleração  $H_1$  é utilizado, ou seja, um esquema no qual os momentos de Hermite de ordem zero e um são acelerados de modo que duas equações sintéticas são utilizadas. A primeira equação sintética é obtida multiplicando a equação (6.30) por  $H_0 \exp(-c_x^2)/\sqrt{\pi}$ , onde  $H_0 = 1$ , e integrando-a na variável  $c_x$ . Similarmente, a segunda equação sintética é obtida multiplicando a equação (6.30) por  $H_1 \exp(-c_x^2)/\sqrt{\pi}$ , onde  $H_1 = 2c_x$ , e integrando-a na variável  $c_x$ . Assim, as equações sintéticas são as seguintes:

$$\frac{dF_1}{dx} = 2iF_0 + 2\theta u_0, \quad (6.39)$$

$$\frac{dF_0}{dx} + (\theta - i)F_1 = -\frac{1}{2} \frac{dF_2}{dx}, \quad (6.40)$$

onde  $u_0$  é dado em (6.34). Note que, de acordo com (6.33),  $\tilde{u} = F_0$ . Combinando as equações (6.39) e (6.40), a seguinte equação diferencial de segunda ordem é obtida:

$$\frac{d^2 \tilde{u}}{dx^2} + 2(1 + i\theta)\tilde{u} = -2\theta(\theta - i)u_0 - \frac{1}{2} \frac{d^2 F_2}{dx^2}. \quad (6.41)$$

Agora, a solução do problema consiste nas seguintes etapas:

- (i) Um valor inicial arbitrário é assumido para a velocidade  $\tilde{u}(x)$ ;

(ii) A equação cinética (6.30) é resolvida utilizando um esquema de diferenças finitas centrais tal que a função  $\tilde{\Phi}(x_k, c_{xj})$  é calculada da seguinte forma:

$$\tilde{\Phi}_{k,j} = \left\{ \frac{\theta}{2}(u_{0k} + \tilde{u}_k + u_{0_{k-1}} + \tilde{u}_{k-1}) - \left[ \frac{(\theta - i)}{2} - \frac{c_{xj}}{\Delta x} \right] \tilde{\Phi}_{k-1,j} \right\} \left[ \frac{(\theta - i)}{2} + \frac{c_{xj}}{\Delta x} \right]^{-1}; \quad (6.42)$$

(iii) O momento de Hermite  $F_2(x)$ , definido em (6.38), é calculado com a utilização da função  $\tilde{\Phi}(x, c_x)$  calculada no item anterior;

(iv) A equação diferencial de segunda ordem (6.41) é resolvida utilizando um algoritmo para solução de sistemas lineares tridiagonais de modo a obter o momento  $\tilde{u}$ ;

(v) O critério de convergência é verificado através da comparação do valor de  $\tilde{u}$  em iterações sucessivas. Se o critério de convergência não for satisfeito, volta-se à etapa (ii) e, utilizando o valor de  $\tilde{u}$  calculado na iteração anterior, o processo iterativo é repetido.

A Figura 6.3 mostra os perfis das funções  $\Phi(x, c_x)$  e  $\tilde{\Phi}(x, c_x)$  versus velocidade  $c_x$  em  $x = 0, 1$  para parâmetro de rarefação  $\delta = 1$  e parâmetro de oscilação  $\theta = 0, 1$ . Essa figura mostra

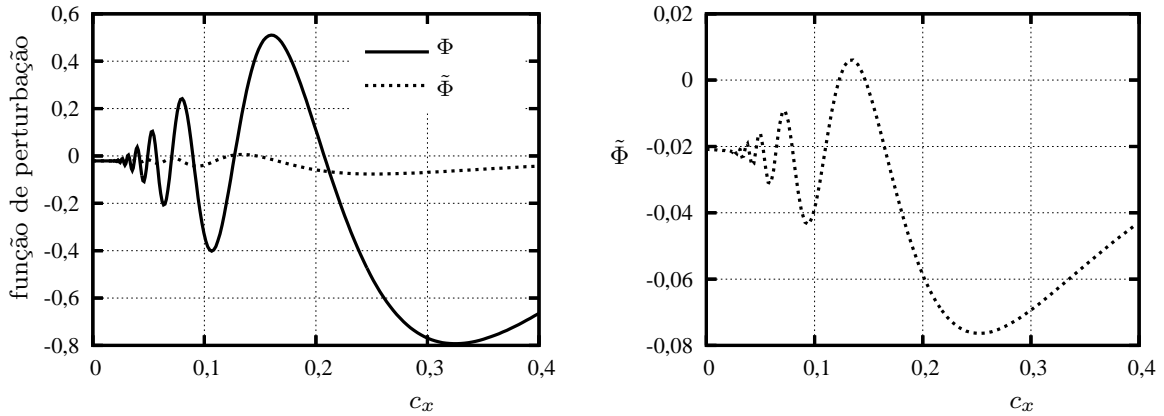


Figura 6.3: Perfis das funções  $\Phi$  e  $\tilde{\Phi}$  vs  $c_x$  em  $x = 0, 1$  quando  $\delta = 1$  e  $\theta = 0, 1$ .

que o processo de otimização (divisão da função  $\Phi$  em duas partes) fez com que a maior parte da dependência oscilatória da função  $\Phi$  em  $c_x$  seja devida à função  $\Phi_0$  já que a dependência oscilatória da função  $\tilde{\Phi}$  em  $c_x$  é bem menor comparada à dependência de  $\Phi$  em  $c_x$ . Conseqüentemente, o número de pontos no espaço de velocidade  $c_x$  necessários para resolver a equação (6.30) com precisão de 0,1% é significativamente menor que o utilizado anteriormente na solução do problema de Stokes. Com o uso do processo de otimização, resultados com precisão de 0,1% são obtidos com parâmetros  $N_x = 10000$  e  $N_c = 100$ , ou seja,  $N_c$  diminuiu uma ordem de grandeza em relação ao número de pontos utilizados no Capítulo 4.

O processo de aceleração de convergência também permitiu a diminuição do número de iterações de modo significativo quando os parâmetros  $\delta$  e  $\theta$  são grandes.

## 6.5.1 Resultados numéricos e discussão

Primeiramente, uma comparação entre os resultados obtidos no presente trabalho com os apresentados nas Figuras 5-a e 5-b da Ref. [85] é realizada. Essa comparação é mostrada na Figura 6.4, na qual as linhas representam os resultados obtidos no presente trabalho enquanto que os símbolos representam os resultados obtidos por Park *et al.* [85]. Nessa figura, a coordenada  $x$  está dividida por  $L = \delta/\theta$  pois, na Ref. [85], a coordenada adimensional  $x$  é definida como  $x'/L'$ , onde  $L'$  é a distância de separação entre as placas enquanto que, no presente trabalho, a coordenada adimensional  $x$  é definida como  $x = \omega x'/v_m$ .

Na Ref. [85] os resultados são apresentados em função do número de Stokes, denotado por  $\beta$  e definido em (2.11), e do número de Knudsen, Kn. Se  $\beta \ll 1$  o regime pode ser tratado como estacionário mas, no limite oposto, i.e.  $\beta \gg 1$ , a solução do problema é totalmente diferente da solução estacionária.

As relações entre os parâmetros utilizados na Ref. [85] com os parâmetros utilizados no presente trabalho (parâmetros de oscilação  $\theta$  e rarefação  $\delta$ ) são as seguintes:

$$\beta = \sqrt{\frac{2}{\theta}}\delta, \quad \delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\text{Kn}}. \quad (6.43)$$

No presente trabalho o número de Stokes não é utilizado pois este número não representa o limite de aplicabilidade das equações de Navier-Stokes.

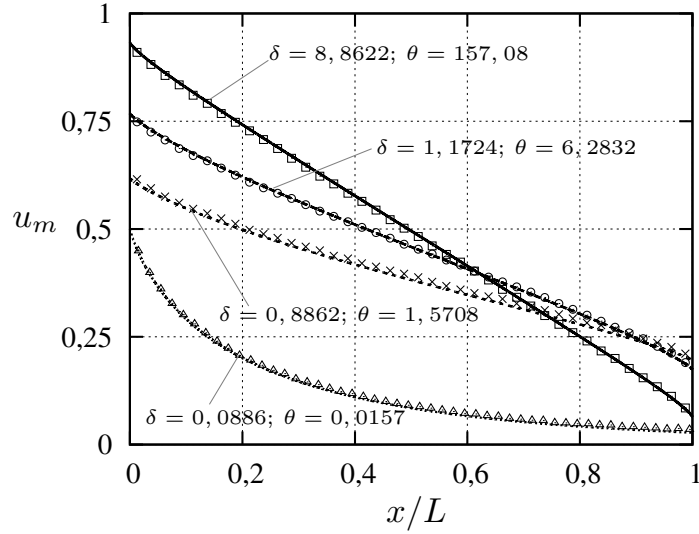
De acordo com a Figura 6.4, a concordância entre os resultados obtidos no presente trabalho via solução numérica da equação cinética de BGK com os resultados apresentados na Ref. [85] obtidos via método de Monte Carlo é excelente.

De acordo com [11], em muitas aplicações práticas relacionadas ao fluxo de Couette oscilatório, o interesse é determinar o fator de qualidade  $Q$ , o qual é definido como a razão entre a energia total do sistema e a energia dissipada devido aos efeitos viscosos. A energia dissipada por ciclo da oscilação, denotada por  $\mathcal{E}_d$ , e que corresponde ao trabalho realizado pelas forças viscosas, é calculada da seguinte forma:

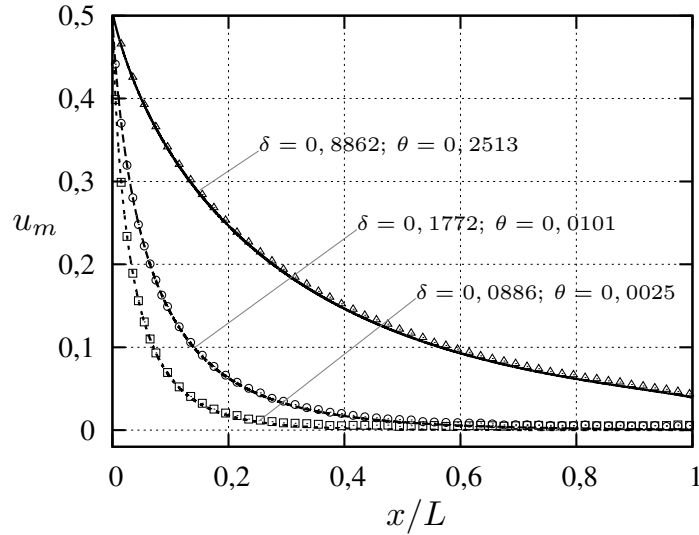
$$\mathcal{E}_d = \frac{1}{\omega} \int_0^{2\pi} P_{xy}(0, t') U_y(0, t') d(\omega t'),$$

onde  $P_{xy}$  e  $U_y$  são, respectivamente, a tensão de cisalhamento e a velocidade do gás. Portanto, o cálculo dessas duas quantidades em função dos parâmetros de oscilação e rarefação é de fundamental importância para a determinação do fator de qualidade. Por esse motivo, nas Tabelas 6.1 e 6.2, a amplitude e a fase da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  são apresentadas em ambas as placas para vários valores de parâmetro de rarefação  $\delta$  e considerando parâmetro de oscilação  $\theta = 0, 1; 1; 10$  e  $50$ . Os perfis das amplitudes de  $\Pi(x)$  e  $u(x)$  em  $x = 0$  em função dos parâmetros de oscilação e rarefação são mostrados posteriormente na Figura 6.5.

Em ambas as Tabelas 6.1 e 6.2 duas colunas com os resultados obtidos via equação (6.14), que corresponde à solução da equação de movimento de Navier-Stokes com condições de contorno de deslizamento nas placas, foram acrescentadas visando comparar os resultados numéricos



(a) corresponde à Figura 5-a na Ref. [85]



(b) corresponde à Figura 5-b na Ref. [85]

Figura 6.4: Comparação dos resultados obtidos no presente trabalho (linhas) com resultados obtidos na Ref. [85] via método de Monte Carlo (símbolos).

e analíticos e assim verificar o intervalo de parâmetros  $\delta$  e  $\theta$  a partir do qual a equação (6.14) pode ser utilizada. Além disso, resultados obtidos via equações (6.16) e (4.21), que correspondem à solução da equação de Navier-Stokes nos limites  $\sqrt{\theta} \gg \delta$  e  $\sqrt{\theta} \ll \delta$ , também foram acrescentados na Tabela 6.1.

Na literatura existem muitos artigos referentes ao problema de fluxo de Couette estacionário e, visando verificar o intervalo de  $\delta$  e  $\theta$  em que a solução estacionária é válida para descrever o comportamento do gás no problema de fluxo de Couette oscilatório, na Tabela 6.1 uma coluna com resultados obtidos via solução da equação cinética estacionária de BGK, e.g. [97, 98], é acrescentada.



No Capítulo 4 o comprimento de penetração da onda,  $\lambda$ , definido como a distância  $x$  onde a amplitude da velocidade do gás decai a 1% da amplitude da velocidade da placa, foi apresentado. Na Tabela 4.1 o comprimento de penetração da onda é dado para os valores de  $\theta$  considerados nas Tabelas 6.1 e 6.2. A placa estacionária está localizada em  $x = L = \delta/\theta$ . Consequentemente, para cada valor de  $\theta$  é suficiente realizar os cálculos numéricos até um valor de parâmetro de rarefação  $\delta$  correspondendo a uma distância  $x$  um pouco maior que o comprimento de penetração dado na Tabela 4.1, ou seja, até um valor de  $x$  que garante que a amplitude da velocidade do gás é menor que  $0,01U_m$ , onde  $U_m$  denota a amplitude da velocidade da placa oscilatória.

Também é importante notar que, como a placa estacionária está localizada em  $x=L$ , o ato de variar um dos parâmetros e manter o outro fixo corresponde à situação de aproximação ou afastamento entre as placas.

Quando a distância de separação entre as placas é muito grande, i.e.  $L \rightarrow \infty$ , o problema tende ao problema de Stokes tratado no Capítulo 4 pois a influência da placa estacionária na solução do problema é desprezível. Quanto menor o afastamento entre as placas maior a influência da placa estacionária na solução do problema.

De acordo com os dados apresentados nas Tabelas 6.1 e 6.2 e também na Figura 6.5, observa-se que:

### I. Placa oscilatória ( $x = 0$ )

- (i) Fixando o parâmetro  $\theta$  e variando  $\delta$ , observa-se que a amplitude  $\Pi_m$  tem um comportamento não monótono, o qual pode ser melhor visualizado na Figura 6.5, na qual  $L = \delta/\theta$ .

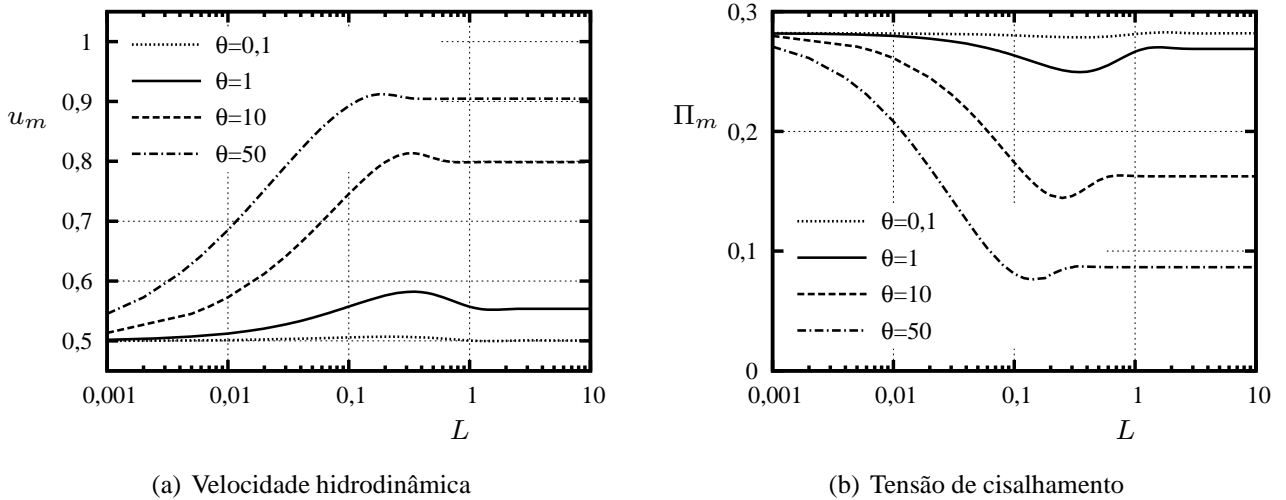


Figura 6.5: Amplitude na placa oscilatória em função dos parâmetros  $\theta$  e  $\delta$ .

De acordo com a Figura 6.5, para cada valor de  $\theta$  existe um valor limite para  $\delta$  acima do qual as amplitudes  $u_m$  e  $\Pi_m$  na placa oscilatória tendem a um valor constante. Quando o parâmetro de rarefação é menor que esse valor limite a amplitude não é mais constante e apresenta um perfil dependente de  $\delta$ . Os valores constantes de  $u_m$  e  $\Pi_m$  correspondem aos mesmos valores encontrados para o problema de Stokes. O valor limite de  $\delta$  está associado

ao comprimento de penetração da onda, ou seja, quando a distância  $L = \delta/\theta$  é maior que o comprimento de penetração da onda, i.e.  $L > \lambda$ , os efeitos de interferência da placa estacionária são desprezíveis. Também é importante notar que a amplitude  $u_m$  possui um ponto de máximo no intervalo  $0.1\theta \leq \delta \leq \theta$ , enquanto que a amplitude  $\Pi_m$  possui um ponto de mínimo no mesmo intervalo. Esse comportamento de  $u_m$  e  $\Pi_m$  em função dos parâmetros  $\delta$  e  $\theta$  mostra a importância de considerar a influência da placa estacionária na solução do problema.

- (ii) Similarmente à amplitude  $\Pi_m$ , para um valor fixo de  $\theta$ , a fase  $\varphi_p$  também apresenta um comportamento não monótono no parâmetro  $\delta$ . A partir de um determinado valor de parâmetro de rarefação  $\delta$  (valor limite), a fase também se torna constante com valor idêntico ao encontrado no problema de Stokes. Apesar dos dados numéricos obtidos para a fase da velocidade  $u(x)$  não serem apresentados, o mesmo comportamento também é observado para  $\varphi_v$ .
- (iii) Quando  $\theta = 50$ , à medida que o parâmetro de rarefação  $\delta$  aumenta, os resultados numéricos obtidos para  $\Pi_m$  e  $\varphi_p$  tendem aos analíticos obtidos via expressão (6.14). Nos limites  $\sqrt{\theta} \gg \delta$  e  $\sqrt{\theta} \ll \delta$ , os resultados numéricos tendem aos obtidos via expressões (6.16) e (4.21). Portanto, dependendo da precisão desejada nos cálculos numéricos, a equação de movimento de Navier-Stokes com condições de contorno de deslizamento já pode ser utilizada quando  $\theta > 1$  e  $\delta > 1$ .
- (iv) De acordo com (6.22), quando  $\theta \rightarrow 0$  e  $\delta \rightarrow 0$ , a amplitude  $\Pi_m$  na placa oscilatória é igual a  $1/(2\sqrt{\pi})$  e, de acordo com os dados apresentados na Tabela 6.1 isso se confirma numericamente, ou seja, à medida que  $\delta$  e  $\theta$  tendem a zero,  $\Pi_m$  tende ao valor  $1/(2\sqrt{\pi})$ .
- (v) Uma comparação com os resultados obtidos no regime estacionário mostra que quando  $\theta$  é grande e  $\delta \ll \theta$  os resultados obtidos para o problema de Couette estacionário são válidos para descrever o comportamento do gás no problema de Couette oscilatório. Isso equivale a dizer que os resultados para o caso estacionário são válidos quando a distância  $L'$  de separação entre as placas é muito menor que o comprimento  $\lambda_0$  da onda, i.e.  $L' \ll \lambda_0$ .

## II. Placa estacionária

- (i) Para  $\delta$  fixo (pressão e distância de separação entre as placas fixos), a amplitude  $\Pi_m$  sempre aumenta com o aumento do parâmetro de oscilação  $\theta$  até atingir um valor constante enquanto que a fase  $\varphi_p$  tende a diminuir. Nessa situação, o aumento de  $\theta$  equivale ao aumento do comprimento da onda e, conseqüentemente, à diminuição da fase e aumento da amplitude.
- (ii) Fixando  $\theta$  e variando o parâmetro de rarefação  $\delta$ , a amplitude  $\Pi_m$  tende a diminuir enquanto que a fase  $\varphi_p$  tende a aumentar. Este caso corresponde ao afastamento entre as placas e, quanto maior a distância de separação entre as placas, menor o número de colisões gás-superfície tal que a taxa de transferência de momento é menor e, portanto, a amplitude  $\Pi_m$  é menor.

Tabela 6.1: Amplitude  $\Pi_m$  da tensão de cisalhamento do gás em  $x = 0$  e  $x = L$ .

$\delta$	$\Pi_m$										$\theta \rightarrow \infty$		
	$\theta = 0, 1$		$\theta = 1$		$\theta = 10$		$\theta = 50$		Eq. (6.14)				
	$\lambda = 7, 5355$	$x = L$	$\lambda = 3, 6010$	$x = L$	$\lambda = 1, 3080$	$x = L$	$\lambda = 0, 6210$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$			
0	0,2821	0,2821	0,2821	0,2821	0,2821	0,2821	0,2821	0,2821	0,2821	0,2461	0,2461	0,2821	0,2461
0,01	0,2801	0,2754	0,2797	0,2796	0,2797	0,2797	0,2797	0,2797	0,2797	0,2449	0,2449	0,2797	0,2449
0,05	0,2788	0,2351	0,2714	0,2697	0,2709	0,2708	0,2708	0,2708	0,2708	0,2402	0,2402	0,2708	0,2402
0,1	0,2813	0,1819	0,2634	0,2580	0,2612	0,2611	0,2612	0,2612	0,2612	0,2345	0,2345	0,2612	0,2345
0,5	0,2819	0,0383	0,2521	0,1797	0,2093	0,2078	0,2084	0,2083	0,2083	0,1975	0,1975	0,2083	0,1975
1	0,2819	0,0073	0,2665	0,1114	0,1741	0,1679	0,1697	0,1694	0,1694	0,1651	0,1649	0,1695	0,1649
2	0,2819	0,0005	0,2696	0,0419	0,1465	0,1196	0,1262	0,1249	0,1249	0,1250	0,1238	0,1252	0,1240
4	0,2819	0,0000	0,2688	0,0059	0,1531	0,0654	0,0888	0,0821	0,0821	0,0885	0,0821	0,0830	0,0829
6	-	-	0,2688	0,0007	0,1622	0,0345	0,0774	0,0600	0,0600	0,0772	0,0602	0,0623	0,0623
8	-	-	-	-	0,1632	0,0178	0,0770	0,5868	0,5868	0,0768	0,0460	0,0498	0,0498
10	-	-	-	-	0,1627	0,0091	0,0803	0,0351	0,0351	0,0803	0,0354	0,0416	0,0416
15	-	-	-	-	0,1625	0,0017	0,0865	0,0177	0,0177	0,0867	0,0181	0,0294	0,0294
20	-	-	-	-	0,1625	0,0003	0,0870	0,0087	0,0087	0,0871	0,0089	0,0227	0,0227
30	-	-	-	-	-	-	0,0866	0,0021	0,0021	0,0867	0,0022	0,0156	0,0156
40	-	-	-	-	-	-	0,0866	0,0005	0,0005	0,0868	0,0005	0,0119	0,0119
50	-	-	-	-	-	-	0,0866	0,0001	0,0001	0,0868	0,0096	0,0096	0,0096
Eq. (4.21)	0,4220	0	0,3131	0	0,1644	0	0,0868	0	0				

<sup>a</sup> Refs. [97, 98], solução da equação cinética de BGK para fluxo de Couette estacionário.

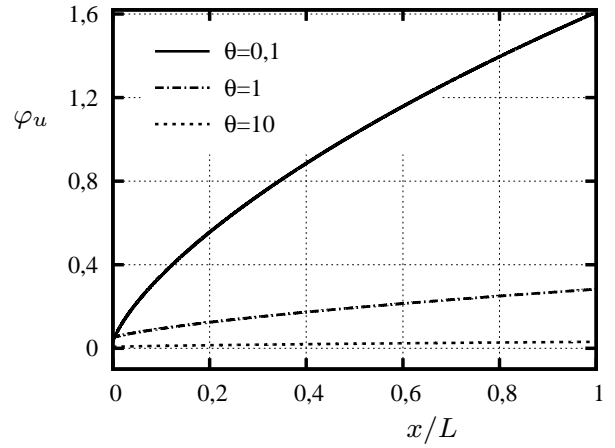
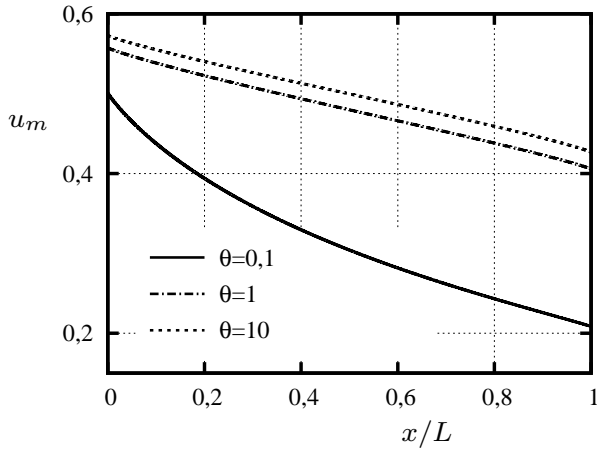
Tabela 6.2: Fase  $\varphi_p$  da tensão de cisalhamento do gás em  $x = 0$  e  $x = L$ .

$\delta$	$\varphi_p$									
	$\theta = 0, 1$		$\theta = 1$		$\theta = 10$		$\theta = 50$		Eq. (6.14) $\theta = 50$	
	$\lambda = 7, 5355$	$\lambda = 3, 6010$	$\lambda = 1, 3080$	$\lambda = 0, 6210$	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$		
	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$
0,01	-0,0025	0,1647	-0,0004	0,0173	0,0000	0,0017	0,0000	0,0003	-0,0002	0,0002
0,05	-0,0192	0,7026	-0,0072	0,0831	-0,0008	0,0084	-0,0002	0,0017	-0,0010	0,0010
0,1	-0,0248	1,2514	-0,0222	0,1608	-0,0026	0,0165	-0,0005	0,0033	-0,0021	0,0021
0,5	-0,0190	4,2781	-0,1590	0,7137	-0,0381	0,0812	-0,0077	0,0163	-0,0128	0,0125
1	-0,0188	6,9678	-0,1868	1,3051	-0,1158	0,1719	-0,0244	0,0346	-0,0314	0,0292
2	-0,0188	11,188	-0,1660	2,2782	-0,3124	0,3936	-0,0783	0,0805	-0,0864	0,0740
4	-0,0188	17,957	-0,1662	3,7228	-0,5199	0,9562	-0,2496	0,2114	-0,2577	0,2050
6	-	-	-0,1662	4,6309	-0,5226	1,5723	-0,4446	0,3921	-0,4538	0,3869
8	-	-	-	-	-0,5082	2,1837	-0,5868	0,6157	-0,5976	0,6123
10	-	-	-	-	-0,5053	2,7873	-0,657	0,8712	-0,6680	0,8701
15	-	-	-	-	-0,5063	4,3073	-0,6686	1,5716	-0,6792	1,5778
20	-	-	-	-	-0,5063	5,8146	-0,6516	2,2796	-0,6614	2,2929
30	-	-	-	-	-	-	-0,6504	3,6806	-0,6603	3,7072
40	-	-	-	-	-	-	-0,6504	5,0813	-0,6604	5,1214
50	-	-	-	-	-	-	-0,6504	6,4821	-0,6604	6,5356
Eq. (4.21)	-0,1339	-	-0,3186	-	-0,5469	-	-0,6604	-	-	-

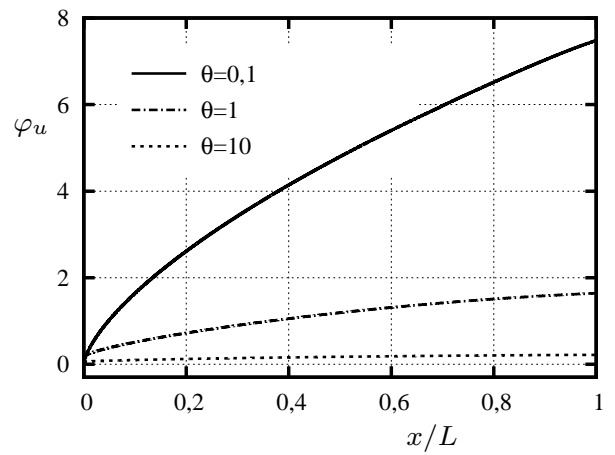
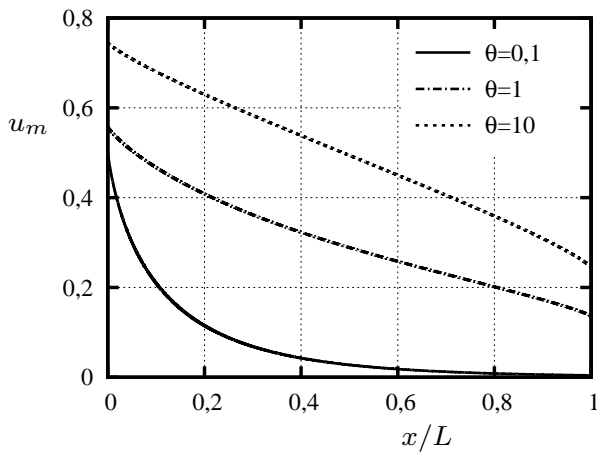
(iii) Novamente, para  $\theta = 50$  e  $\delta = 50$  (regime de oscilação lenta e rarefação baixa) os valores da amplitude  $\Pi_m$  e fase  $\varphi_p$  tendem aos valores encontrados via expressão (6.14) que corresponde à solução analítica da equação de movimento de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento do gás na superfície sólida.

As Figuras 6.6 e 6.7 apresentam as amplitudes e fases da velocidade  $u(x)$  e da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$  versus coordenada adimensional  $x/L$  para parâmetro de rarefação  $\delta = 0, 1; 1$  e  $10$ , e mesmos valores para parâmetro de oscilação  $\theta$ . Dessas figuras é possível observar que:

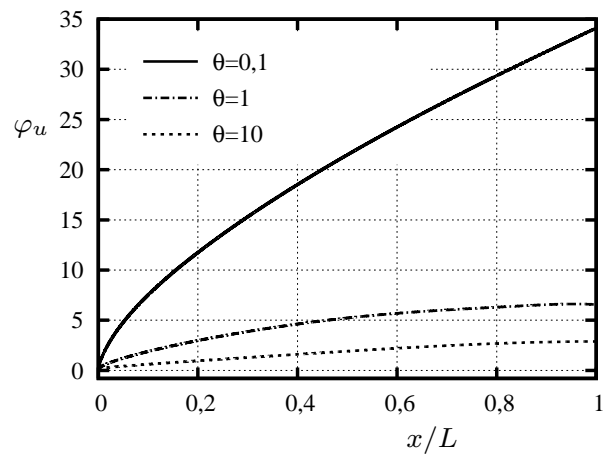
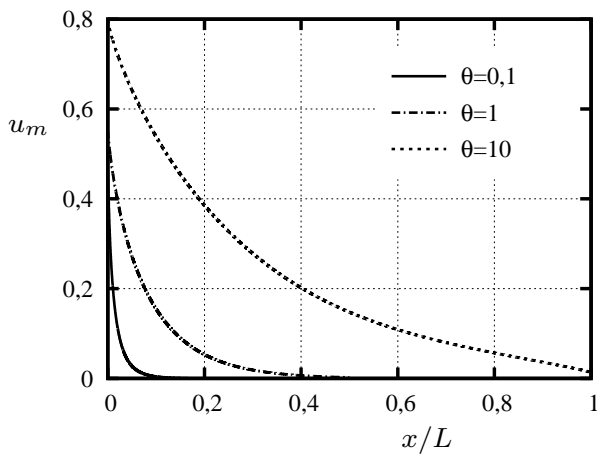
- (i) Para valores pequenos de  $\delta$ , correspondendo ao regime de rarefação alta, a variação qualitativa dessas quantidades em  $\theta$  é pequena. Porém, com o aumento de  $\delta$ , ou seja, à medida que a rarefação do gás diminui, a variação qualitativa tende a aumentar com  $\theta$ .
- (ii) Para  $\delta = 10$  observa-se que as amplitudes  $u_m$  e  $\Pi_m$  tendem a decair muito rapidamente nas proximidades da placa oscilatória à medida que  $\theta$  diminui. Isso ocorre porque a diminuição de  $\theta$  é equivalente ao afastamento entre as placas e, como consequência, a influência das ondas refletidas pela placa estacionária tende a diminuir à medida que  $\theta$  diminui de modo que o decaimento da amplitude se deve somente aos efeitos viscosos, do mesmo modo que no problema de Stokes.
- (iii) O comportamento qualitativo das fases  $\varphi_u$  e  $\varphi_p$  não muda. Para  $\delta$  fixo as fases sempre aumentam à medida que  $\theta$  diminui. Isso ocorre pois o período da oscilação diminui com o aumento da frequência e, conseqüentemente, a fração do ciclo completo que passa por um determinado ponto é maior nas situações de menor período, ou seja, a fase aumenta com o aumento da frequência de oscilação. Por outro lado, quando  $\theta$  é fixo, as fases são maiores para  $\delta$  maior, ou seja, nos regimes de menor rarefação do gás. Isso ocorre pois quanto menos rarefeito for o gás, maior os efeitos de viscosidade que tendem a atenuar a onda e, conseqüentemente, com a diminuição da amplitude da onda o período é menor e a fase maior.
- (iv) Para  $\theta$  fixo, a fase  $\varphi_p$  da tensão de cisalhamento sempre está atrasada em relação à fase  $\varphi_u$  da velocidade do gás e esta defasagem tende a diminuir com o aumento de  $\delta$ . Quando ambos os parâmetros são grandes e  $\delta \gg \theta$ , a diferença de fase é  $\pi/4$ , como previsto pelas expressão analítica (4.24).



(a) Parâmetro de rarefação  $\delta = 0.1$ .

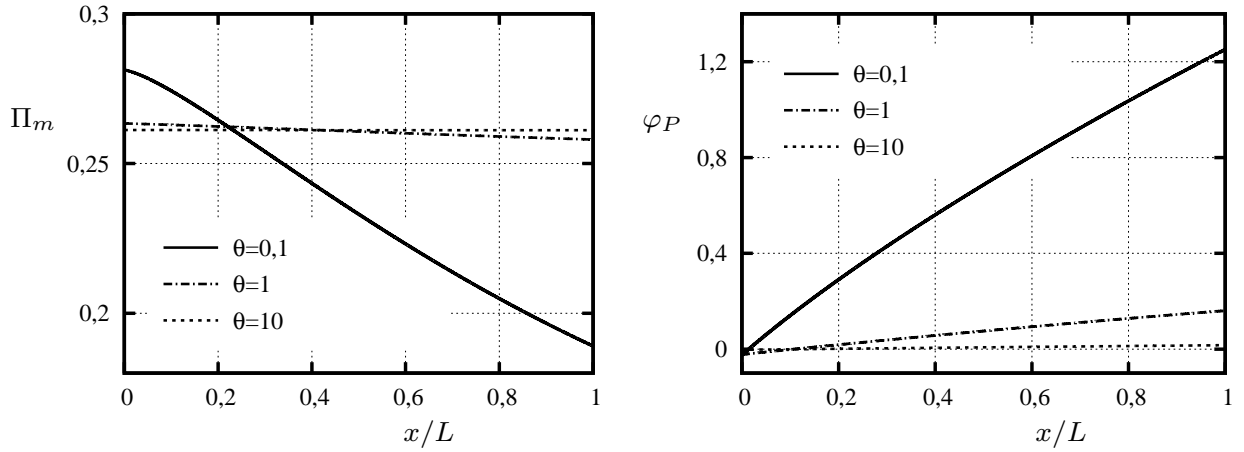


(b) Parâmetro de rarefação  $\delta = 1$ .

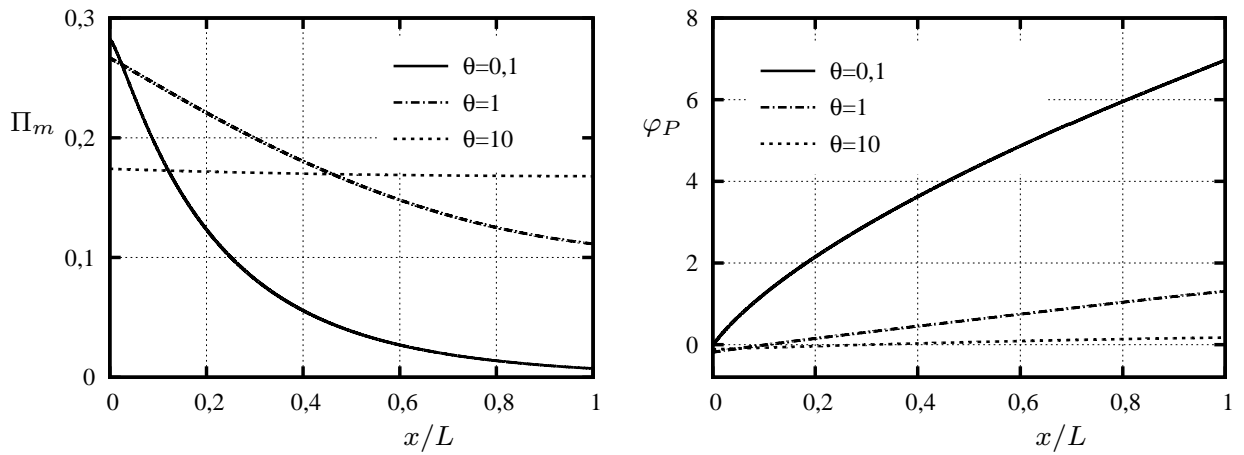


(c) Parâmetro de rarefação  $\delta = 10$ .

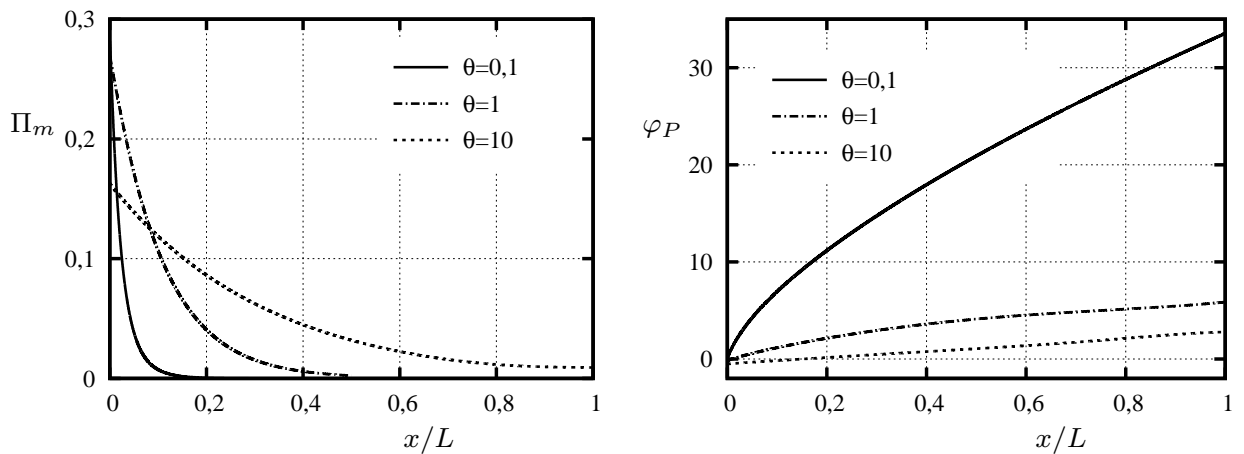
Figura 6.6: Perfil da amplitude e fase da velocidade  $u(x)$ .



(a) Parâmetro de rarefação  $\delta = 0.1$ .



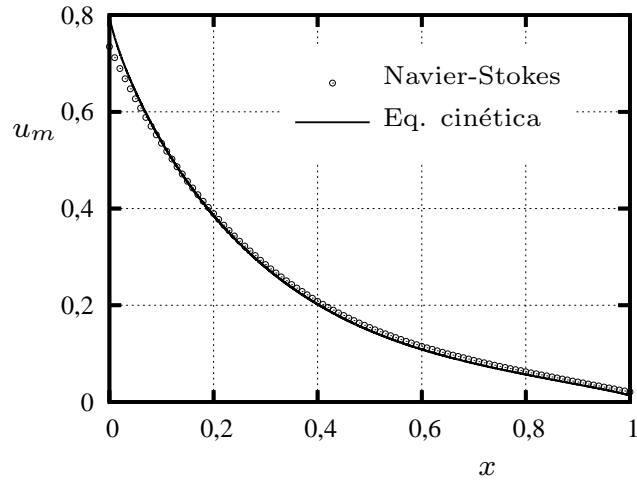
(b) Parâmetro de rarefação  $\delta = 1$ .



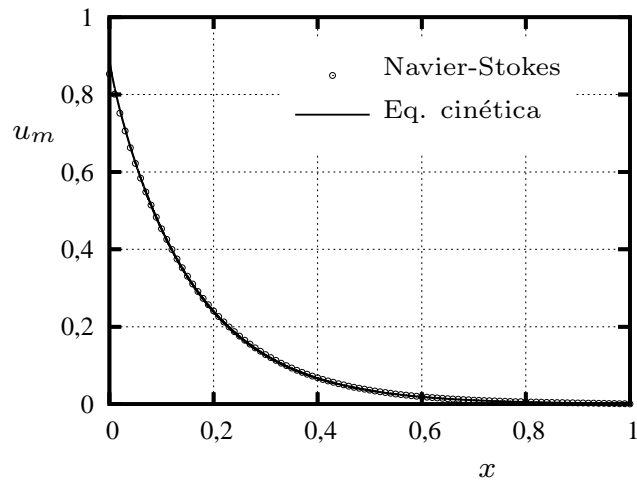
(c) Parâmetro de rarefação  $\delta = 10$ .

Figura 6.7: Perfil da amplitude e fase da tensão de cisalhamento  $\Pi(x)$ .

A Figura 6.8 mostra o perfil da amplitude da velocidade  $u(x)$  obtido via solução numérica da equação cinética e via expressão (6.12), a qual foi obtida via equação de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento do gás na superfície sólida.



(a)  $\delta = 10$  e  $\theta = 10$



(b)  $\delta = 40$  e  $\theta = 40$

Figura 6.8: Amplitude da velocidade: comparação entre resultados obtidos via equação cinética e via equação de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento.

Como pode ser visualizado na Figura (6.8), para  $\delta = 10$  e  $\theta = 10$  existe uma pequena diferença entre as soluções na região próxima à placa oscilatória mas essa diferença tende a diminuir com o aumento dos parâmetros  $\delta$  e  $\theta$ . Porém, a solução analítica (6.12) pode ser utilizada para  $\delta > 10$  e  $\theta > 10$ . Por outro lado, de acordo com a Figura (6.2), a solução analítica (6.9) só pode ser utilizada para  $\delta \rightarrow \infty$  e  $\theta \rightarrow \infty$ .



# Capítulo 7

## Propagação do som em gases rarefeitos

Como mencionado no Capítulo 1, o problema de propagação do som em gases rarefeitos é um problema clássico da DGR e, da mesma forma que os problemas tratados nos capítulos anteriores, não pode ser tratado com base nas equações da Mecânica dos Meios Contínuos nas situações em que a frequência do som é da mesma ordem de grandeza da frequência das colisões moleculares. Além disso, a maioria dos resultados encontrados na literatura não estão de acordo com dados experimentais no intervalo de altas frequências do som, ou seja, nas situações em que a frequência do som é muito maior que a frequência das colisões moleculares.

No presente trabalho o problema é resolvido para frequência do som arbitrária e, como será mostrado posteriormente, os resultados obtidos estão em ótima concordância com resultados experimentais mostrando que a metodologia desenvolvida é capaz de simular a propagação do som de forma correta em qualquer regime de oscilação.

É importante notar que, similarmente ao problema de Stokes, na propagação do som no espaço semi-infinito o número de Knudsen é igual a zero já que a situação corresponde a um caso especial do problema de gás confinado entre fonte e receptor em que a distância de separação fonte-receptor  $L' \rightarrow \infty$ .

Nas próximas seções, o esquema do problema, metodologia, resultados e respectiva discussão são apresentados.

### 7.1 Formulação do problema e objetivo

Considera-se um gás monoatômico no espaço semi-infinito  $x' > 0$ . Uma placa plana e infinita, localizada em  $x' = 0$  e cujo plano é  $y'z'$ , oscila harmonicamente na direção normal ao seu próprio plano (direção  $x'$ ) com frequência  $\omega$ . Um esquema do problema é mostrado na Figura 7.1.

A velocidade de oscilação da placa depende do tempo  $t'$  e é dada pela seguinte expressão:

$$U_w(t') = \Re[U_m \exp(-i\omega t')], \quad (7.1)$$

onde  $U_m$  denota a amplitude da velocidade da placa. Assume-se que a amplitude  $U_m$  é muito menor

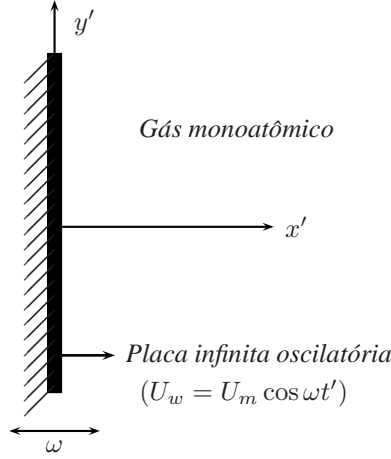


Figura 7.1: Esquema do problema para propagação do som

que a velocidade mais provável das partículas de gás, ou seja, a seguinte condição é satisfeita:

$$U_m \ll v_m, \quad v_m = \left( \frac{2k_B T_0}{m} \right)^{1/2}, \quad (7.2)$$

onde  $m$  denota a massa atômica,  $T_0$  é a temperatura do gás no estado de equilíbrio e  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Como a velocidade mais provável  $v_m$  possui a mesma ordem de grandeza da velocidade do som, a condição (7.2) significa que a velocidade de oscilação da placa é subsônica. Vale a pena ressaltar que nesse problema a temperatura do gás varia com a distância  $x$  e na parede ocorre o fenômeno de salto de temperatura descrito no Capítulo 2. Assim, nesse problema a temperatura da parede é constante e igual à  $T_0$  mas a temperatura do gás na parede oscila ao redor de  $T_0$ .

Devido ao movimento oscilatório da placa, o gás sofre sucessivos efeitos de compressão e expansão, ou seja, o movimento da placa gera uma onda de som que se propaga no gás e perturba o estado de equilíbrio do mesmo. Conseqüentemente, há um fluxo de gás na direção  $x'$  caracterizado por uma velocidade hidrodinâmica  $U_x(t', x')$  e desvios de densidade e temperatura denotados, respectivamente, por  $\Delta n(t', x')$  e  $\Delta T(t', x)$ . Experimentalmente a quantidade medida é a diferença de pressão na direção de propagação da onda, ou seja, a diferença entre a componente  $xx$  do tensor pressão, que no presente trabalho é denotada por  $P_{xx}(t', x')$ , e a pressão  $P_0$  de equilíbrio. Assim, de acordo com (2.36), a quantidade medida é a componente  $xx$  do deviante do tensor pressão. Portanto, essa quantidade deve ser determinada para que assim uma comparação com dados experimentais obtidos na literatura possa ser realizada.

Assume-se que a oscilação da placa é totalmente estabelecida tal que todas as quantidades macroscópicas citadas anteriormente possuem uma dependência harmônica no tempo  $t'$  e, conseqüentemente, podem ser escritas na seguinte forma:

$$U_x(t', x') = \Re[\tilde{U}_x(x') \exp(-i\omega t')], \quad (7.3)$$

$$\Delta n(t', x') = \Re[\Delta \tilde{n}(x') \exp(-i\omega t')], \quad (7.4)$$

$$\Delta T(t', x') = \Re[\Delta \tilde{T}(x') \exp(-i\omega t')], \quad (7.5)$$

$$P_{xx}(t', x') - P_0 = \Re[\tilde{P}_{xx}(x') \exp(-i\omega t')], \quad (7.6)$$

onde  $\tilde{U}_x(x')$ ,  $\Delta \tilde{n}(x')$ ,  $\Delta \tilde{T}(x')$  e  $\tilde{P}_{xx}(x')$  são quantidades complexas.

Todas as quantidades dadas em (7.3)-(7.6) são adimensionalizadas da seguinte forma:

$$u(x) = \frac{\tilde{U}_x(x)}{U_m}, \quad \varrho(x) = \frac{\Delta \tilde{n}(x) v_m}{n_0 U_m},$$

$$\tau(x) = \frac{\Delta \tilde{T}(x) v_m}{T_0 U_m}, \quad \Pi(x) = \frac{\tilde{P}_{xx} v_m}{2P_0 U_m}. \quad (7.7)$$

Além disso, o tempo  $t$  e a coordenada  $x$  adimensionais dadas em (4.5) também são introduzidos, ou seja,

$$t = \omega t', \quad x = \frac{\omega}{v_m} x'. \quad (7.8)$$

Todas as quantidades dadas em (7.7) são complexas e, portanto, podem ser representadas da seguinte forma:

$$u(x) = A_u(x) \exp[i\varphi_u(x)], \quad (7.9)$$

$$\varrho(x) = A_n(x) \exp[i\varphi_n(x)], \quad (7.10)$$

$$\tau(x) = A_T(x) \exp[i\varphi_T(x)], \quad (7.11)$$

$$\Pi(x) = A_P(x) \exp[i\varphi_P(x)], \quad (7.12)$$

onde  $A_j(x)$  e  $\varphi_j(x)$  ( $j = u, n, T, P$ ) denotam, respectivamente, amplitudes e fases.

A atenuação e a velocidade de fase de cada quantidade dada em (7.7) são definidas, respectivamente, como:

$$a_j = -\frac{d \ln A_j}{dx}, \quad \vartheta_j = \left[ \frac{d\varphi_j}{dx} \right]^{-1}, \quad j = u, n, T, P. \quad (7.13)$$

Note que para obter a atenuação e velocidade de fase dimensionais, denotadas por  $a'_j$  e  $\vartheta'_j$ , é necessário multiplicar  $a_j$  por  $\omega/v_m$  e  $\vartheta_j$  por  $v_m$ .

O parâmetro de oscilação  $\theta$ , definido em (2.8), é o principal parâmetro do problema cujo objetivo é determinar todas as características macroscópicas dadas em (7.7) para  $\theta$  arbitrário.

Além disso, a influência da interação gás-superfície na solução do problema é investigada. Para isso o núcleo de espalhamento proposto por Cercignani e Lampis, dado em (2.81), é utilizado já que este permite a escolha de qualquer tipo de interação gás-superfície via escolha apropriada dos coeficientes de acomodação de momentum tangencial e energia.

## 7.2 Regime de oscilação lenta

Quando  $\theta \rightarrow \infty$ , que corresponde à situação em que a frequência do som é muito menor que a frequência das colisões moleculares, a teoria clássica de propagação do som em gases, apresentada de forma resumida na Seção 2.3 do Capítulo 2, é válida. Essa teoria tem por base as equações da Mecânica dos Meios Contínuos e, conseqüentemente, o comportamento do gás pode ser descrito via equações de Navier-Stokes que, na ausência de forças externas, são dadas em (2.13)-(2.16).

De acordo com essa teoria, qualquer característica macroscópica  $\psi_j$  do gás é uma quantidade harmônica no espaço e no tempo tal que pode ser representada do seguinte modo:

$$\psi_j(t', x') = A_j \exp [i(kx' - \omega t')], \quad j = n, u, T, P, \quad (7.14)$$

onde  $A_j$  denota a amplitude do momento  $\Psi_j$  e  $k$  é uma quantidade complexa na qual a parte real corresponde à velocidade de fase da onda enquanto que a parte imaginária corresponde ao coeficiente de atenuação da onda. Nas notações utilizadas no presente trabalho,  $k$  é escrito da seguinte forma:

$$k = \frac{\omega}{c_0} \left( 1 + \frac{7i}{10\theta} \right), \quad c_0 = \sqrt{\frac{5k_B T_0}{3m}}, \quad (7.15)$$

onde  $c_0$  é a velocidade adiabática do som num gás monoatômico. Observe que, de acordo com a teoria clássica, todas as características macroscópicas do gás possuem a mesma velocidade de fase e coeficiente de atenuação. Portanto, quando  $\theta \rightarrow \infty$ , a velocidade de fase  $\vartheta'_j$  e atenuação  $a'_j$  das macrocaracterísticas do gás, definidos em (7.13), são dados por:

$$a'_j = \frac{7}{10} \frac{\mu\omega^2}{P_0 c_0}, \quad \vartheta'_j = c_0, \quad j = n, u, T, P, \quad (7.16)$$

ou, na forma adimensional

$$a_j = \frac{v_m}{\omega} a' = \frac{7}{10\theta} \sqrt{\frac{6}{5}}, \quad \vartheta_j = \frac{v'}{v_m} = \sqrt{\frac{5}{6}} \quad j = n, u, T, P. \quad (7.17)$$

Na parede oscilatória, i.e. em  $x = 0$ , a velocidade do gás é igual à velocidade da parede e, portanto,

$$A_u = U_m, \quad (7.18)$$

onde  $U_m$  denota a amplitude da velocidade da placa oscilatória.

Portanto, como a amplitude da velocidade  $u(x)$  é conhecida, as amplitudes dos desvios de densidade  $\varrho(x)$  e temperatura  $\tau(x)$  são obtidas diretamente via equação da continuidade (2.13) e equação da energia (2.16) enquanto que as amplitudes do fluxo de calor  $q(x)$  e do deviante do tensor pressão  $\Pi(x)$  são obtidas, respectivamente, via leis de Fourier e Newton. Dessa forma, a teoria clássica de propagação do som em gases prevê os seguintes comportamentos para as características macroscópicas de um gás monoatômico quando  $\theta \rightarrow \infty$ :

(i) Desvio de densidade

$$\varrho(x) = \Gamma \exp(i\Gamma x), \quad \Gamma = \sqrt{\frac{6}{5}} \frac{c_0 k}{\omega}, \quad (7.19)$$

(ii) Velocidade (direção  $x$ )

$$u(x) = \exp(i\Gamma x); \quad (7.20)$$

(iii) Desvio de temperatura

$$\tau(x) = \left[ \frac{2}{\Gamma} - \left( 1 - \frac{4i}{3\theta} \right) \Gamma \right] \exp(i\Gamma x); \quad (7.21)$$

(iv) Fluxo de calor (direção  $x$ )

$$q(x) = \frac{15}{4\theta} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{4i}{3\theta} \right) \frac{\Gamma^2}{2} \right] \exp \left[ i \left( \Gamma x - \frac{\pi}{2} \right) \right]; \quad (7.22)$$

(v) Deviante do tensor pressão (componente  $xx$ )

$$\Pi(x) = \frac{6}{5\Gamma} \exp(i\Gamma x). \quad (7.23)$$

## 7.3 Equação cinética

Para valores arbitrários de parâmetro de oscilação  $\theta$  o problema deve ser resolvido com base na equação não-estacionária de Boltzmann (2.40), a qual para o problema em questão é escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t'} + v_x \frac{\partial f}{\partial x'} = Q(ff^*), \quad (7.24)$$

onde  $Q(ff^*)$  é a integral das colisões moleculares.

Todas as características macroscópicas do gás, i.e. densidade  $n(t', x')$ , velocidade  $U_x(t', x')$ , temperatura  $T(t', x')$ , fluxo de calor  $Q_x(t', x')$  e deviante do tensor pressão  $P_{xx}(t', x') - P_0$ , são calculadas via função de distribuição  $f(t', x', \mathbf{v})$  via expressões dadas, respectivamente, em (2.33), (2.34), (2.35), (2.38) e (2.39).

Devido à condição (7.2), a equação (7.24) pode ser linearizada com o uso da seguinte representação para a função de distribuição:

$$f(t', x', \mathbf{v}) = f_0 \left\{ 1 + \Re[h(x, \mathbf{c}) e^{-it'}] \frac{U_m}{v_m} \right\}, \quad (7.25)$$

onde  $h(x, \mathbf{c})$  é chamada de função de perturbação e  $\mathbf{c} = \mathbf{v}/v_m$  é a velocidade molecular adimensional. A função  $f_0$  é a função Maxwelliana de equilíbrio, a qual é dada por

$$f_0 = n_0 \left( \frac{m}{2\pi k_B T_0} \right)^{3/2} \exp(-c^2), \quad (7.26)$$

onde  $n_0$  e  $T_0$  denotam, respectivamente, a densidade e temperatura do gás no estado de equilíbrio.

Substituindo a representação (7.25) na equação (7.24) e utilizando as quantidades adimensionais dadas em (7.7) e (7.8), a seguinte equação linearizada e adimensional é obtida:

$$-ih + c_x \frac{\partial h}{\partial x} = Lh, \quad (7.27)$$

onde  $Lh$  denota a integral das colisões linearizada.

Utilizando as expressões (2.33), (2.34), (2.35), (2.38) e (2.39), as características macroscópicas do gás são escritas em termos da função de perturbação  $h(x, \mathbf{c})$  da seguinte forma:

(i) Desvio de densidade

$$\varrho(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int h(x, \mathbf{c}) \exp(-c^2) \mathbf{dc}; \quad (7.28)$$

(ii) Velocidade do gás

$$u(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_x h(x, \mathbf{c}) \exp(-c^2) \mathbf{dc}; \quad (7.29)$$

(iii) Desvio de temperatura

$$\tau(x) = \frac{2}{3\pi^{3/2}} \int \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) h(x, \mathbf{c}) \exp(-c^2) \mathbf{dc}; \quad (7.30)$$

(iv) Fluxo de calor

$$q(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_x \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) h(x, \mathbf{c}) \exp(-c^2) \mathbf{dc}; \quad (7.31)$$

(v) Deviante do tensor pressão

$$\Pi(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_x^2 h(x, \mathbf{c}) \exp(-c^2) \mathbf{dc}. \quad (7.32)$$

De acordo com os conceitos apresentados no Capítulo 2, a solução da equação (7.27) deve satisfazer a seguinte condição de contorno na placa oscilatória:

$$h^+ = \hat{A}h^- + h_w - \hat{A}h_w, \quad h_w = 2c_x, \quad (7.33)$$

onde  $h^+$  e  $h^-$  denotam, respectivamente, as funções de perturbação das partículas refletidas e incidentes na superfície e  $\hat{A}$  é o operador de espalhamento. Como um dos objetivos é analisar a influência da interação gás-superfície na solução do problema, o núcleo de espalhamento de Cercignani e Lampis, cuja expressão é dada em (2.81), é utilizado. Portanto, o operador de espalhamento é dado por:

$$\hat{A}h^- = \hat{A}_x \hat{A}_y \hat{A}_z h^-, \quad (7.34)$$

onde

$$\hat{A}_x h^- = \frac{1}{c_x} \int_{c'_x < 0} |c'_x| \exp(c_x^2 - c_x'^2) R_x(c'_x \rightarrow c_x) h(c'_x) \mathbf{d}c'_x, \quad c_x \geq 0, \quad (7.35)$$

$$\hat{A}_j h^- = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(c_j^2 - c_j') R_j(c'_j \rightarrow c_j) h(c'_j) \mathbf{d}c'_j, \quad j = y, z, \quad (7.36)$$

$$R_x(c_x \rightarrow c'_x) = \frac{c_x}{\pi \alpha_n} \exp \left[ -\frac{c_x^2 + (1 - \alpha_n) c_x'^2}{\alpha_n} \right] \times \int_0^{2\pi} \exp \left( \frac{2\sqrt{1 - \alpha_n} c_x c'_x \cos \phi}{\alpha_n} \right) \mathbf{d}\phi, \quad (7.37)$$

$$R_j(c'_j \rightarrow c_j) = \frac{1}{[\pi \alpha_t (2 - \alpha_t)]^2} \exp \left[ -\frac{[c_j - (1 - \alpha_t) c'_j]^2}{\alpha_t (2 - \alpha_t)} \right], \quad j = y, z. \quad (7.38)$$

Quando  $\theta \rightarrow 0$ , ou seja, quando há poucas colisões intermoleculares num ciclo da oscilação, o problema pode ser resolvido de forma analítica já que o termo associado às colisões moleculares que aparece no lado direito da equação (7.27) pode ser desprezado. A solução analítica obtida no limite  $\theta \rightarrow 0$  é apresentada na próxima seção. Para valores arbitrários de parâmetro  $\theta$ , a equação (7.27) deve ser resolvida numericamente com o uso de um modelo apropriado para a integral de colisões  $Lh$ . No limite  $\theta \rightarrow \infty$ , a solução numérica tende à solução encontrada na seção anterior, ou seja, a solução numérica tende à solução prevista pela teoria clássica de propagação do som em gases (distante da placa oscilatória).

## 7.4 Regime de oscilação rápida

Quando  $\theta \rightarrow 0$ , ou seja, quando há poucas colisões moleculares ocorrendo durante um ciclo da oscilação, o termo associado às colisões moleculares que aparece na equação (7.24) pode ser desprezado. Consequentemente, a solução do problema nesse regime de oscilação se reduz à solução de uma simples equação diferencial dada por:

$$-ih + c_x \frac{\partial h}{\partial x} = 0. \quad (7.39)$$

Devido à complexidade do núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis, o qual permite uma escolha arbitrária do tipo de interação gás-superfície, encontrar uma solução analítica para a equação (7.39) só é possível no caso de espalhamento difuso. Devido a isso, na presente seção somente o caso de espalhamento difuso é considerado. Nesse caso, a solução da equação (7.39) deve satisfazer a seguinte condição de contorno, obtida a partir da condição dada em (7.34) com  $\alpha_n = \alpha_t = 1$ :

$$h = 2c_x + \sqrt{\pi} \quad \text{em} \quad x = 0 \quad \text{e} \quad c_x > 0. \quad (7.40)$$

A solução da equação (7.39) que satisfaz a condição de contorno (7.40) é a seguinte:

$$h(x, c_x) = \begin{cases} (2c_x + \sqrt{\pi}) \exp \left( i \frac{x}{c_x} \right), & c_x > 0, \\ 0, & c_x < 0. \end{cases} \quad (7.41)$$

Substituindo a solução (7.41) em (7.28)-(7.32), as seguintes expressões para as características macroscópicas do gás no regime de oscilação rápida com espalhamento difuso na placa oscilatória são obtidas:

$$\varrho(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_1(-ix) + I_0(-ix), \quad (7.42)$$

$$u(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_2(-ix) + I_1(-ix), \quad (7.43)$$

$$\tau(x) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} I_3(-ix) + \frac{2}{3} I_2(-ix) - \frac{2}{3\sqrt{\pi}} I_1(-ix) - \frac{1}{2} I_0(-ix), \quad (7.44)$$

$$q(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_4(-ix) + I_3(-ix) - \frac{3}{\sqrt{\pi}} I_2(-ix) - \frac{3}{2} I_1(-ix), \quad (7.45)$$

$$\Pi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_3(-ix) + I_2(-ix), \quad (7.46)$$

onde as funções  $I_n(z)$  são definidas em (4.43).

Utilizando as representações em série de potências dadas no Apêndice A para as integrais  $I_n(z)$ , dois casos limites podem ser considerados para os momentos dados em (7.42)-(7.46). Esses casos limites correspondem às situações em que  $x \rightarrow 0$  e  $x \rightarrow \infty$ .

Quando  $x \rightarrow 0$ , utilizando a representação (A.4), as atenuações e fases dos momentos dados em (7.42)-(7.46) são dadas por:

$$a_n = \frac{\pi^{3/2}}{2(1 + \sqrt{\pi})}, \quad a_u = - \left( \frac{1}{\sqrt{\pi}} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right)^2, \quad a_T = -3\sqrt{\pi}, \quad a_P = 0, \quad (7.47)$$

$$\vartheta_n = \vartheta_u = \vartheta_T = \vartheta_P = 0. \quad (7.48)$$

Quando  $x \rightarrow \infty$ , usando (A.8), o comportamento assintótico das atenuações e fases dos momentos são dados por:

$$a_j = \frac{1}{(4x)^{1/3}}, \quad \vartheta_j = \frac{(4x)^{1/3}}{\sqrt{3}}, \quad j = n, u, T, P. \quad (7.49)$$

Na Ref. [79] o problema de propagação do som nesse regime de oscilação é considerado. Porém, como o objetivo em tal referência era averiguar a influência do receptor na solução do problema, somente a componente normal do tensor pressão foi obtida já que somente o deviante dessa quantidade, que corresponde a uma diferença de pressão, é medido experimentalmente. A expressão (7.46) e os valores da amplitude  $a_P$  e fase  $\vartheta_P$  nos limites  $x \rightarrow 0$  e  $x \rightarrow \infty$  são idênticos aos obtidos na Ref. [79] na situação em que o receptor de ondas é muito grande.

## 7.5 Regime de transição

Para valores arbitrários de parâmetro de oscilação  $\theta$ , a equação (7.27) é resolvida numericamente com o uso do modelo de Shakhov, cuja expressão para a integral das colisões moleculares



é dada em (2.57). Utilizando a representação dada em (7.25) para linearizar a integral de colisões de Shakhov, a equação (7.27) é escrita da seguinte forma:

$$(\theta - i)h + c_x \frac{\partial h}{\partial x} = \theta \left[ \varrho + 2c_x u + \tau \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) + \frac{4}{15} q c_x \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) \right], \quad (7.50)$$

onde os momentos  $\varrho(x)$ ,  $u(x)$ ,  $\tau(x)$  e  $q(x)$  são dados em (7.28)-(7.31).

Para eliminar as variáveis  $c_y$  e  $c_z$  (componentes  $y$  e  $z$  da velocidade molecular  $\mathbf{c}$ ) duas novas funções são introduzidas:

$$\Phi(x, c_x) = \frac{1}{\pi} \int h(x, \mathbf{c}) \exp(-c_y^2 - c_z^2) \mathrm{d}c_y \mathrm{d}c_z, \quad (7.51)$$

$$\Psi(x, c_x) = \frac{1}{\pi} \int (c_y^2 + c_z^2 - 1) h(x, \mathbf{c}) \exp(-c_y^2 - c_z^2) \mathrm{d}c_y \mathrm{d}c_z. \quad (7.52)$$

Assim, após multiplicar a equação (7.50) por  $\exp(-c_y^2 - c_z^2)/\pi$  e integrá-la nas variáveis  $c_y$  e  $c_z$  no intervalo  $(-\infty, \infty)$ , a seguinte equação é obtida para a função  $\Phi(x, c_x)$ :

$$(\theta - i)\Phi + c_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \theta \left[ \varrho + 2c_x u + \tau \left( c_x^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{4}{15} q c_x \left( c_x^2 - \frac{3}{2} \right) \right]. \quad (7.53)$$

Similarmente, após multiplicar a equação (7.50) por  $(c_y^2 + c_z^2 - 1) \exp(-c_y^2 - c_z^2)/\pi$  e integrá-la nas variáveis  $c_y$  e  $c_z$  no intervalo  $(-\infty, \infty)$ , a seguinte equação é obtida para a função  $\Psi(x, c_x)$ :

$$(\theta - i)\Psi + c_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \theta \left[ \tau + \frac{4}{15} q c_x \right]. \quad (7.54)$$

Os momentos dados em (7.28)-(7.32) são reescritos em termos das novas funções  $\Phi(x, c_x)$  e  $\Psi(x, c_x)$  da seguinte forma:

$$\varrho(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int \Phi(x, c_x) \exp(-c_x^2) \mathrm{d}c_x, \quad (7.55)$$

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int c_x \Phi(x, c_x) \exp(-c_x^2) \mathrm{d}c_x, \quad (7.56)$$

$$\tau(x) = \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \int \left[ \left( c_x^2 - \frac{1}{2} \right) \Phi(x, c_x) + \Psi(x, c_x) \right] \exp(-c_x^2) \mathrm{d}c_x, \quad (7.57)$$

$$q(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int c_x \left[ \left( c_x^2 - \frac{3}{2} \right) \Phi(x, c_x) + \Psi(x, c_x) \right] \exp(-c_x^2) \mathrm{d}c_x, \quad (7.58)$$

$$\Pi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int c_x^2 \Phi(x, c_x) \exp(-c_x^2) \mathrm{d}c_x. \quad (7.59)$$

De acordo com a condição de contorno (7.33), as soluções das equações (7.53) e (7.54) devem satisfazer as seguintes condições de contorno na placa oscilatória:

$$\Phi^+ = \hat{A}_x \Phi^- + 2c_x + \hat{A}_x c_x, \quad \text{em } x = 0 \quad \text{e} \quad c_x > 0; \quad (7.60)$$

$$\Psi^+ = (1 - \alpha_t)^2 \hat{A}_x \Psi^-, \quad \text{em } x = 0 \quad \text{e} \quad c_x < 0, \quad (7.61)$$

onde o operador de espalhamento  $\hat{A}$  é definido em (7.35).

As equações (7.53) e (7.54) com condições de contorno (7.60) e (7.61) são resolvidas numericamente via método de velocidades discretas, descrito a seguir.

### 7.5.1 Método de velocidades discretas

As equações (7.53) e (7.54) são acopladas via momentos  $\tau(x)$  e  $q(x)$  e, conseqüentemente, devem ser resolvidas simultaneamente. A solução dessas equações é feita via método de velocidades discretas. Primeiramente, as distribuições de pontos no espaço de velocidade  $c_x$  e no espaço da coordenada  $x$  são escolhidas e, a seguir, para cada ponto de velocidade as equações são resolvidas no espaço da coordenada  $x$ . Na forma discretizada, utilizando o método de diferenças finitas centrais para aproximar as derivadas, as equações (7.53) e (7.54) são escritas da seguinte forma:

$$(\theta - i) \frac{\Phi_{k,j} + \Phi_{k-1,j}}{2} + c_{xj} \frac{\Phi_{k,j} - \Phi_{k-1,j}}{\Delta x} = \frac{\theta}{2} \left[ \varrho_k + \varrho_{k-1} + 2c_{xj}(u_k + u_{k-1}) \right. \\ \left. + (\tau_k + \tau_{k-1}) \left( c_{xj}^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{4}{15}(q_k + q_{k-1})c_{xj} \left( c_{xj}^2 - \frac{3}{2} \right) \right], \quad (7.62)$$

$$(\theta - i) \frac{\Psi_{k,j} - \Psi_{k-1,j}}{2} + c_{xj} \frac{\Psi_{k,j} - \Psi_{k-1,j}}{\Delta x} = \frac{\theta}{2} \left[ \tau_k + \tau_{k-1} + \frac{4}{15}(q_k + q_{k-1})c_{xj} \right], \quad (7.63)$$

onde

$$\Phi_{k,j} = \Phi(x_k, c_{xj}), \quad \Psi_{k,j} = \Psi(x_k, c_{xj}). \quad (7.64)$$

A distribuição de pontos no espaço de velocidade é feita de forma irregular, com uma maior densidade de pontos  $c_{xj}$  ( $1 \leq j \leq N_c$ ) para pequenos valores de  $c_x$  e uma menor densidade de pontos  $c_{xj}$  para grandes valores de  $c_x$ . Essa escolha é feita devido ao comportamento oscilatório das funções  $\Phi(x, c_x)$  e  $\Psi(x, c_x)$  na variável  $c_x$ , o qual é mais acentuado para pequenos valores de  $c_x$ .

A distribuição de pontos na coordenada  $x$  é feita de forma regular do seguinte modo:

$$x_k = x_{k-1} + \Delta x, \quad 1 \leq k \leq N_x, \quad x_0 = 0, \quad \Delta x = \frac{x_{max}}{N_x}, \quad (7.65)$$

onde  $N_x$  é um inteiro e  $x_{max}$  é o último ponto correspondendo à distância  $x$  na qual a perturbação causada pela oscilação da placa pode ser desprezada.

Os momentos dados em (7.55)-(7.59) são calculados usando as seguintes fórmulas de quadratura trapezoidal estendida:

$$\varrho_k = \sum_{j=1}^{N_c} \Phi_{k,j} W_j, \quad (7.66)$$

$$u_k = \sum_{j=1}^{N_c} \Phi_{k,j} c_{xj} W_j, \quad (7.67)$$

$$\tau_k = \frac{2}{3} \sum_{j=1}^{N_c} \left[ \Phi_{k,j} \left( c_{xj}^2 - \frac{1}{2} \right) + \Psi_{k,j} \right] W_j, \quad (7.68)$$

$$q_k = \sum_{j=1}^{N_c} \left[ \Phi_{k,j} \left( c_{xj}^2 - \frac{3}{2} \right) + \Psi_{k,j} \right] c_{xj} W_j, \quad (7.69)$$

$$\Pi_k = \sum_{j=1}^{N_c} \Phi_{k,j} c_{xj}^2 W_j, \quad (7.70)$$

onde  $W_j$  é o peso de integração correspondendo a  $c_{xj}$ .

O processo iterativo para resolver as equações (7.62) e (7.63) consiste em realizar, para cada ponto  $c_{xj}$ , os seguintes passos:

- (i) Valores iniciais para os momentos  $\varrho_k$ ,  $u_k$ ,  $\tau_k$ ,  $q_k$  e  $\Pi_k$  são assumidos;
- (ii) As funções  $\Phi_{k,j}$  e  $\Psi_{k,j}$  são calculadas via equações (7.62) e (7.63);
- (iii) Novos valores para os momentos  $\varrho_k$ ,  $u_k$ ,  $\tau_k$ ,  $q_k$  e  $\Pi_k$  são calculados através das fórmulas de quadratura (7.66)-(7.69);
- (iv) Volta-se ao passo (ii), no qual novos valores para as funções  $\Phi_{k,j}$  e  $\Psi_{k,j}$  são calculados utilizando os momentos  $\varrho_k$ ,  $u_k$ ,  $\tau_k$ ,  $q_k$  e  $\Pi_k$  calculados na iteração anterior. O processo iterativo é finalizado quando um critério de convergência é satisfeito.

O critério de convergência utilizado é o seguinte:

$$\begin{aligned} |\varrho_k^{(n)} - \varrho_k^{(n-1)}| &\leq \epsilon, & |u_k^{(n)} - u_k^{(n-1)}| &\leq \epsilon, & |\tau_k^{(n)} - \tau_k^{(n-1)}| &\leq \epsilon, \\ |q_k^{(n)} - q_k^{(n-1)}| &\leq \epsilon, & |\Pi_k^{(n)} - \Pi_k^{(n-1)}| &\leq \epsilon, \end{aligned} \quad (7.71)$$

onde  $n$  denota a iteração atual e  $n - 1$  a iteração anterior.  $\epsilon = 10^{-10}$  é o erro máximo aceitável.

Visando diminuir o número de pontos utilizados no espaço de velocidade  $c_x$ , a mesma idéia utilizada no Capítulo 6 de dividir a função de perturbação em duas partes é utilizada. Porém, só é possível utilizar essa metodologia no caso de espalhamento difuso correspondendo a  $\alpha_t = 1$  e  $\alpha_n = 1$ .

Portanto, quando  $\alpha_t = \alpha_n = 1$ , as funções  $\Phi(x, c_x)$  e  $\Psi(x, c_x)$  são divididas em duas partes, i.e

$$\begin{aligned} \Phi(x, c_x) &= \Phi_0(x, c_x) + \tilde{\Phi}(x, c_x), \\ \Psi(x, c_x) &= \Psi_0(x, c_x) + \tilde{\Psi}(x, c_x), \end{aligned} \quad (7.72)$$

onde as funções  $\Phi_0(x, c_x)$  e  $\Psi_0(x, c_x)$  satisfazem as seguintes equações diferenciais:

$$(\theta - i)\Phi_0 + c_x \frac{\partial \Phi_0}{\partial x} = 0, \quad (7.73)$$

$$(\theta - i)\Psi_0 + c_x \frac{\partial \Psi_0}{\partial x} = 0, \quad (7.74)$$

com condições de contorno

$$\Phi_0 = 2c_x + \nu_0 \quad \text{em} \quad x = 0 \quad \text{e} \quad c_x > 0, \quad (7.75)$$

$$\Psi_0 = 0 \quad \text{em} \quad x = 0 \quad \text{e} \quad c_x > 0. \quad (7.76)$$

A constante  $\nu_0 = \sqrt{\pi}$  é obtida via condição de contorno (7.60).

As soluções das equações (7.73) e (7.74) que satisfazem as condições de contorno (7.75) e (7.76) são as seguintes:

$$\Phi_0(x, c_x) = \begin{cases} (2c_x + \nu_0) \exp\left[-(\theta - i)\frac{x}{c_x}\right], & c_x > 0 \\ 0, & c_x < 0, \end{cases} \quad (7.77)$$

$$\Psi_0(x, c_x) = 0, \quad c_x \leq 0. \quad (7.78)$$

A substituição das representações dadas em (7.72) nas equações (7.53) e (7.54), juntamente com a utilização de (7.73) e (7.74), fornece as seguintes equações para as funções  $\tilde{\Phi}(x, c_x)$  e  $\tilde{\Psi}(x, c_x)$ :

$$(\theta - i)\tilde{\Phi} + c_x \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial x} = \theta \left[ \varrho + 2c_x u + \tau \left( c_x^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{4}{15} q c_x \left( c_x^2 - \frac{3}{2} \right) \right], \quad (7.79)$$

$$(\theta - i)\tilde{\Psi} + c_x \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial x} = \theta \left[ \tau + \frac{4}{15} q c_x \right]. \quad (7.80)$$

As condições de contorno necessárias para resolver as equações (7.79) e (7.80) são obtidas via substituição das representações dadas em (7.72), juntamente com o uso de (7.75) e (7.76), em (7.60) e (7.61). Dessa forma, as funções  $\tilde{\Phi}(x, c_x)$  e  $\tilde{\Psi}(x, c_x)$  devem satisfazer as seguintes condições de contorno na parede oscilatória:

$$\tilde{\Phi}(x, c_x) = -2 \int_{c_x < 0} c_x \tilde{\Phi}(0, c_x) \exp(-c_x^2) dc_x \quad \text{em} \quad x = 0 \quad \text{e} \quad c_x > 0, \quad (7.81)$$

$$\tilde{\Psi}(x, c_x) = 0 \quad \text{em} \quad x = 0 \quad \text{e} \quad c_x > 0. \quad (7.82)$$

Os momentos que aparecem nas equações (7.79) e (7.80), cujas expressões são dadas em (7.55)-(7.59), também são divididos em duas partes, ou seja,

$$\begin{bmatrix} \varrho(x) \\ u(x) \\ \tau(x) \\ q(x) \\ \Pi(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varrho_0(x) \\ u_0(x) \\ \tau_0(x) \\ q_0(x) \\ \Pi_0(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tilde{\varrho}(x) \\ \tilde{u}(x) \\ \tilde{\tau}(x) \\ \tilde{q}(x) \\ \tilde{\Pi}(x) \end{bmatrix}, \quad (7.83)$$

onde

$$\varrho_0(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_1[(\theta - i)x] + I_0[(\theta - i)x], \quad (7.84)$$

$$u_0(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_2[(\theta - i)x] + I_1[(\theta - i)x], \quad (7.85)$$

$$\tau_0(x) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} I_3[(\theta - i)x] + \frac{2}{3} I_2[(\theta - i)x] - \frac{2}{3\sqrt{\pi}} I_1[(\theta - i)x] - \frac{1}{3} I_0[(\theta - i)x], \quad (7.86)$$

$$q_0(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}I_4[(\theta - i)x] + I_3[(\theta - i)x] - \frac{3}{\sqrt{\pi}}I_2[(\theta - i)x] - \frac{3}{2}I_1[(\theta - i)x], \quad (7.87)$$

$$\Pi_0(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}I_3[(\theta - i)x] + I_2[(\theta - i)x]. \quad (7.88)$$

As funções  $I_n(z)$ , definidas em (4.43), são calculadas através do uso da representação em série de potências dada no Apêndice A. As quantidades  $\tilde{\varrho}$ ,  $\tilde{u}$ ,  $\tilde{\tau}$ ,  $\tilde{q}$  e  $\tilde{\Pi}$  são definidas em (7.55)-(7.59) trocando, respectivamente,  $\Phi$  e  $\Psi$  por  $\tilde{\Phi}$  e  $\tilde{\Psi}$ .

As equações (7.79) e (7.80) são discretizadas e resolvidas da mesma maneira que as equações (7.62) e (7.63). As mesmas fórmulas de quadratura dadas em (7.66)-(7.70) são utilizadas para calcular o momentos  $\tilde{\varrho}$ ,  $\tilde{u}$ ,  $\tilde{\tau}$ ,  $\tilde{q}$  e  $\tilde{\Pi}$ .

## 7.5.2 Resultados numéricos e discussão

Primeiramente, com o objetivo de averiguar a confiabilidade do esquema numérico desenvolvido no presente trabalho, uma comparação com os resultados apresentados por Garcia e Siewert [80] é realizada. As Tabelas 7.1 e 7.2 apresentam a amplitude e a fase da componente  $xx$  do deviante do tensor pressão,  $\Pi(x)$ , obtidos no presente trabalho e na Ref. [80] para o caso de espalhamento difuso na superfície e modelo de Shakhov para a equação de Boltzmann. Note que, nas notações utilizadas no presente trabalho, a distância dada na Ref. [80] corresponde a  $\theta x$ . Além disso, Garcia e Siewert [80] apresentam os resultados em função da razão entre as frequências das colisões moleculares e do som, ou seja, o parâmetro introduzido em [80] é inversamente proporcional ao parâmetro de oscilação  $\theta$ .

Tabela 7.1: Amplitude  $A_P$  de  $\Pi(x)$  versus distância

$\theta x$	$A_P$					
	$\theta = 0,1923$		$\theta = 1$		$\theta = 2$	
	Ref. [80]	Presente trabalho	Ref. [80]	Presente trabalho	Ref. [80]	Presente trabalho
0	1,005	1,005	0,960	0,960	0,908	0,908
0,2	0,870	0,870	0,938	0,938	0,898	0,898
0,4	0,688	0,688	0,908	0,908	0,885	0,885
1	0,303	0,303	0,797	0,797	0,841	0,840
2	0,708(-1)	0,708(-1)	0,612	0,612	0,757	0,756
5	0,622(-3)	0,621(-3)	0,248	0,248	0,530	0,529

De acordo com os dados apresentados nas Tabelas 7.1 e 7.2, há excelente concordância entre os resultados obtidos no presente trabalho via método de velocidades discretas com os obtidos por Garcia e Siewert [80] via método das ordenadas discretas. Isso mostra que o esquema numérico desenvolvido fornece resultados confiáveis com um esforço computacional viável.

Tabela 7.2: Fase  $\varphi_P$  de  $\Pi(x)$  versus distância

$\theta x$	$\varphi_P$					
	$\theta = 0,1923$		$\theta = 1$		$\theta = 2$	
	Ref. [80]	Presente trabalho	Ref. [80]	Presente trabalho	Ref. [80]	Presente trabalho
0	-2,061(-2)	-2,061(-2)	-7,660(-2)	-7,661(-2)	-8,594(-1)	-8,601(-1)
0,2	9,445(-1)	9,446(-1)	1,301(-1)	1,303(-1)	2,367(-1)	2,383(-1)
0,4	1,787	1,787	3,330(-1)	3,332(-1)	1,326(-1)	1,330(-1)
1	3,933	3,933	9,172(-1)	9,175(-1)	4,540(-1)	4,544(-1)
2	6,887	6,886	1,833	1,833	9,730(-1)	9,733(-1)
5	13,56	13,56	4,399	4,399	2,460	2,460

Para analisar a influência da interação gás-superfície na solução do problema, os seguintes valores de coeficientes de acomodação foram utilizados: (i) coeficiente de acomodação de momento tangencial  $\alpha_t = 0,25; 0,5; 1$  e 2; (ii) coeficiente de acomodação de energia  $\alpha_n = 0,25; 0,5$  e 1. As Tabelas 7.3-7.5 apresentam as amplitudes e fases do deviante do tensor pressão na direção de propagação da onda,  $\Pi(x)$ , na placa oscilatória, i.e.  $x = 0$ , para esses valores de coeficientes de acomodação e para parâmetro de oscilação  $\theta = 0, 1; 1$  e 10, respectivamente. Somente os valores em  $x = 0$  são apresentados pois a influência da interação gás-superfície sempre é maior na interface gás-sólido.

Tabela 7.3: Influência dos coeficientes de acomodação quando  $\theta = 0, 1$ .

$\alpha_n$	$A_P$				$-\varphi_P$			
	$\alpha_t = 0,25$	0,5	1	2	0,25	0,5	1	2
0,25	1,0943	1,0943	1,0943	1,0943	0,01426	0,01426	0,01426	0,01426
0,5	1,0637	1,0637	1,0637	1,0637	0,01306	0,01306	0,01306	0,01306
1	1,0066	1,0066	1,0066	1,0066	0,01085	0,01085	0,01085	0,01085

Tabela 7.4: Influência dos coeficientes de acomodação quando  $\theta = 1$ .

$\alpha_n$	$A_P$				$-\varphi_P$			
	$\alpha_t = 0,25$	0,5	1	2	0,25	0,5	1	2
0,25	1,0266	1,0277	1,0286	1,0249	0,09875	0,1001	0,1011	0,09699
0,5	1,0034	1,0044	1,0052	1,0019	0,09067	0,09185	0,09281	0,08908
1	0,9587	0,9595	0,9600	0,9575	0,07482	0,07580	0,07661	0,07349

Tabela 7.5: Influência dos coeficientes de acomodação quando  $\theta = 10$ .

$\alpha_n$	$A_P$				$-\varphi_P$			
	$\alpha_t = 0,25$	0,5	1	2	0,25	0,5	1	2
0,25	0,8826	0,8736	0,8672	0,8971	0,03074	0,03416	0,03566	0,02222
0,5	0,8727	0,8648	0,8593	0,8856	0,02649	0,02869	0,02959	0,02029
1	0,8556	0,8496	0,8455	0,8658	0,01558	0,01633	0,01647	0,01256

Com base nos resultados apresentados nas Tabelas 7.3-7.5 observa-se que a amplitude e a fase de  $\Pi(x)$  em  $x = 0$  são quantidades pouco influenciadas pelo coeficiente de acomodação de momentum tangencial  $\alpha_t$  quando  $\theta = 1$  e 10, correspondendo aos regimes de transição e oscilação lenta. No regime de oscilação rápida ( $\theta = 0, 1$ ) não há dependência da amplitude e fase no coeficiente de acomodação de momentum tangencial  $\alpha_t$ . Por outro lado, a amplitude  $A_P$  e a fase  $\varphi_P$  dependem do coeficiente de acomodação de energia  $\alpha_n$  nos três casos considerados, i.e.  $\theta = 0, 1; 1$  e 10. Apesar da influência de  $\alpha_n$  ser maior que a influência de  $\alpha_t$ , a variação da amplitude e fase em relação ao coeficiente  $\alpha_n$  ainda é pequena, ou seja, a influência da interação gás-superfície na solução do problema é desprezível. Por esse motivo, somente os resultados obtidos para espalhamento difuso são apresentados posteriormente.

As Figuras 7.2-7.5 mostram os perfis da atenuação e da velocidade de fase versus distância  $x$  de todas as quantidades de interesse, ou seja, desvio de densidade  $\varrho(x)$ , velocidade hidrodinâmica  $u(x)$ , desvio de temperatura  $\tau(x)$  e deviante do tensor pressão  $\Pi(x)$  para os seguintes valores de parâmetro de oscilação:  $\theta = 0, 1; 1; 10$  e 20. O perfil do fluxo de calor  $q(x)$  não é apresentado pois este está diretamente associado ao desvio de temperatura  $\tau(x)$  via lei de Fourier. Nessas figuras os valores de atenuação e velocidade de fase dados em (7.17), os quais foram obtidos analiticamente no regime de oscilação lenta ou hidrodinâmico, também são indicados para comparação com os resultados numéricos.

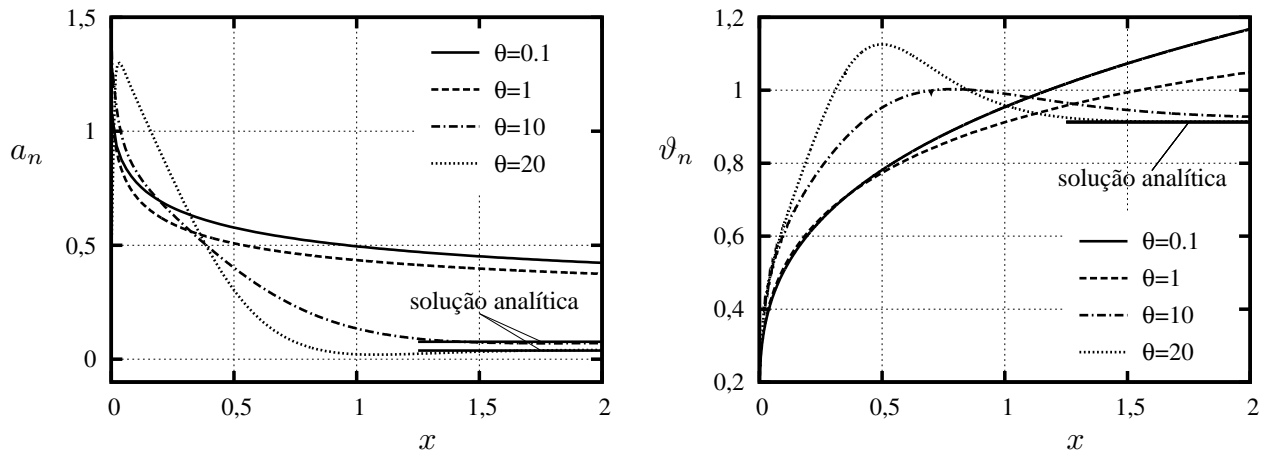


Figura 7.2: Atenuação e velocidade de fase do desvio de densidade  $\varrho(x)$ .

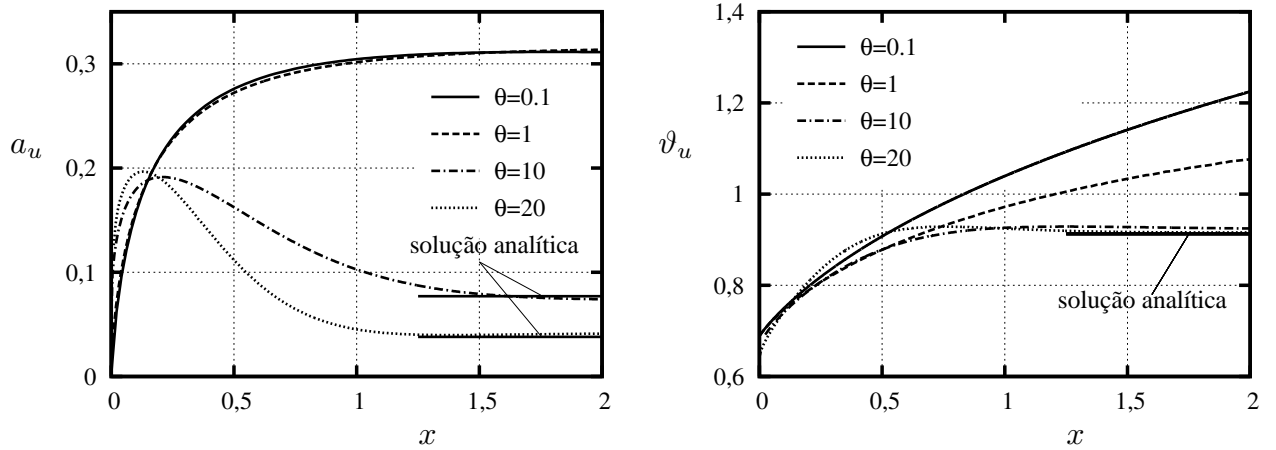


Figura 7.3: Atenuação e velocidade de fase da velocidade hidrodinâmica  $u(x)$ .

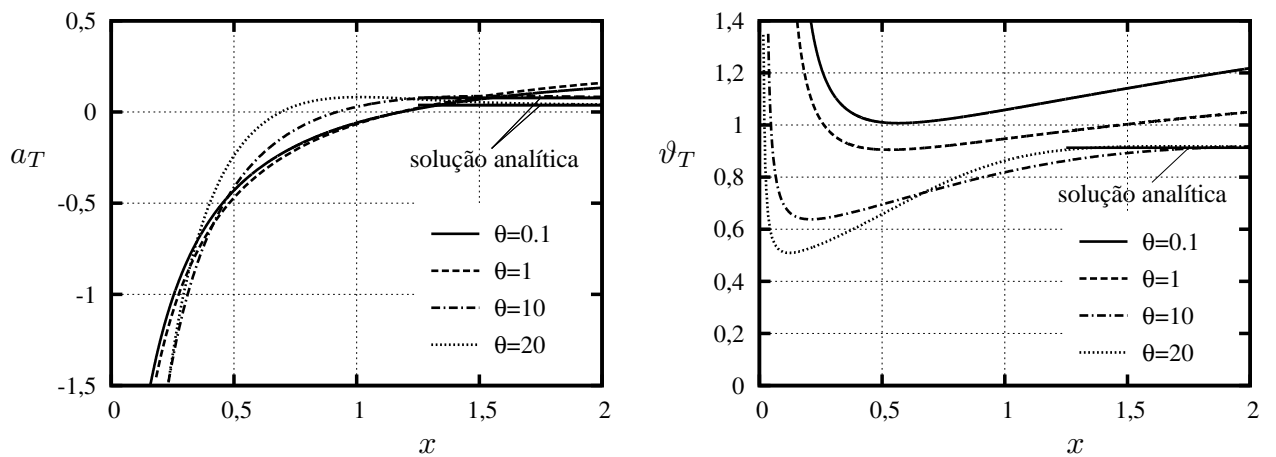


Figura 7.4: Atenuação e velocidade de fase do desvio de temperatura  $\tau(x)$ .

Das Figuras 7.2-7.5 observar-se que:

- (i) Para  $\theta = 10$  e  $20$  as atenuações e as fases de todas as quantidades tendem aos valores dados em (7.17), ou seja, as atenuações tendem a  $7\sqrt{6/5}/(10\theta)$  enquanto que as fases tendem ao valor  $\sqrt{5/6}$ .

Os valores dados em (7.17) foram obtidos via teoria clássica de propagação do som em gases, a qual prevê que as atenuações e fases de todas as características macroscópicas do gás são iguais e constantes, ou seja, independentes da coordenada  $x$ . Isso é válido quando a frequência do som é muito pequena comparada com a frequência das colisões moleculares, ou seja, quando  $\theta$  é grande. Porém, de acordo com os perfis das atenuações e fases, mesmo para grandes valores de  $\theta$  a previsão da teoria clássica só é válida distante da placa oscilatória, ou seja, a teoria clássica de propagação do som em gases não descreve corretamente



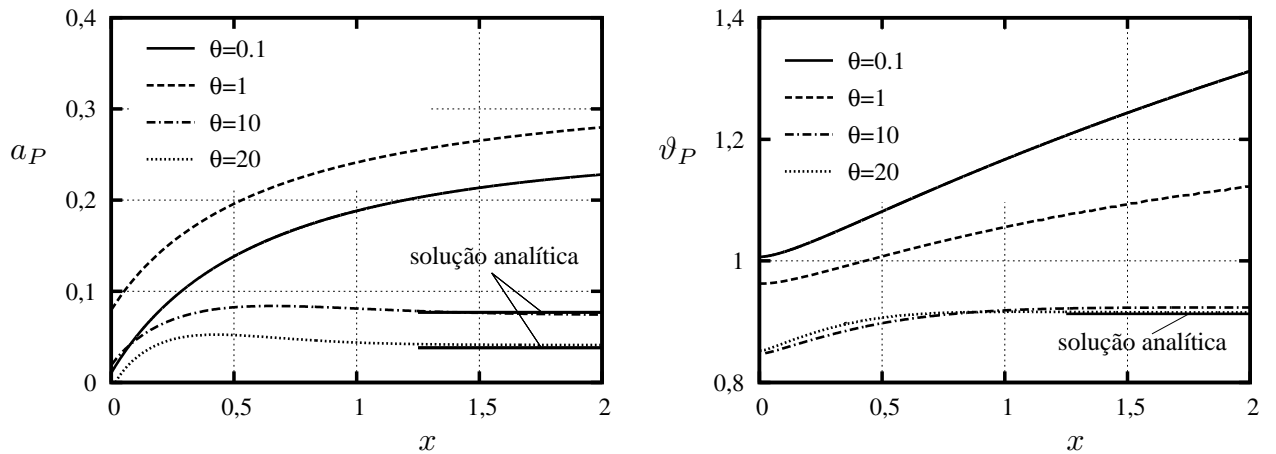


Figura 7.5: Atenuação e velocidade de fase para o deviante do tensor pressão  $\Pi(x)$ .

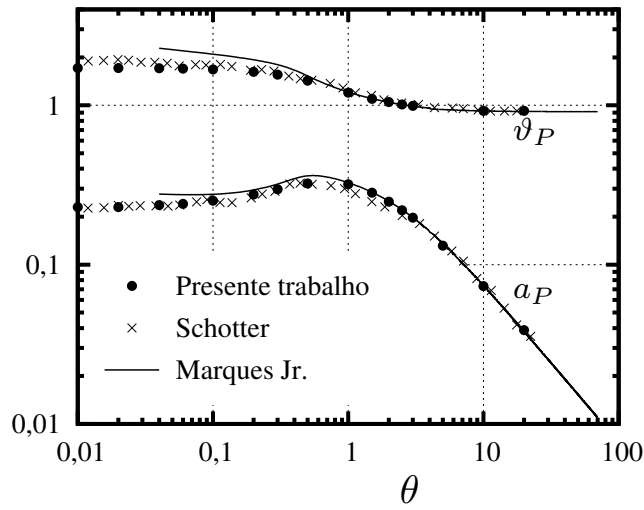
o comportamento do gás nas proximidades da placa oscilatória mesmo nas situações em que a frequência do som é muito menor que a frequência das colisões moleculares. Essa falha da teoria clássica em prever o comportamento do gás nas proximidades da placa está associada ao fato de que a hipótese de solução harmônica no espaço só é válida quando existe invariância translacional, ou seja, quando o vetor de onda independe da posição espacial. Na região próxima da fonte o vetor de onda depende da posição  $x$ , ou seja, existe anisotropia e, portanto, a onda não pode ser assumida como uma onda harmônica nessa região. Assim, a fim de utilizar as equações de Navier-Stokes para descrever a propagação do som nas situações em que  $\theta$  é grande e em todo o intervalo de  $x$  é necessário abandonar a hipótese de onda harmônica e resolver as equações de Navier-Stokes numericamente. Além disso, condições de contorno apropriadas devem ser utilizadas já que o fenômeno de salto de temperatura que ocorre nas proximidades da parede não pode ser desprezado.

- (ii) Para  $\theta = 0, 1$  e  $1$ , valores que correspondem aos regimes de oscilação rápida e transição, as atenuações e fases não tendem a valores constantes à medida que  $x$  aumenta. Quando  $\theta \rightarrow 0$  e  $x \rightarrow \infty$ , o comportamento assintótico das atenuações e fases é dado por (7.49), ou seja, longe da placa oscilatória as atenuações e fases não são constantes mas variam com  $x^{1/3}$ .
- (iii) A atenuação  $a_T$  do desvio de temperatura é negativa nas proximidades da placa. Isso ocorre devido ao fenômeno de salto de temperatura, ou seja, embora a temperatura da placa seja fixa e igual a  $T_0$ , a temperatura do gás oscila ao redor desse valor.

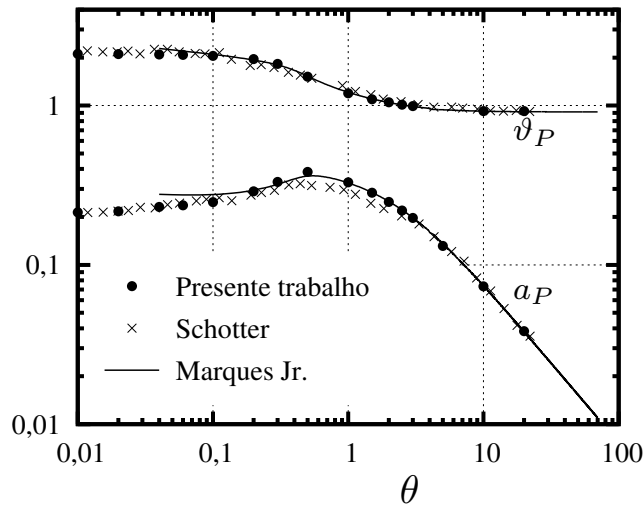
Na Figura 7.6 uma comparação dos resultados obtidos no presente trabalho com dados experimentais obtidos por Schotter [78] e resultados teóricos obtidos por Marques Jr. [77] é mostrada.

Schotter [78] investigou a propagação do som em gases nobres considerando um amplo intervalo de frequência do som. As medidas realizadas por ele foram obtidas variando a distância entre fonte e receptor e os dados apresentados na Ref. [78] foram obtidos com o receptor nas posições  $x = 10/\sqrt{\pi}$  e  $x = 20/\sqrt{\pi}$ .

Marques Jr. [77] investigou a propagação do som em gases com base no método dos momentos de Grad e na hipótese de solução harmônica no espaço.



(a)  $x = 10/\sqrt{\pi}$



(b)  $x = 20/\sqrt{\pi}$

Figura 7.6: Comparação dos resultados obtidos no presente trabalho com resultados encontrados na literatura.

De acordo a Figura 7.6, os resultados obtidos no presente trabalho estão em ótima concordância com os resultados experimentais de Schotter [78] em todo o intervalo de parâmetro de oscilação  $\theta$  e nas duas situações em que as medidas experimentais de Schotter [78] foram realizadas, i.e.  $x = 10/\sqrt{\pi}$  e  $x = 20/\sqrt{\pi}$ . Por outro lado, a comparação com os resultados obtidos por Marques Jr. [77] mostra uma discrepância quando  $\theta < 1$  na situação em que  $x = 10/\sqrt{\pi}$  e  $\theta < 0,2$  na situação em que  $x = 20/\sqrt{\pi}$ . Além disso, os resultados de Marques Jr. [77] estão em melhor concordância com os dados experimentais de Schotter [78] na situação em que  $x = 20/\sqrt{\pi}$ , ou seja, há uma melhor concordância quando o receptor está mais distante da fonte sonora. Como mencionado anteriormente, a solução de onda harmônica no espaço é válida so-

mente nas situações em que a frequência do som é muito menor que a frequência das colisões moleculares, ou seja, quando  $\theta$  é grande. Além disso, mesmo para  $\theta$  grande a solução harmônica só é válida na região distante da fonte sonora onde existe homogeneidade espacial, ou seja, invariância translacional. Portanto, isso explica o porquê dos resultados apresentados em [77] só estarem em boa concordância com os resultados apresentados no presente trabalho e com os dados experimentais de Schotter [78] distante da fonte sonora e nas situações de alta frequência do som.

# Capítulo 8

## Propagação do som num gás confinado entre fonte e receptor

No presente capítulo o problema de propagação do som, tratado no Capítulo 7, é generalizado de tal modo a considerar a influência do receptor de ondas sonoras na solução do problema.

### 8.1 Esquema do problema e objetivo

Considera-se um gás monoatômico confinado entre duas placas planas, paralelas e infinitas com seus planos em  $y'z'$ . Uma das placas está localizada em  $x' = 0$  e oscila na direção normal ao seu próprio plano, i.e. direção  $x'$ , com frequência de oscilação  $\omega$ . A outra placa está fixa em  $x' = L'$ . Um esquema do problema é mostrado na Figura 8.1

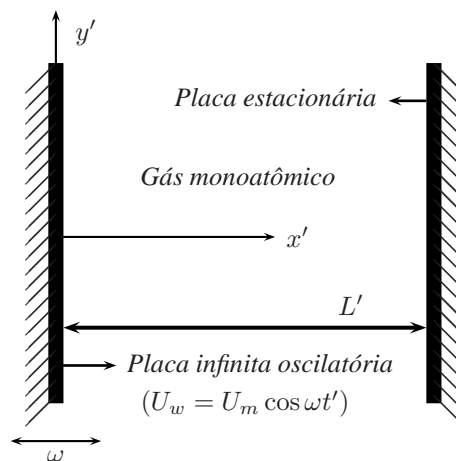


Figura 8.1: Esquema do problema: propagação do som num gás confinado entre fonte e receptor.

A velocidade da placa oscilatória pode ser escrita da seguinte forma:

$$U_w = \Re[U_m \exp(-i\omega t')], \quad (8.1)$$

onde  $\Re$  denota a parte real de uma quantidade complexa.  $U_m$  é a amplitude da velocidade da placa oscilatória, a qual é assumida como sendo muito pequena comparada à velocidade mais provável  $v_m$  dos átomos de gás, i.e.

$$U_m \ll v_m, \quad v_m = \left( \frac{2k_B T_0}{m} \right)^{1/2}, \quad (8.2)$$

onde  $m$  denota a massa atômica,  $T_0$  é a temperatura de equilíbrio do gás e  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

A placa oscilatória é a fonte de ondas sonoras enquanto que a placa estacionária atua como um receptor de ondas. A propagação da onda sonora perturba o estado de equilíbrio do gás confinado entre as placas e, conseqüentemente, todas as características macroscópicas do gás são afetadas. Da mesma forma que no Capítulo 7, há um fluxo de gás na direção  $x'$  caracterizado pela velocidade hidrodinâmica  $U_x(t', x')$ , desvios de densidade  $\Delta n(t', x')$  e temperatura  $\Delta T(t', x')$ , componente  $xx$  do tensor pressão  $P_{xx}(t', x')$ . Note que, do mesmo modo que no Capítulo 7, a quantidade de interesse é a diferença de pressão na direção de propagação da onda, ou seja, a componente  $xx$  do deviante do tensor pressão. A oscilação da placa é assumida como sendo totalmente estabelecida tal que a dependência temporal é harmônica e, conseqüentemente, todas as características macroscópicas do gás são escritas do mesmo modo que em (7.3)-(7.6).

As quantidades adimensionais dadas em (7.7) e (7.8) também são introduzidas e, novamente, como todas as quantidades dadas em (7.3)-(7.6) são complexas, as representações (7.9)-(7.12) também são utilizadas.

A solução do problema depende de dois parâmetros: o parâmetro de oscilação  $\theta$ , definido em (2.8), e o parâmetro de rarefação  $\delta$ , cuja definição é dada em (2.5) e que para o problema em questão é escrito como

$$\delta = \frac{P L'}{\mu v_m}, \quad (8.3)$$

onde o comprimento característico  $L'$  é a distância de separação entre a fonte e o receptor.

As características macroscópicas do gás, as quais são totalmente determinadas através do cálculo das suas amplitudes e fases, são determinadas em todo o intervalo de parâmetros de oscilação  $\theta$  e rarefação  $\delta$ . De acordo com os resultados obtidos no Capítulo 7, a influência da interação gás-superfície na solução do problema é desprezível. Conseqüentemente, no problema em questão, espalhamento difuso das partículas de gás em ambas as placas é assumido.

## 8.2 Regime de oscilação lenta e rarefação baixa

Quando ambos os parâmetros de oscilação e rarefação são grandes, i.e.  $\theta \rightarrow \infty$  e  $\delta \rightarrow \infty$ , o problema pode ser resolvido via equações de Navier-Stokes apresentadas no Capítulo 2. Para o problema em questão, as equações de continuidade (2.13), conservação de momento (2.14) e conservação de energia (2.16), com o respectivo uso da lei de Fourier (2.19), equações de estado (2.20) e energia (2.21) e também com a introdução das quantidades adimensionais dadas em (7.7)

e (7.8) e das representações dadas em (7.3)-(7.6), são linearizadas considerando somente os termos lineares na amplitude, ou seja, os termos proporcionais a produtos de amplitudes são desprezados. Assim, as equação linearizadas são escritas da seguinte forma:

(i) Equação da continuidade:

$$\frac{du}{dx} = i\varrho; \quad (8.4)$$

(ii) Equação de balanço de momento de Navier-Stokes:

$$\frac{2}{3\theta} \frac{d^2u}{dx^2} + iu = \frac{1}{2} \frac{dP}{dx}; \quad (8.5)$$

(iii) Equação de balanço de energia:

$$\frac{5}{4\theta} \frac{d^2\tau}{dx^2} + i\tau = \frac{2}{3} \frac{du}{dx}. \quad (8.6)$$

Para satisfazer o sistema de equações (8.4)-(8.6), a velocidade  $u(x)$  e o desvio de temperatura  $\tau(x)$  devem satisfazer as seguintes equações diferenciais, as quais foram obtidas com a substituição da equação de continuidade de massa (8.4) nas equações de balanço de momento (8.5) e balanço de energia (8.6):

$$u + \frac{5}{6} \left(1 - \frac{23i}{10\theta}\right) \frac{d^2u}{dx^2} - \frac{5i}{8\theta} \left(1 - \frac{4i}{3\theta}\right) \frac{d^4u}{dx^4} = 0, \quad (8.7)$$

$$\tau(x) + \left(\frac{2}{3}i + \frac{5}{2\theta}\right) \frac{du}{dx} + \frac{5}{4\theta} \left(1 - \frac{4i}{3\theta}\right) \frac{d^3u}{dx^3} = 0. \quad (8.8)$$

A equação (8.7) é uma equação diferencial linear de quarta ordem e sua solução geral é dada pela expressão

$$u(x) = ae^{m_1x} + be^{-m_1x} + ce^{m_2x} + de^{-m_2x}, \quad (8.9)$$

onde as raízes complexas  $m_1$  e  $m_2$  são dadas por

$$m_1 = \sqrt{\frac{-B + \sqrt{B^2 - 4A}}{2A}}, \quad m_2 = \sqrt{\frac{-B - \sqrt{B^2 - 4A}}{2A}}, \quad (8.10)$$

e as quantidades  $A$  e  $B$  são as seguintes

$$A = -\frac{5i}{8\theta} \left(1 - \frac{4i}{3\theta}\right), \quad B = \frac{5}{6} \left(1 - \frac{23i}{10\theta}\right). \quad (8.11)$$

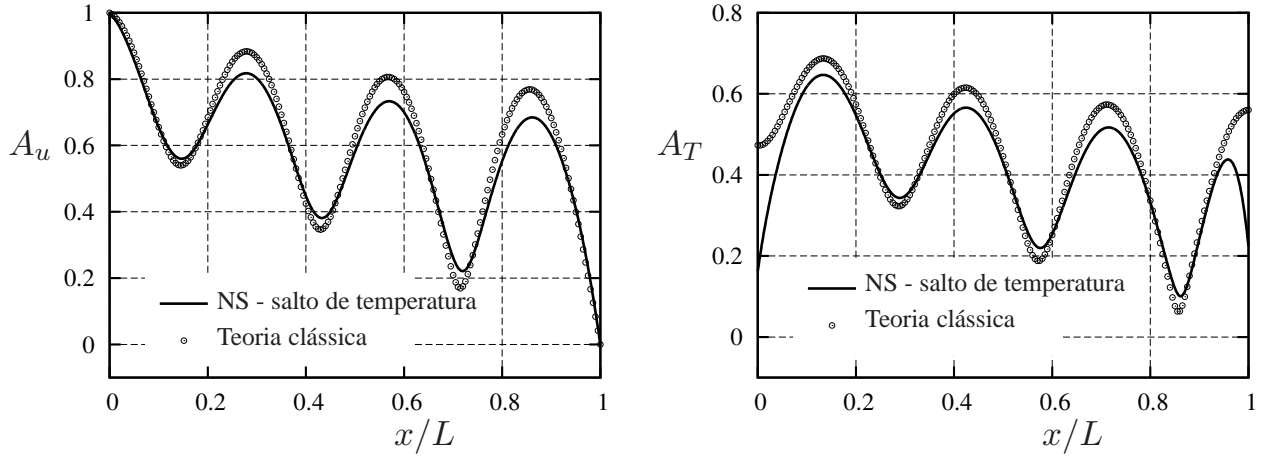
De acordo com a equação (8.8), o desvio de temperatura  $\tau(x)$  é determinado via velocidade hidrodinâmica  $u(x)$ , ou seja, como a solução  $u(x)$  é conhecida, a solução geral para o desvio de temperatura é dada por:

$$\tau(x) = -\mathcal{J}_1(ae^{m_1x} - be^{-m_1x}) - \mathcal{J}_2(ce^{m_2x} - de^{-m_2x}), \quad (8.12)$$

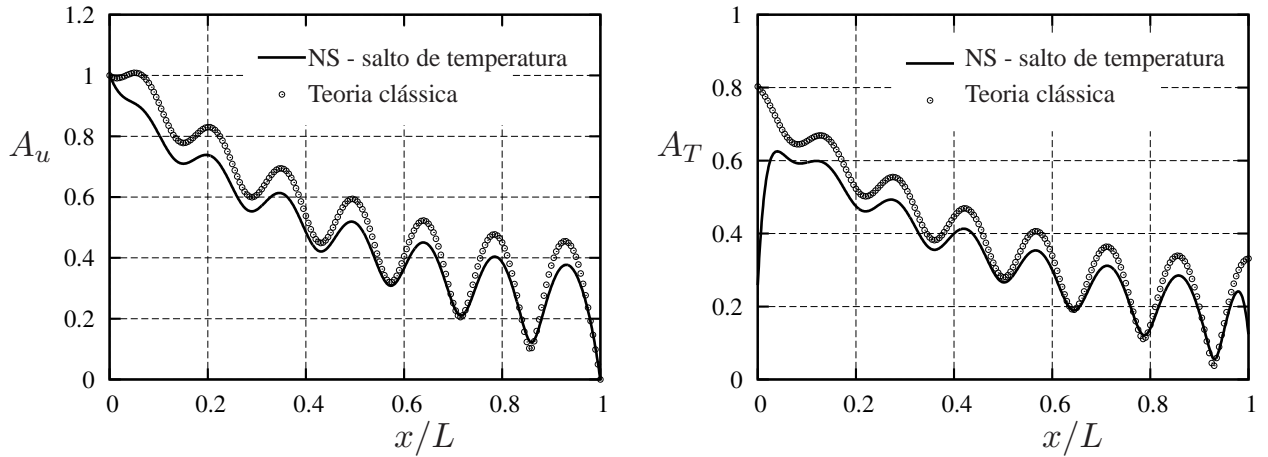
onde

$$\mathcal{T}_j = m_j \left[ \frac{2}{3}i + \frac{5}{2\theta} + \frac{5}{4\theta} \left( 1 - \frac{4}{3}i \right) m_j^2 \right], \quad j = 1, 2, \quad (8.13)$$

e as quantidades  $m_1$  e  $m_2$  são dados em (8.10).



(a) Parâmetro de rarefação  $\delta = 100$



(b) Parâmetro de rarefação  $\delta = 200$

Figura 8.2: Amplitudes da velocidade  $u(x)$  e do desvio de temperatura  $\tau(x)$  para  $\theta = 10$ : comparação das soluções obtidas via teoria clássica de propagação do som em gases e via equações de Navier-Stokes com condição de contorno de salto de temperatura nas paredes.

As constantes  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$  que aparecem em (8.9) e (8.12) são obtidas através das condições de contorno na fonte e no receptor, i.e. em  $x = 0$  e  $x = L$ . Essas condições de contorno são as seguintes:

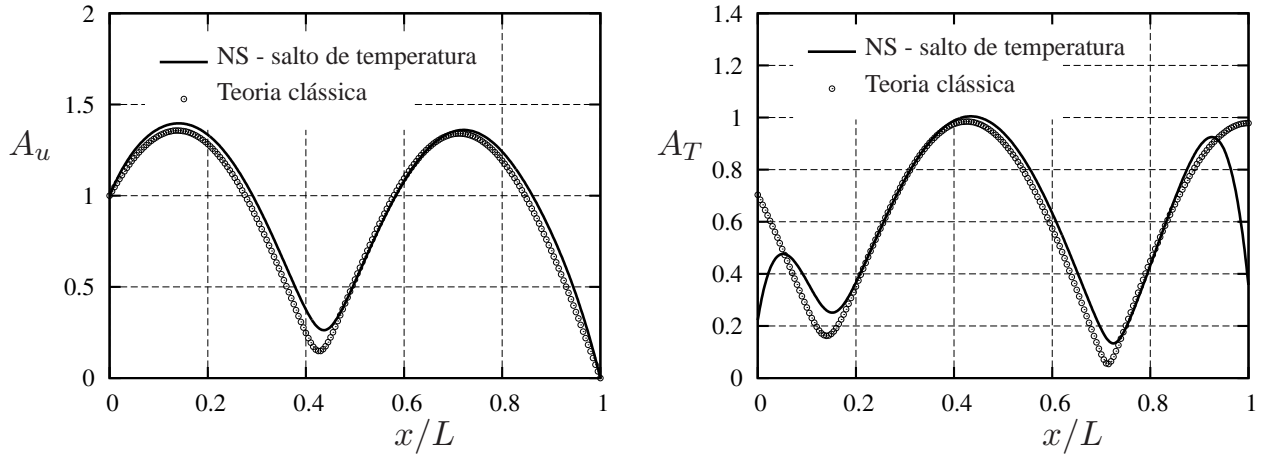
(i) Condições de contorno para a velocidade hidrodinâmica do gás:

$$u(x) = \begin{cases} 1 & \text{em } x = 0, \\ 0 & \text{em } x = L. \end{cases} \quad (8.14)$$

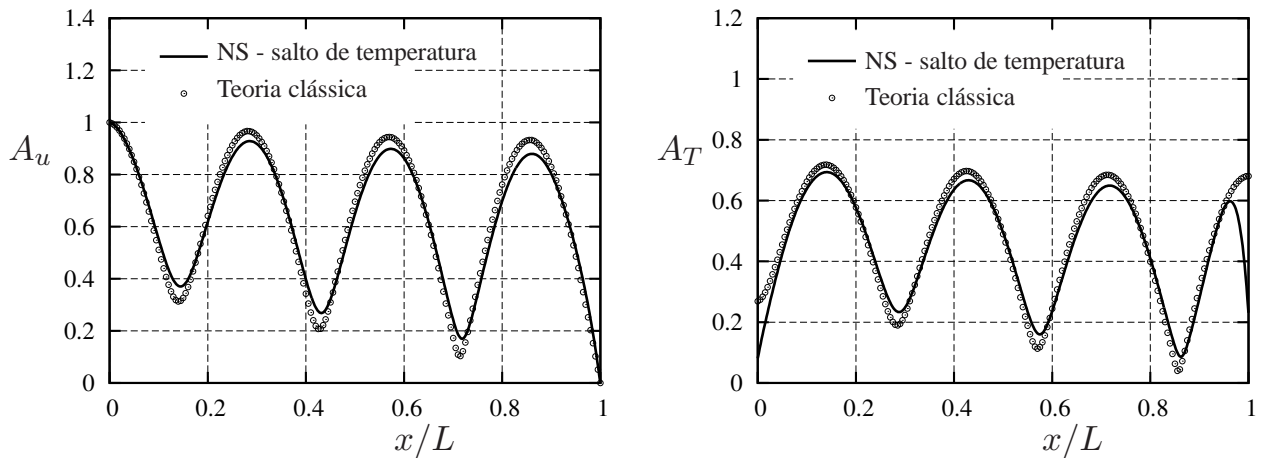
(ii) Condições de contorno para o desvio de temperatura do gás:

$$\tau(x) = \begin{cases} \frac{\zeta_T}{\theta} \frac{d\tau}{dx} \Big|_{x=0} & \text{em } x = 0, \\ -\frac{\zeta_T}{\theta} \frac{d\tau}{dx} \Big|_{x=L} & \text{em } x = L. \end{cases} \quad (8.15)$$

As condições de contorno apresentadas em (8.15) são obtidas via condição de contorno de salto de temperatura dada em (2.23) e o coeficiente  $\zeta_T$  é o coeficiente de salto de temperatura.



(a) Parâmetro de rarefação  $\delta = 100$



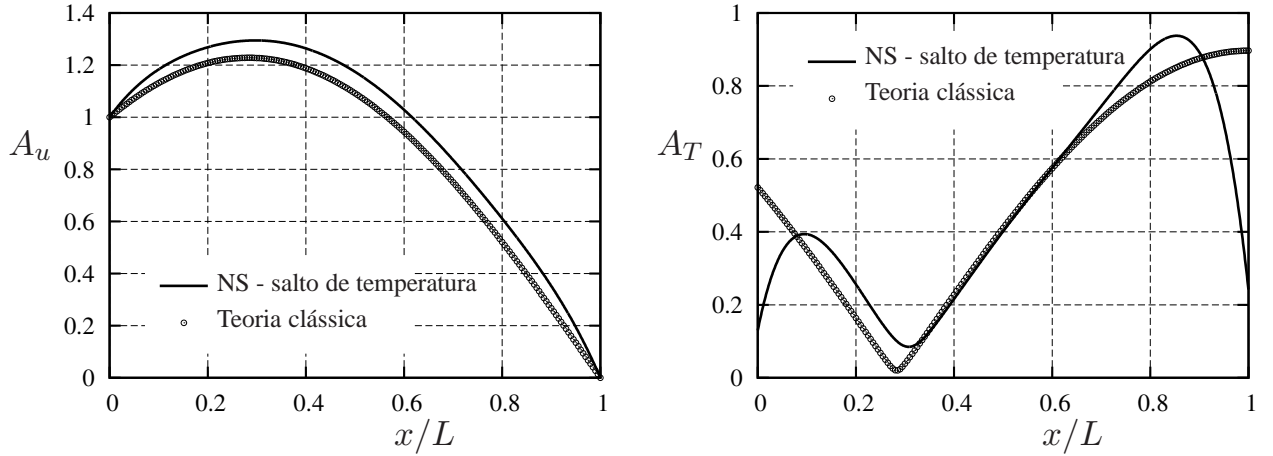
(b) Parâmetro de rarefação  $\delta = 200$

Figura 8.3: Amplitudes da velocidade  $u(x)$  e do desvio de temperatura  $\tau(x)$  para  $\theta = 20$ : comparação das soluções obtidas via teoria clássica de propagação do som em gases e via equações de Navier-Stokes com condição de contorno de salto de temperatura nas paredes.

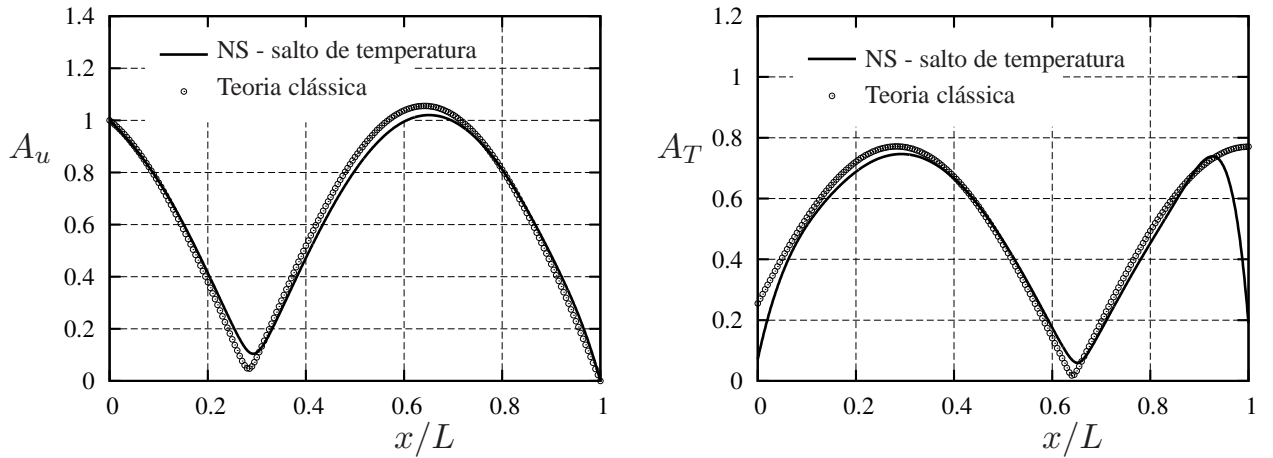
Portanto, utilizando as condições de contorno dadas em (8.14) e (8.15) um sistema de quatro equações algébricas é obtido, cuja solução fornece as constantes  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$ . Devido à complexidade do sistema, este é resolvido numericamente.

Com os perfis de  $u(x)$  e  $\tau(x)$  determinados, o desvio de densidade  $\varrho(x)$  é obtido via equação da continuidade (8.4) enquanto que a componente normal do tensor pressão  $\Pi(x)$  e o fluxo de calor





(a) Parâmetro de rarefação  $\delta = 100$



(b) Parâmetro de rarefação  $\delta = 200$

Figura 8.4: Amplitude da velocidade  $u(x)$  e desvio de temperatura  $\tau(x)$  para  $\theta = 50$ : comparação das soluções obtidas via teoria clássica de propagação do som em gases e via equações de Navier-Stokes com condição de contorno de salto de temperatura nas paredes.

$q(x)$  são obtidos, respectivamente, via leis de Newton e Fourier, as quais são escritas da seguinte forma:

$$\Pi(x) = \frac{1}{2}\tau(x) - \frac{1}{2} \left( \frac{4}{3\theta} + i \right) \frac{du}{dx}. \quad (8.16)$$

$$q(x) = -\frac{15}{8\theta} \frac{d\tau}{dx}. \quad (8.17)$$

De acordo com a teoria clássica de propagação do som em gases, apresentada na Seção 2.3 do Capítulo 2, para o problema em questão a velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  é dada pela seguinte expressão:

$$u(x) = \frac{\{\exp(-i\Gamma x) - \exp[i\Gamma(x - 2L)]\}}{[1 - \exp(-2i\Gamma L)]}, \quad \Gamma = \frac{kv_m}{\omega}, \quad (8.18)$$

onde a quantidade complexa  $k$  é dada em (2.29).

Consequentemente, para satisfazer as equações de continuidade de massa (8.4) e de energia (8.6), os desvios de densidade  $\varrho(x)$  e de temperatura  $\tau(x)$  são dados pelas seguintes expressões:

$$\varrho(x) = -\Gamma \frac{\{\exp(-i\Gamma x) + \exp[i\Gamma(x - 2L)]\}}{[1 - \exp(-2i\Gamma L)]}, \quad (8.19)$$

$$\tau(x) = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{2i}{2\theta}\right) \varrho(x). \quad (8.20)$$

Note que as expressões (8.19) e (8.20) foram obtidas sem o uso de nenhuma condição de contorno. Somente a expressão (8.18) foi obtida com o uso das condições de contorno dadas em (8.14).

Nas Figuras 8.2-8.4, a fim de fazer uma comparação entre os resultados obtidos via solução das equações de Navier-Stokes com condições de contorno (8.14) e (8.15) e expressões (8.18)-(8.20) baseadas na teoria clássica de propagação do som em gases, os perfis das amplitudes da velocidade  $u(x)$  e do desvio de temperatura  $\tau(x)$  são apresentados, respectivamente, para parâmetro de oscilação  $\theta=10, 20$  e  $50$ . Em cada figura dois valores de parâmetro de rarefação do gás são considerados:  $\delta=100$  e  $200$ . De acordo com essas figuras, as soluções tendem a se aproximar à medida que os parâmetros  $\delta$  e  $\theta$  aumentam mas ainda existe uma diferença nas proximidades da placa oscilatória. Além disso, note que a solução prevista pela teoria clássica de propagação do som em gases não prevê o comportamento correto do desvio de temperatura nas proximidades das placas e isso ocorre devido ao fato de que o fenômeno de salto de temperatura não é levado em consideração pela teoria clássica.

### 8.3 Equação cinética

Para parâmetros de rarefação  $\delta$  e oscilação  $\theta$  arbitrários o problema é resolvido com base na equação de Boltzmann não-estacionária, a qual é linearizada conforme procedimento descrito na Seção 7.3 do Capítulo 7. Espalhamento difuso em ambas as placas é assumido e, consequentemente, utilizando a condição de contorno (7.33) com  $\alpha_t = \alpha_n = 1$ , as seguintes condições de contorno são obtidas para o problema em questão:

- (i) Placa oscilatória (fonte de ondas sonoras), localizada em  $x = 0$ :

$$h(0, \mathbf{c}) = 2c_x + \nu_0, \quad c_x > 0, \quad (8.21)$$

onde a constante  $\nu_0$  é dada por:

$$\nu_0 = \sqrt{\pi} - 2 \int_{c_x < 0} c_x h(0, \mathbf{c}) \exp(-c^2) d\mathbf{c}. \quad (8.22)$$

- (ii) Placa estacionária (receptor de ondas sonoras), localizada em  $x = L$ :

$$h(L, \mathbf{c}) = \nu_L, \quad c_x < 0, \quad (8.23)$$

onde a constante  $\nu_L$  é dada por:

$$\nu_L = \int_{c_x > 0} c_x h(L, \mathbf{c}) \exp(-c^2) d\mathbf{c}. \quad (8.24)$$

Portanto, a equação linearizada (7.27) deve satisfazer as condições de contorno (8.21) e (8.23). Quando ambos os parâmetros de rarefação e oscilação tendem a zero, o termo associado às colisões moleculares (lado direito da equação (7.27) pode ser desprezado e, como consequência, a solução do problema tem por base uma equação diferencial ordinária cuja solução analítica é facilmente encontrada. Para outras situações, i.e. situações com  $\delta$  e  $\theta$  arbitrários, a equação (7.27) é simplificada com o respectivo uso do modelo de Shakhov (2.57) para o termo de colisões e então é resolvida numericamente. O processo numérico é o mesmo utilizado no Capítulo 7 com a diferença de que agora existe uma condição de contorno adicional.

## 8.4 Regime de oscilação rápida e rarefação alta

Como mencionado anteriormente, quando  $\theta \rightarrow 0$  e  $\delta \rightarrow 0$  as colisões intermoleculares podem ser desprezadas já que nessa situação, durante um ciclo da oscilação, as colisões gás-superfície ocorrem com muito mais frequência que as colisões intermoleculares. Desse modo, a equação integro-diferencial (7.27) se reduz à seguinte equação diferencial:

$$-ih + c_x \frac{\partial h}{\partial x} = 0. \quad (8.25)$$

A solução da equação (8.25) que satisfaz as condições de contorno (8.21) e (8.23) é a seguinte:

$$h(x, c_x) = \begin{cases} (2c_x + \nu_0) \exp\left(i \frac{x}{c_x}\right), & c_x > 0; \\ \nu_L \exp\left[i \frac{(x-L)}{c_x}\right], & c_x < 0, \end{cases} \quad (8.26)$$

onde as constantes  $\nu_0$  e  $\nu_L$ , definidas em (8.22) e (8.24), são dadas por:

$$\nu_0 = \frac{\sqrt{\pi} + 8I_1(-iL)I_2(-iL)}{1 - 4I_1(-iL)I_1(-iL)}, \quad \nu_L = \frac{4I_2(-iL) + 2\sqrt{\pi}I_1(-iL)}{1 - 4I_1(-iL)I_1(-iL)}, \quad (8.27)$$

com as funções  $I_n(z)$  definidas em (4.43). Substituindo a solução (8.26) em (7.28)-(7.32), as seguintes expressões para as características macroscópicas do gás no regime de oscilação rápida e rarefação baixa são obtidas:

$$\varrho(x) = \frac{\nu_L}{\sqrt{\pi}} I_0[i(x-L)] + \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_1(-ix) + \frac{\nu_0}{\sqrt{\pi}} I_0(-ix), \quad (8.28)$$

$$u(x) = -\frac{\nu_L}{\sqrt{\pi}} I_1[i(x-L)] + \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_2(-ix) + \frac{\nu_0}{\sqrt{\pi}} I_1(-ix), \quad (8.29)$$

$$\begin{aligned} \tau(x) = \frac{\nu_L}{3\sqrt{\pi}} \{2I_2[i(x-L)] - I_0[i(x-L)]\} + \frac{4}{3\sqrt{\pi}} I_3(-ix) \\ - \frac{2}{3\sqrt{\pi}} I_1(-ix) + \frac{\nu_0}{3\sqrt{\pi}} [2I_2(-ix) - I_0(-ix)], \end{aligned} \quad (8.30)$$

$$q(x) = -\frac{\nu_L}{\sqrt{\pi}} \left\{ I_3[i(x-L)] - \frac{3}{2} I_1[i(x-L)] \right\} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_4(-ix)$$

$$-\frac{3}{\sqrt{\pi}}I_2(-ix) + \frac{\nu_0}{\sqrt{\pi}} \left[ I_3(-ix) - \frac{3}{2}I_1(-ix) \right], \quad (8.31)$$

$$\Pi(x) = \frac{\nu_L}{\sqrt{\pi}}I_2[i(x-L)] + \frac{2}{\sqrt{\pi}}I_3(-ix) + \frac{\nu_0}{\sqrt{\pi}}I_2(-ix). \quad (8.32)$$

No limite  $\delta \ll \theta$ , que corresponde à situação em a distância de separação entre fonte e receptor é muito pequena, é possível obter o comportamento assintótico das amplitudes e fases dos momentos dados em (8.28)-(8.32) no receptor, i.e. em  $x = L$ . Dessa forma, usando a representação em série de potências dada em (A.4) e após algumas manipulações algébricas, os seguintes comportamentos assintóticos são obtidos para as amplitudes e fases em  $x = L$ :

$$A_n \rightarrow \frac{1}{L}, \quad \varphi_n \rightarrow \frac{\pi}{2} - \frac{L}{2\sqrt{\pi}}, \quad (8.33)$$

$$A_T \rightarrow \frac{|\ln L|}{3\sqrt{\pi}}, \quad \varphi_T \rightarrow \frac{\pi}{2} + \tan^{-1} \left( \frac{2 \ln L}{\pi} \right), \quad (8.34)$$

$$A_q \rightarrow \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{\pi}}{8}L, \quad \varphi_T \rightarrow -\frac{L \ln L}{2\sqrt{\pi}}, \quad (8.35)$$

$$A_P \rightarrow \frac{1}{2L}, \quad \varphi_P \rightarrow \frac{\pi}{2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}}L \ln L. \quad (8.36)$$

Note que nesse limite, i.e.  $\delta \ll \theta$ , a velocidade  $u(x)$  dada em (8.28) é zero no receptor.

No limite oposto, i.e.  $\delta \gg \theta$ , utilizando a representação em série de potências (A.8) em (8.27), a solução (8.26) tende à mesma solução encontrada no Capítulo 7 para propagação do som no espaço semi-infinito. Consequentemente, nesse limite os momentos dados em (8.28)-(8.32) em  $x = L$  são iguais aos encontrados anteriormente em (7.42)-(7.46). Portanto, quando  $L \gg 1$ , as amplitudes dos momentos são dadas pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} A_n &= \left( \frac{2}{L} \right)^{2/3} \mathcal{D}, & A_u &= \left( \frac{2}{L} \right)^{1/3} \mathcal{D}, & A_T &= \frac{2}{3} \mathcal{D}, \\ A_q &= \left( \frac{L}{2} \right)^{1/3} \mathcal{D}, & A_P &= \frac{1}{2} \mathcal{D}, \end{aligned} \quad (8.37)$$

onde

$$\mathcal{D} = \frac{L}{\sqrt{3}} \exp \left[ -\frac{3}{2} \left( \frac{L}{2} \right)^{2/3} \right],$$

enquanto que as fases são todas iguais a

$$\varphi_j = \frac{3\sqrt{3}}{2} \left( \frac{L}{2} \right)^{2/3}, \quad j = n, u, T, q, P. \quad (8.38)$$

## 8.5 Regime de transição

Para resolver a equação (7.27) a integral de colisões é substituída pelo modelo de Shakhov (2.57) e as variáveis  $c_y$  e  $c_z$  são eliminadas via introdução das funções  $\Phi(x, c_x)$  e  $\Psi(x, c_x)$  definidas em (7.51) e (7.52). Portanto, as equações a serem resolvidas são as mesmas da Seção 7.5 do Capítulo 7, ou seja, equações (7.53) e (7.54). A diferença está nas condições de contorno, que agora são as seguintes:

(i) Placa oscilatória, localizada em  $x = 0$  (fonte):

$$\begin{aligned}\Phi(0, c_x) &= 2c_x + \nu_0, & c_x > 0; \\ \Psi(0, c_x) &= 0, & c_x > 0,\end{aligned}\tag{8.39}$$

onde a constante  $\nu_0$  é dada por:

$$\nu_0 = \sqrt{\pi} - 2 \int_{c_x < 0} c_x \Phi(0, c_x) \exp(-c_x^2) dc_x.\tag{8.40}$$

(ii) Placa estacionária, localizada em  $x = L = \delta/\theta$  (receptor):

$$\begin{aligned}\Phi(L, c_x) &= \nu_L, & c_x < 0; \\ \Psi(L, c_x) &= 0, & c_x < 0,\end{aligned}\tag{8.41}$$

onde a constante  $\nu_L$  é dada por:

$$\nu_L = \int_{c_x > 0} c_x \Phi(L, c_x) \exp(-c_x^2) dc_x.\tag{8.42}$$

Visando diminuir o comportamento oscilatório das funções  $\Phi(x, c_x)$  e  $\Psi(x, c_x)$  na variável  $c_x$ , essas funções são divididas em duas partes, ou seja,

$$\begin{aligned}\Phi(x, c_x) &= \Phi_0(x, c_x) + \tilde{\Phi}(x, c_x), \\ \Psi(x, c_x) &= \Psi_0(x, c_x) + \tilde{\Psi}(x, c_x),\end{aligned}\tag{8.43}$$

com as funções  $\Phi_0(x, c_x)$  e  $\Psi_0(x, c_x)$  satisfazendo as seguintes equações diferenciais:

$$(\theta - i)\Phi_0 + c_x \frac{\partial \Phi_0}{\partial x} = 0,\tag{8.44}$$

$$(\theta - i)\Psi_0 + c_x \frac{\partial \Psi_0}{\partial x} = 0.\tag{8.45}$$

A função  $\Phi_0(x, c_x)$  satisfaz as seguintes condições de contorno na fonte e receptor, i.e. em  $x = 0$  e  $x = L$ :

$$\Phi_0(x, c_x) = \begin{cases} 2c_x + \sqrt{\pi} + \nu_{00}, & \text{em } x = 0 & \text{e } c_x > 0, \\ \nu_{01}, & \text{em } x = L & \text{e } c_x < 0, \end{cases}\tag{8.46}$$

onde as constantes  $\nu_{00}$  e  $\nu_{01}$  são dadas, respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$\nu_{00} = 2\nu_{01}I_1[(\theta - i)L], \quad \nu_{01} = \frac{4I_2[(\theta - i)L] + 2\sqrt{\pi}I_1[(\theta - i)L]}{1 - 4I_1[(\theta - i)L]I_1[(\theta - i)L]}, \quad (8.47)$$

as quais são obtidas via uso de (8.40) e (8.42).

Já as condições de contorno para a função  $\Psi_0(x, c_x)$  na fonte e no receptor são as seguintes:

$$\Psi_0(x, c_x) = \begin{cases} 0, & \text{em } x = 0 \quad \text{e } c_x > 0, \\ 0, & \text{em } x = L \quad \text{e } c_x < 0. \end{cases} \quad (8.48)$$

Portanto, a solução da equação (8.44) que satisfaz as condições de contorno dadas em (8.46) é a seguinte:

$$\Phi_0(x, c_x) = \begin{cases} (2c_x + \sqrt{\pi} + \nu_{00}) \exp\left[-(\theta - i)\frac{x}{c_x}\right], & c_x > 0, \\ \nu_{01} \exp\left[-(\theta - i)\frac{(x - L)}{c_x}\right], & c_x < 0. \end{cases} \quad (8.49)$$

Por outro lado, a solução da equação (8.45) que satisfaz as condições de contorno dadas em (8.48) é dada por:

$$\Psi_0(x, c_x) = 0, \quad c_x \leq 0. \quad (8.50)$$

Substituindo as representações dadas em (8.43) nas equações (7.53) e (7.54), e utilizando (8.44) e (8.45), as seguintes equações são obtidas para as funções  $\tilde{\Phi}(x, c_x)$  e  $\tilde{\Psi}(x, c_x)$ :

$$(\theta - i)\tilde{\Phi} + c_x \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial x} = \theta \left[ \varrho + 2c_x u + \tau \left( c_x^2 - \frac{1}{2} \right) + \frac{4}{15} q c_x \left( c_x^2 - \frac{3}{2} \right) \right], \quad (8.51)$$

$$(\theta - i)\tilde{\Psi} + c_x \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial x} = \theta \left( \tau + \frac{4}{15} q c_x \right). \quad (8.52)$$

Substituindo as representações dadas em (8.43) nas condições de contorno (8.39) e (8.41), as seguintes condições de contorno são obtidas para as funções  $\tilde{\Phi}(x, c_x)$  e  $\tilde{\Psi}(x, c_x)$  na fonte e receptor, i.e. em  $x = 0$  e  $x = L$ :

$$\tilde{\Phi}(x, c_x) = \begin{cases} -2 \int_{c_x < 0} c_x \tilde{\Phi}(0, c_x) \exp(-c_x^2) dc_x, & \text{em } x = 0 \quad \text{e } c_x > 0, \\ 2 \int_{c_x > 0} c_x \tilde{\Phi}(L, c_x) \exp(-c_x^2) dc_x, & \text{em } x = L \quad \text{e } c_x < 0. \end{cases} \quad (8.53)$$

$$\Psi(x, c_x) = \begin{cases} 0, & \text{em } x = 0 \quad \text{e } c_x > 0, \\ 0, & \text{em } x = L \quad \text{e } c_x < 0. \end{cases} \quad (8.54)$$

Os momentos que aparecem nas equações (8.51) e (8.52) também são divididos em duas partes, ou seja,

$$\begin{bmatrix} \varrho(x) \\ u(x) \\ \tau(x) \\ q(x) \\ \Pi(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varrho_0(x) \\ u_0(x) \\ \tau_0(x) \\ q_0(x) \\ \Pi_0(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tilde{\varrho}(x) \\ \tilde{u}(x) \\ \tilde{\tau}(x) \\ \tilde{q}(x) \\ \tilde{\Pi}(x) \end{bmatrix}, \quad (8.55)$$

onde os momentos com índice 0 são calculados via substituição das soluções (8.49) e (8.50) nas expressões dadas em (7.55)-(7.58) tal que:

$$\varrho_0(x) = \frac{\nu_{01}}{\sqrt{\pi}} I_0[-(\theta - i)(x - L)] + \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_1[(\theta - i)x] + \left(1 + \frac{\nu_{00}}{\sqrt{\pi}}\right) I_0[(\theta - i)x], \quad (8.56)$$

$$u_0(x) = -\frac{\nu_{01}}{\sqrt{\pi}} I_1[-(\theta - i)(x - L)] + \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_2[(\theta - i)x] + \left(1 + \frac{\nu_{00}}{\sqrt{\pi}}\right) I_1[(\theta - i)x], \quad (8.57)$$

$$\begin{aligned} \tau_0(x) = \frac{2\nu_{01}}{3\sqrt{\pi}} \left\{ I_2[-(\theta - i)(x - L)] - \frac{1}{2} I_0[-(\theta - i)(x - L)] \right\} + \frac{4}{3\sqrt{\pi}} I_3[(\theta - i)x] \\ - \frac{2}{3\sqrt{\pi}} I_1[(\theta - i)x] + \frac{2}{3} \left(1 + \frac{\nu_{00}}{\sqrt{\pi}}\right) \left\{ I_2[(\theta - i)x] - \frac{2}{3} I_0[(\theta - i)x] \right\}, \end{aligned} \quad (8.58)$$

$$\begin{aligned} q_0(x) = -\frac{\nu_{01}}{\sqrt{\pi}} \left\{ I_3[-(\theta - i)(x - L)] - \frac{3}{2} I_1[-(\theta - i)(x - L)] \right\} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_4[(\theta - i)x] \\ - \frac{3}{\sqrt{\pi}} I_2[(\theta - i)x] + \left(1 + \frac{\nu_{00}}{\sqrt{\pi}}\right) \left\{ I_3[(\theta - i)x] - \frac{3}{2} I_1[(\theta - i)x] \right\}, \end{aligned} \quad (8.59)$$

A quantidade  $\Pi_0(x)$  é calculada substituindo (8.48) em (7.59) de modo que a seguinte expressão é obtida:

$$\Pi_0(x) = \frac{\nu_{01}}{\sqrt{\pi}} I_2[-(\theta - i)(x - L)] + \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_3[(\theta - i)x] + \left(1 + \frac{\nu_{00}}{\sqrt{\pi}}\right) I_2[(\theta - i)x], \quad (8.60)$$

As integrais  $I_n(z)$  que aparecem nas expressões (8.56)-(8.60) são definidas em (4.43) e são calculadas via aproximações em série de potências dadas no Apêndice A.

Portanto, como as soluções  $\Phi_0(x, c_x)$  e  $\Psi_0(x, c_x)$  são conhecidas analiticamente, a solução do problema se limita a resolver as equações (8.51) e (8.52) com condições de contorno dadas em (8.53) e (8.54). A solução dessas equações é feita via método de velocidades discretas do mesmo modo que no capítulo anterior, ou seja, as equações (8.51) e (8.52) são discretizadas e resolvidas via método iterativo no qual, para cada ponto de velocidade  $c_{xj}$ , o sistema de equações discretizadas na variável  $x$  é resolvido.

### 8.5.1 Resultados numéricos e discussão

As Tabelas 8.1 e 8.2 apresentam a amplitude e fase de  $\Pi(x)$  nas placas, ou seja, em  $x = 0$  e  $x = L$ , para parâmetro de oscilação  $\theta = 0, 1; 1$  e 10 e parâmetro de rarefação  $\delta$  variando de

0 a 20. Os resultados obtidos via expressão (8.16) também são apresentados para comparação com os respectivos resultados numéricos. O comprimento de penetração da onda, denotado por  $\lambda$  e definido como a distância na qual a amplitude da velocidade do gás corresponde a 1% da amplitude da velocidade da placa oscilatória, é apresentado para os três valores de  $\theta$  considerados. Como o receptor está localizado em  $x = L = \delta/\theta$ , é necessário realizar os cálculos numéricos somente nos casos em que  $L < \lambda$ .

Tabela 8.1: Amplitude de  $\Pi(x)$  versus  $\delta$  e  $\theta$  em  $x = 0$  e  $x = L$ .

$\delta$	$A_P$							
	$\theta = 0,1$ $\lambda = 16,44$		$\theta = 1$ $\lambda = 18,16$		$\theta = 10$ $\lambda = 53,63$		Eq. (8.16) $\theta = 10$	
	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$
0,1	0,6255	1,1066	5,2343	5,2837	47,587	47,592	50,476	50,482
0,5	0,9709	0,5259	1,1764	1,4119	10,036	10,061	10,122	10,147
1	1,0076	0,1438	0,5337	1,0044	5,0386	5,0884	5,0796	5,1288
2	1,0065	0,01174	0,7686	1,0295	2,4563	2,6452	2,5655	2,6632
4	1,0066	0,00010	0,9645	0,5817	1,3130	1,5096	1,3242	1,5179
6	1,0066	0,00000	0,9695	0,3173	0,8822	1,1820	0,8931	1,1885
8	1,0066	0,00000	0,9553	0,1584	0,6156	1,0311	0,6266	1,0364
10	1,0066	0,00000	0,9617	0,08490	0,4045	0,9481	0,4153	0,9514
15	—	—	0,9600	0,01640	0,2242	0,9191	0,2312	0,9144
20	—	—	0,9599	0,003187	0,7795	1,1621	0,7655	1,1385

Tabela 8.2: Fase de  $\Pi(x)$  versus  $\delta$  e  $\theta$  em  $x = 0$  e  $x = L$ .

$\delta$	$\varphi_P$							
	$\theta = 0,1$ $\lambda = 16,44$		$\theta = 1$ $\lambda = 18,16$		$\theta = 10$ $\lambda = 53,63$		Eq. (8.16) $\theta = 10$	
	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$	$x = 0$	$x = L$
0,1	0,8106	1,2046	1,4016	1,4032	1,5480	1,5480	1,4331	1,4331
0,5	0,0730	3,9153	1,0924	1,1787	1,5047	1,5048	1,4116	1,4120
1	-0,0056	6,6754	0,7191	1,1963	1,4598	1,4609	1,3832	1,3850
2	-0,0109	11,165	-0,6391	1,7093	1,3830	1,3901	1,3233	1,3326
4	-0,0108	17,762	0,0766	3,7487	1,2594	1,3015	1,2136	1,2615
6	-0,0108	22,909	-0,1187	5,3538	1,1831	1,2878	1,1432	1,2577
8	-0,0108	28,297	-0,0659	7,0394	1,1264	1,3224	1,0907	1,3009
10	-0,0108	38,171	-0,0791	8,7046	1,0200	1,3756	0,9868	1,3617
15	—	—	-0,0765	12,894	-0,6308	1,5341	-0,5837	1,5352
20	—	—	-0,0766	17,075	-1,0726	1,7758	-1,0418	1,7891

De acordo com as Tabelas 8.1 e 8.2 observa-se que:



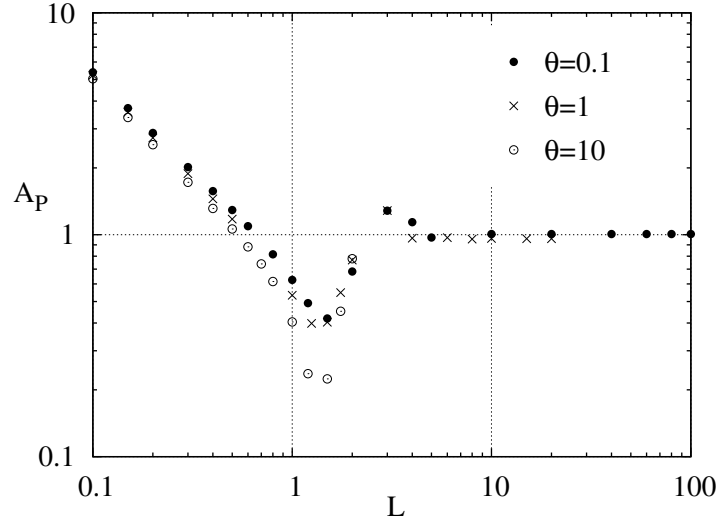
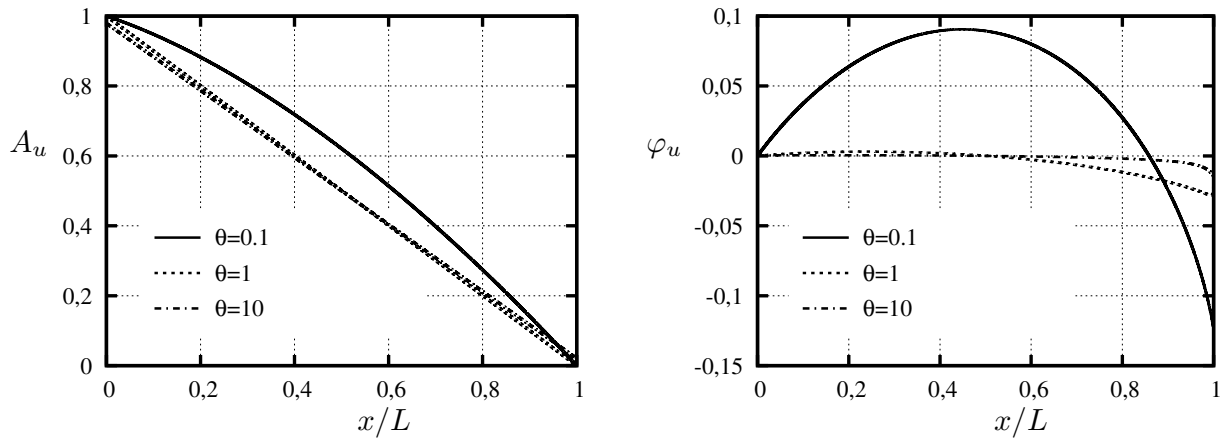


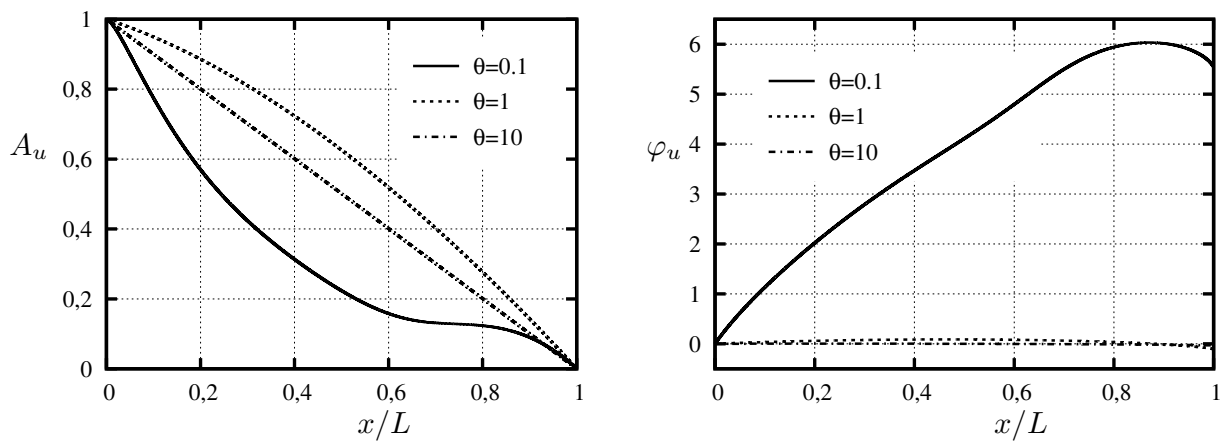
Figura 8.5: Perfil da amplitude de  $\Pi(x)$  no receptor

- (i) Para um valor fixo de parâmetro de oscilação  $\theta$  a amplitude  $A_P$  possui uma dependência não-monotônica no parâmetro de rarefação  $\delta$  em ambas as placas. Para uma melhor visualização o perfil da amplitude  $A_P$  em função de  $L$  é mostrado na Figura 8.5. De acordo com essa figura, no intervalo  $\theta < \delta < 2\theta$  a amplitude  $A_P$  possui um mínimo e para valores de parâmetro de rarefação  $\delta > 10\theta$  a amplitude tende a um valor constante. Para um valor fixo de  $L$  a amplitude sempre é menor para rarefação baixa e oscilação lenta, ou seja, quanto maior  $\delta$  e  $\theta$  menor a amplitude  $A_P$ . Isso se deve ao fato de que quanto mais rarefeito for o gás, menor os efeitos de viscosidade que tendem a amortecer a amplitude da oscilação e, conseqüentemente, no regime de rarefação alta o receptor tende a captar mais colisões moleculares por unidade de área do que no regime de rarefação baixa.
- (ii) Para um valor fixo de parâmetro de rarefação  $\delta$  a fase  $\varphi_P$  tende a aumentar com o aumento do parâmetro de oscilação  $\theta$ . Os valores negativos de  $\varphi_P$  indicam que a fase de  $\Pi(x)$  está atrasada em relação à fase da velocidade da placa. Para um valor fixo de parâmetro de oscilação  $\theta$ , o comportamento de  $\varphi_P$  em função de  $\delta$  é similar ao da amplitude  $A_P$ .
- (iii) Quando  $\delta \gg \theta$ , a amplitude  $A_P$  e a fase  $\varphi_P$  tendem aos mesmos valores encontrados no Capítulo 7. Como mencionado anteriormente, nessa situação os efeitos devidos à influência da placa estacionária podem ser desprezados.
- (iv) Para valores grandes de  $\delta$  e  $\theta$  a solução numérica tende à solução analítica dada em (8.16). Para  $\theta = 10$ , por exemplo, à medida que  $\delta$  aumenta os valores numéricos e os obtidos via expressão (8.16) tendem a se aproximar mostrando uma boa concordância com os resultados obtidos via equações de Navier-Stokes.

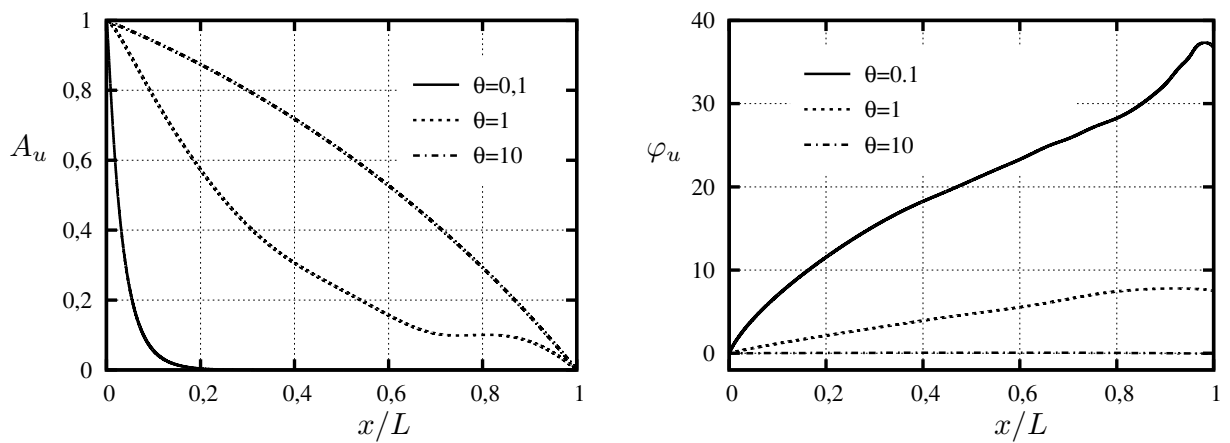
As Figuras 8.6-8.8 mostram os perfis das amplitudes e fases da velocidade hidrodinâmica  $u(x)$ , componente normal do tensor pressão  $\Pi(x)$  e desvio de temperatura  $\tau(x)$  para valores de  $\theta$  e  $\delta$  iguais a 0,1; 1 e 10.



(a) Parâmetro de rarefação  $\delta = 0,1$

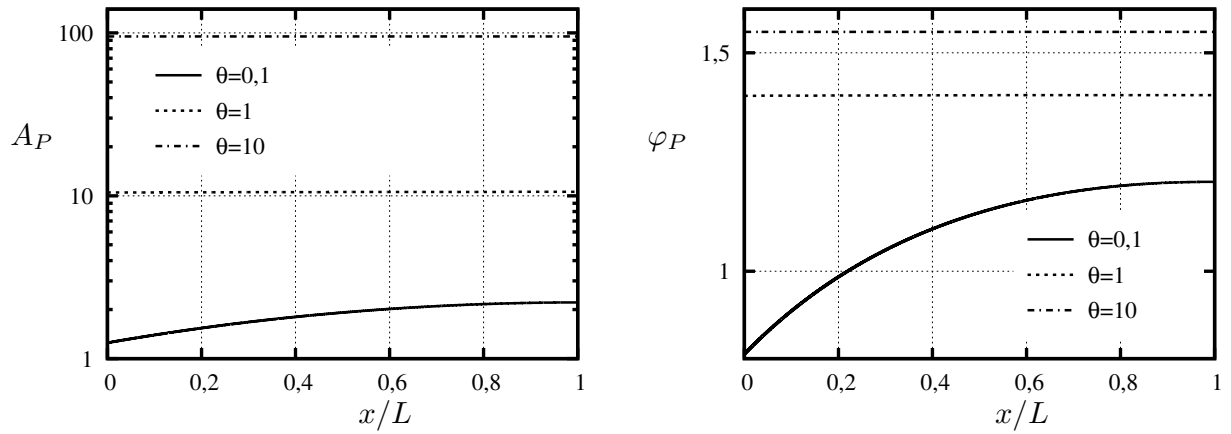


(b) Parâmetro de rarefação  $\delta = 1$

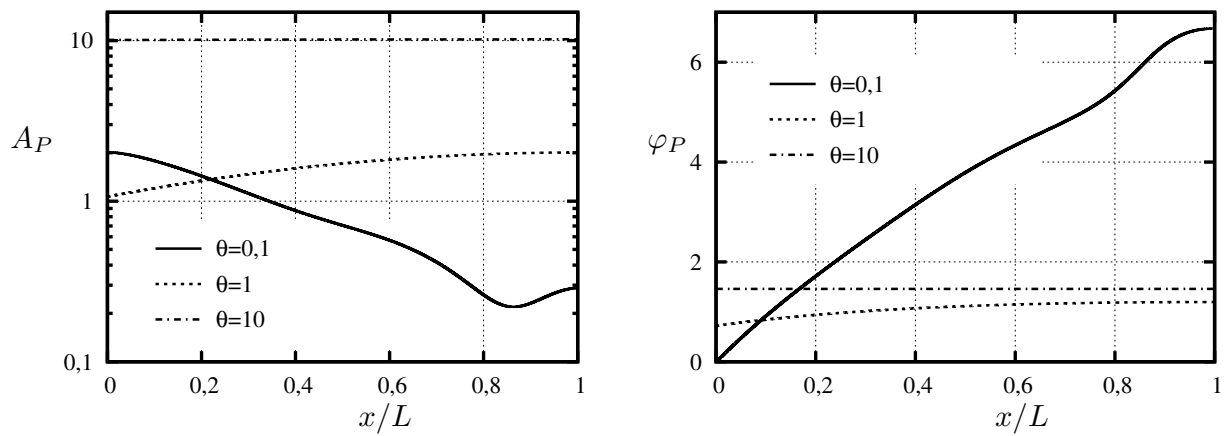


(c) Parâmetro de rarefação  $\delta = 10$

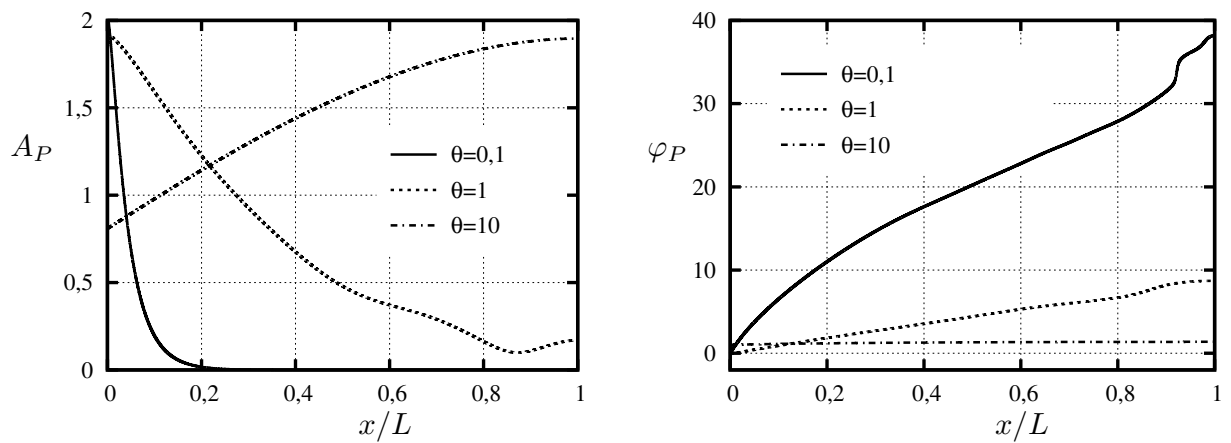
Figura 8.6: Amplitude e fase da velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  versus distância  $x/L$ .



(a) Parâmetro de rarefação  $\delta = 0,1$

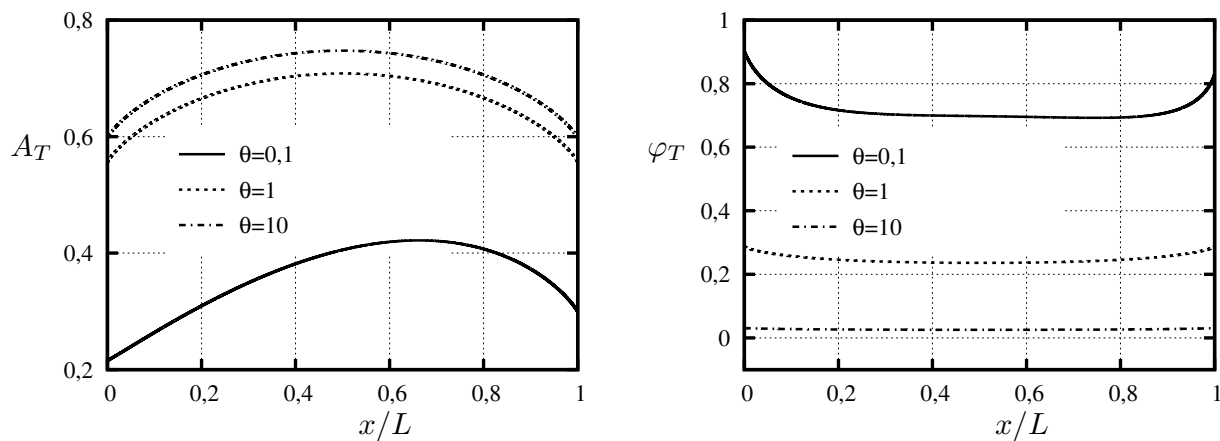


(b) Parâmetro de rarefação  $\delta = 1$

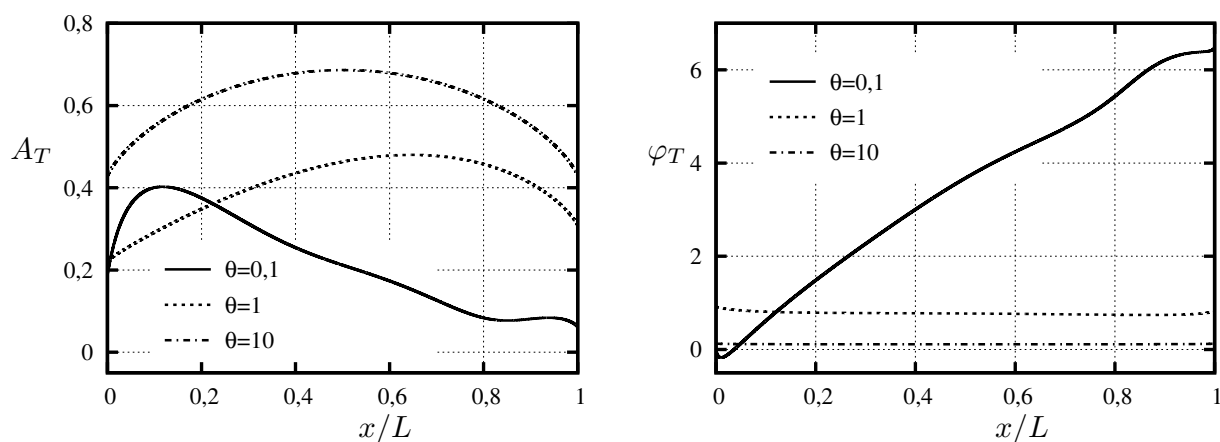


(c) Parâmetro de rarefação  $\delta = 10$

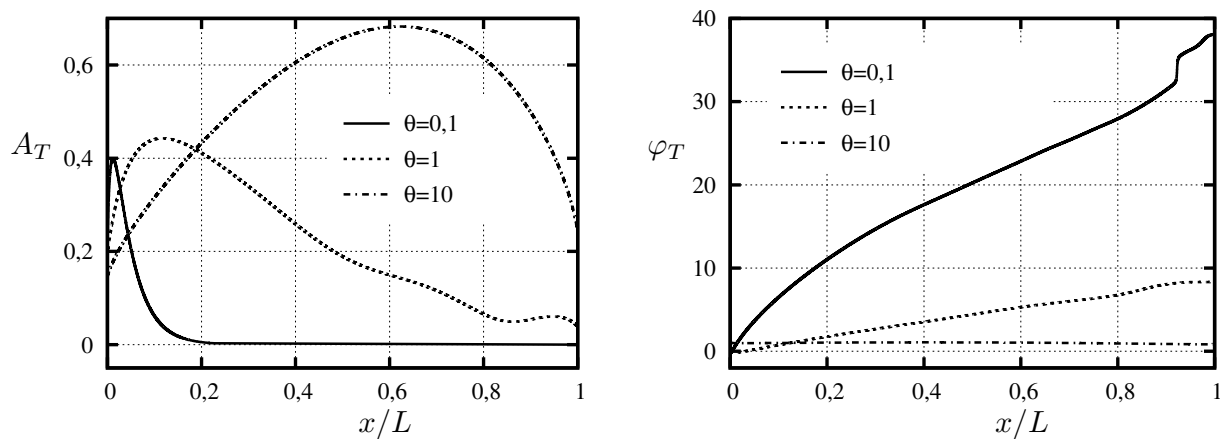
Figura 8.7: Amplitude e fase da componente normal do tensor pressão  $\Pi(x)$  versus distância  $x/L$ .



(a) Parâmetro de rarefação  $\delta = 0,1$



(b) Parâmetro de rarefação  $\delta = 1$



(c) Parâmetro de rarefação  $\delta = 10$

Figura 8.8: Amplitude e fase do desvio de temperatura  $\tau(x)$  versus distância  $x/L$ .

Dessas figuras verifica-se que:

- (i) Nas situações em que  $L$  é muito maior que o comprimento de penetração  $\lambda$  da onda, dado na Tabela 8.1, as amplitudes e fases de todas as quantidades possuem os mesmos perfis

encontrados no Capítulo 7 para propagação do som no espaço semi-infinito. Caso contrário, os perfis são modificados devido à influência do receptor que é responsável pela superposição de ondas que ocorre entre as placas e que tende a mudar os perfis das atenuações e fases.

- (ii) Em todas essas figuras é possível verificar que, para valores iguais de  $L$ , as amplitudes e fases possuem o mesmo perfil qualitativo. Por exemplo, na Figura 8.6 o perfil da amplitude  $A_u$  e da fase  $\varphi_u$  é o mesmo na situação em que  $L = 0, 1$  e também quando  $L = 1$  e  $L = 10$ . Porém, à medida que  $\delta$  aumenta, o que corresponde a uma tendência ao regime hidrodinâmico, o perfil qualitativo tende a ser diferente devido a formação de ondas estacionárias. Na Figura 8.9 o perfil da amplitude  $A_u$  é mostrado para  $\delta = 100$  e  $\theta = 10$ , correspondendo a  $L = 10$ . De acordo com essa figura, o perfil qualitativo é totalmente diferente do apresentado anteriormente na Figura 8.6 quando  $L = 10$ .

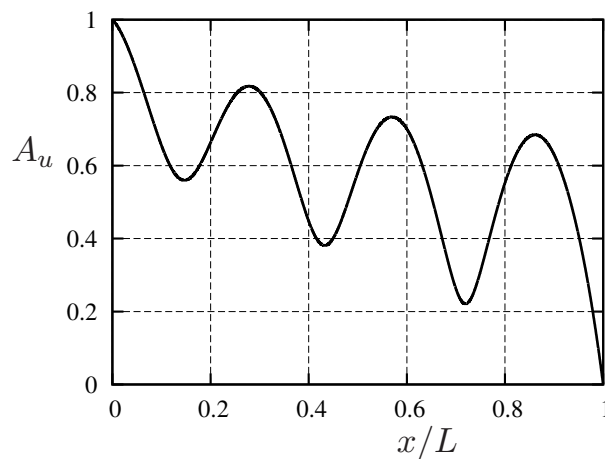


Figura 8.9: Amplitude da velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  para  $\delta = 100$  e  $\theta = 10$ .

Isso ocorre porque nessa situação em que  $\delta = 100$  o gás está no regime hidrodinâmico no qual há predominância de ondas estacionárias.

- (iii) No regime de rarefação alta ( $\delta = 0, 1$ ) a amplitude da velocidade do gás varia linearmente com a distância  $x$  quando a frequência de oscilação é baixa, i.e.  $\theta$  é grande. Consequentemente, a componente normal do tensor pressão é uma quantidade constante no regime de rarefação alta e oscilação lenta. Fixando  $\theta$  e aumentando  $\delta$  (o que é possível com pressão fixa e aumento da distância de separação entre as placas), o perfil de  $A_u$  tende a se desviar do perfil linear e, dependendo das condições de pressão do gás e oscilação do sistema, há formação de onda estacionária.
- (iv) A fase  $\varphi_u$  é maior para pequenos valores de  $\theta$ , ou seja, para altas frequências de oscilação. Porém, nas proximidades da placa estacionária o comportamento da fase é diferente devido à superposição de ondas incidente e refletida. Assim, para  $\theta = 0, 1$  e  $\delta = 0, 1$  a fase é negativa nas proximidades do receptor mas tende a aumentar com o aumento de  $\delta$ , ou seja, para  $\theta$  fixo os efeitos das ondas refletidas pelo receptor tendem a diminuir com o aumento de  $\delta$ .

## 8.5.2 Comparação dos resultados obtidos via equação cinética e equações de Navier-Stokes

As Figuras 8.10-8.12 mostram uma comparação entre os perfis das amplitudes e fases da velocidade hidrodinâmica  $u(x)$  e dos desvios de densidade  $\rho(x)$  e temperatura  $\tau(x)$  obtidos numericamente via solução da equação cinética e equações de Navier-Stokes dadas na Seção 8.2 do presente capítulo. Os perfis apresentados nessas figuras correspondem a parâmetro de oscilação  $\theta = 20$  e, em cada figura, dois valores de parâmetro de rarefação são considerados:  $\delta = 100$  e  $200$ .

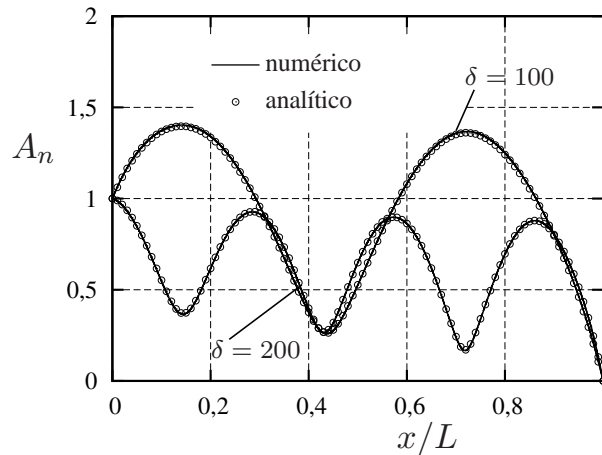


Figura 8.10: Perfil da amplitude da velocidade hidrodinâmica para  $\theta = 20$

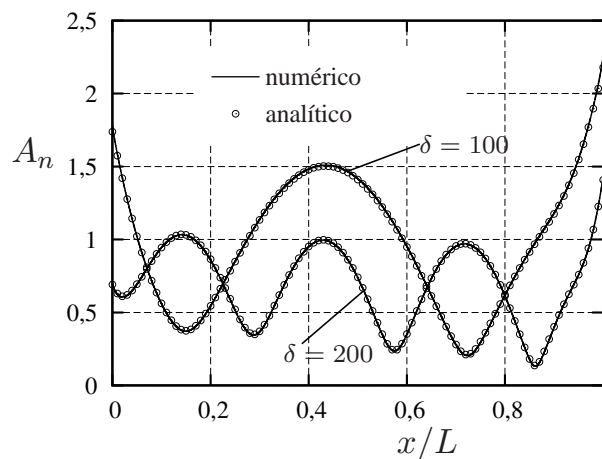


Figura 8.11: Perfil da amplitude do desvio de densidade para  $\theta = 20$ .

De acordo com as Figuras 8.10-8.12, os perfis obtidos via equação cinética e equações de Navier-Stokes estão em ótima concordância entre si. Nas proximidades das paredes também é possível observar essa concordância. Segundo a teoria clássica de propagação do som em gases, apresentada no Capítulo 2, a solução do presente problema é uma combinação de duas soluções de onda plana se propagando em direções opostas. Porém, quando o problema é resolvido utilizando a solução prevista pela teoria clássica, a concordância com os resultados obtidos via equação

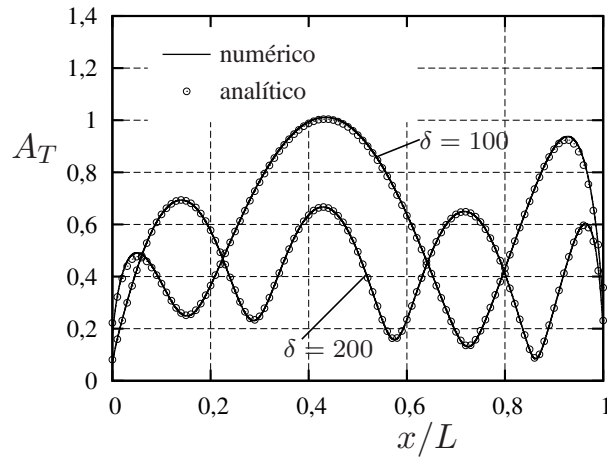


Figura 8.12: Perfil da amplitude do desvio de temperatura para  $\theta = 20$ .

cinética ocorre somente para valores muito grandes de  $\delta$  e  $\theta$  e na região distante das placas. Nas proximidades das placas, mesmo com a utilização da condição de contorno de salto de temperatura nas paredes, não há boa concordância entre as soluções. Para uma melhor visualização, na Figura 8.13 o perfil do desvio de temperatura apresentado anteriormente na Figura 8.12 para  $\theta = 20$  e  $\delta = 100$  é comparado com o perfil obtido via solução clássica.

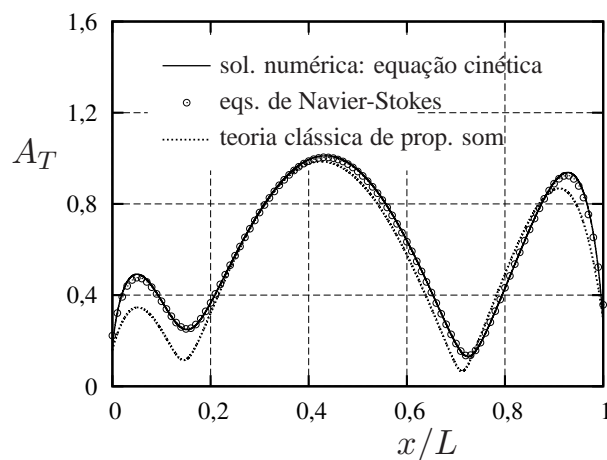


Figura 8.13: Amplitude do desvio de temperatura para  $\theta = 20$  e  $\delta = 100$ .

De acordo com a Figura 8.13, nas proximidades das paredes o perfil qualitativo das soluções é o mesmo mas existe uma grande diferença quantitativa entre as soluções. Essa diferença quantitativa tende a diminuir com o aumento do parâmetro  $\delta$  já que a espessura da camada de Knudsen diminui à medida que a rarefação do gás diminui.

# Capítulo 9

## Conclusão e perspectivas

No presente trabalho de tese de doutorado alguns problemas de escoamentos não estacionários de gases rarefeitos foram investigados com base em modelos cinéticos para a equação de Boltzmann não-estacionária. Modelos cinéticos são utilizados pois, mesmo com o avanço computacional dos dias atuais, resolver a equação de Boltzmann na forma exata ainda é um grande desafio para problemas estacionários e, nos problemas não-estacionários tratados na presente tese de doutorado o desafio é maior ainda pois existe a questão do comportamento oscilatório da função de distribuição na velocidade molecular. Mesmo com a utilização de modelos cinéticos, a maior dificuldade em resolver os problemas não-estacionários propostos está associada à complexidade do comportamento da função de distribuição no espaço das velocidades moleculares. Inicialmente, visando averiguar a confiabilidade dos resultados obtidos, já que na literatura existem poucos resultados disponíveis para comparação, dois métodos diferentes de cálculo foram utilizados: método de velocidades discretas e método dos momentos integrais. Verificou-se que o método de velocidades discretas fornece resultados confiáveis e, ao contrário do método dos momentos integrais, permite facilmente o uso de qualquer tipo de lei de interação gás-superfície e é computacionalmente mais vantajoso que o método dos momentos integrais. Uma característica típica do método de velocidades discretas é que, quando os parâmetros de rarefação do gás e oscilação do sistema são grandes, o número de iterações necessárias para atingir a convergência do código numérico é muito grande. Visando diminuir esse esforço computacional, um método de aceleração de convergência baseado em polinômios de Hermite é utilizado e, no caso de fluxo de Couette oscilatório, foi extremamente eficaz. Um método de otimização também foi utilizado com o objetivo de diminuir o comportamento oscilatório da função de perturbação e assim viabilizar os cálculos numéricos. Além da solução numérica, os problemas foram resolvidos analiticamente nos regimes de rarefação do gás e oscilação do sistema que admitem solução analítica. O estudo da influência da interação gás-superfície na solução dos problemas também foi feito com base no núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis, o qual depende dos coeficientes de acomodação de momento tangencial e energia cuja escolha determina o tipo de interação gás-superfície assumido.

As equações da Mecânica dos Meios Contínuos sempre foram a base da descrição de escoamentos de fluidos em geral e são amplamente utilizadas e conhecidas nos campos de engenharia.



Porém, hoje em dia é conhecido que essas equações não são válidas para descrever os campos de escoamento de fluidos em muitos sistemas de interesse, como por exemplo em sistemas com dimensões da ordem de  $\mu m$  ou menos. Visando mostrar o intervalo de validade dessas equações, os resultados numéricos obtidos no presente trabalho são comparados com os resultados obtidos via equações de Navier-Stokes. Além disso, em problemas envolvendo propagação de ondas sonoras, a teoria clássica de propagação do som em gases, que se baseia nas equações de Navier-Stokes e suposição de que todas as características macroscópicas do gás sofrem desvios proporcionais à solução de onda harmônica  $\exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$  com atenuação proporcional a  $1/\theta$ , é muito utilizada mas, como mostrado no presente trabalho, a solução clássica tem um intervalo de validade bem definido: regime de oscilação lenta e rarefação baixa. Além disso, a solução de onda harmônica só é válida na região distante da fonte sonora.

Mesmo com a atual importância a nível teórico e prático de prever o comportamento de gases em sistemas não-estacionários nos quais as usuais equações da Mecânica dos Meios Contínuos não são válidas, ainda há falta de artigos referentes ao assunto na literatura. Portanto, como os resultados obtidos via equação cinética são válidos para condições arbitrárias de rarefação do gás e oscilação do sistema, os resultados obtidos no presente trabalho contribuem para um melhor entendimento e descrição dos fenômenos que ocorrem em sistemas nos quais a hipótese de meio contínuo sob a qual está fundamentada a Mecânica dos Meios Contínuos perde sua validade.

Parte dos resultados obtidos neste trabalho já foram publicados nas Refs. [99–101] e os demais serão publicados em breve. Parte do trabalho também foi apresentado no XXV e XXVI Simpósio Internacional em Dinâmica de Gases Rarefeitos, principal evento na área de DGR e que vem sendo realizado desde 1958, com publicação de trabalho completo nos anais do congresso [102].

Além disso, os conhecimentos adquiridos durante a realização deste trabalho e a metodologia desenvolvida podem ser utilizados para investigar outros problemas envolvendo processos não-estacionários em gases rarefeitos. Exemplos de tais problemas são os seguintes:

- Problemas de termo-acústica;
- Separação de gases devido à propagação do som, um assunto de grande interesse experimental que ainda não é explicado de forma satisfatória;
- Propagação do som em gases confinados no interior de tubos e canais;
- Propagação do som em gases diatômicos e misturas de gases;
- Problemas não lineares;
- Problemas axi-simétricos.

Recentemente, a metodologia desenvolvida neste trabalho foi utilizada em colaboração no projeto KATRIN<sup>1</sup> (KARlsruhe TRItium Neutrino experiment), cujo objetivo é determinar a massa

---

<sup>1</sup>Maiores detalhes sobre o projeto KATRIN podem ser encontrados em <http://www.ik1.fzk.de/tritium> e também em <http://fisica.ufpr.br/sharipov>.

dos neutrinos, com o objetivo de averiguar o comportamento dos gases utilizados no equipamento experimental frente à variação temporal na temperatura de alguma superfície do equipamento utilizado e também verificar se a influência do fenômeno de separação de gases devido à propagação de ondas sonoras é significativa nas condições de realização do experimento.

# Referências Bibliográficas

- [1] C Cercignani. *The Boltzmann Equation and its Application*. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [2] G M Kremer. *Uma introdução à equação de Boltzmann*. Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brazil, 2005.
- [3] E H Kennard. *Kinetic Theory of Gases*. McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1938.
- [4] C Cercignani. *Theory and Application of the Boltzmann Equation*. Scottish Academic Press, Edinburgh, 1975.
- [5] M N Kogan. *Rarefied Gas Dynamics*. Plenum, New York, 1969.
- [6] J H Ferziger and H G Kaper. *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [7] S Chapman and T G Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. University Press, Cambridge, 1952.
- [8] L Boltzmann. Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gasmolekülen. *Sitzung Berichte Kaiserl. Akad. der Wissenschaften*, 66(2):275–370, 1872.
- [9] M Gad-el-Hak, editor. *The MEMS Handbook*. CRC Press, Florida, USA, 2002.
- [10] D Li, editor. *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*. Springer-Verlag, 2008.
- [11] G E Karniadakis, A Beskok, and A Narayan. *Microflows and Nanoflows - Fundamentals and Simulation*. Springer-Verlag, New York, 2005.
- [12] K Jousten, editor. *Handbook of Vacuum Technology*. Wiley-VCN, Berlin, 2008.
- [13] X Luo, O B Malyshev, Ch Day, V Hauer, RJ Reid, and F Sharipov. Monte Carlo simulation of gas flow through the KATRIN DPS2-F differential pumping system. *Vacuum*, 80(8):864–869, 2006.

- [14] O B Malyshev, Chr Day, X Luo, and F Sharipov. Tritium gas flow dynamics through the source and transport system of the katrin experiment. *J. Vac Sci. Technol. A*, 2008. [accepted].
- [15] G A Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [16] P L Bhatnagar, E P Gross, and M A Krook. A model for collision processes in gases. *Phys. Rev.*, 94:511–525, 1954.
- [17] E M Shakhov. Generalization of the Krook kinetic equation. *Fluid Dynamics*, 3(1):142–145, 1968.
- [18] F J McCormack. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases. *Phys. Fluids*, 16:2095–2105, 1973.
- [19] C S Yamamura. Escoamento hipersônico de um gás rarefeito ao redor de uma esfera. Master's thesis, Pós Graduação em Física, UFPR, <http://fisica.ufpr.br/sharipov/yamamura.pdf>, dezembro 2001. [in Portuguese].
- [20] F Sharipov. Direct simulation Monte Carlo method applied to aerothermodynamics. *J. Braz. Soc. Mechanical Sciences*, 23(4):441–452, 2001.
- [21] F Sharipov. Hypersonic flow of rarefied gas near the brazilian satellite during its reentry into atmosphere. *Brazilian J. Phys.*, 33(2):398–405, 2003.
- [22] F Sharipov. Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice. *J. Fluid Mech.*, 518:35–60, 2004.
- [23] F Sharipov. Rarefied gas flow into vacuum through a thin orifice. Influence of the boundary conditions. *AIAA Journal*, 40(10):2006–2008, 2002.
- [24] J W S Rayleigh. *The theory of sound*, volume 2. Dover, 1945.
- [25] L D Landau and E M Lifshitz. *Fluid Mechanics*. Pergamon, New York, 1989.
- [26] J Lighthill. *Waves in Fluids*. Cambridge University Press, New York, 1978.
- [27] F M Sharipov and E A Subbotin. On optimization of the discrete velocity method used in rarefied gas dynamics. *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 44:572–577, 1993.
- [28] F Sharipov and V Seleznev. Data on internal rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 27(3):657–706, 1998.
- [29] Y Sone. *Molecular Gas Dynamics. Theory, Techniques and Applications*. Birkhäuser, Boston, 2007.

- [30] F Sharipov. Modelling and calculations of gas flows in microfluidics: DSMC vs kinetic equation. In *Microfluidics*. 1st Eur. Conf. on Microfluidics, 2008.
- [31] A O Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: conceitos básicos e aplicações*. Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brazil, 1 edition, 2000.
- [32] J C Maxwell. On stress in rarefied gases arising from inequalities of temperature. *Phil Trans. R. Soc. Lond.*, 1879.
- [33] J C Maxwell. On stress in rarefied gases arising from inequalities of temperature. In W D Niven, editor, *Scientific Papers of James Clerk Maxwell*, volume 2, pages 681–712. Dover Publications, Inc., New York, 1965.
- [34] S Albertoni, C Cercignani, and L Gotusso. Numerical evaluation of the slip coefficient. *Phys. Fluids*, 6(7):993–996, 1963.
- [35] 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(9):1588–1599, 1989.
- [36] 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.
- [37] S K Loyalka. Temperature jump and thermal creep slip: Rigid sphere gas. *Phys. Fluids A*, 1:403–408, 1989.
- [38] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous slip coefficient. *Phys. Fluids*, 15(6):1800–1806, 2003.
- [39] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. II. Thermal slip coefficient. *Phys. Fluids*, 16(3):759–764, 2004.
- [40] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. III. Diffusion slip coefficient. *Phys. Fluids*, 16(10):3779–3785, 2004.
- [41] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. IV. Temperature jump coefficient. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 48(6):1076–1083, 2005.
- [42] J W S Rayleigh. *The theory of sound*, volume 1. Dover, 1945.
- [43] H Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. *Commun. Pure Appl. Math.*, (2):331–407, 1949.
- [44] F Sharipov. Heat transfer in the Knudsen layer. *Phys. Rev. E*, 69(6):061201, 2004.

- [45] C E Siewert. The linearized Boltzmann equation: Concise and accurate solutions to basic flow problems. *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 54:273–303, 2003.
- [46] 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(12):2042–2049, 1989.
- [47] Y Sone, S Takata, and T Ohwada. Numerical analysis of the plane Couette flow of a rarefied gas on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Eur. J. Mech. B / Fluids*, 9(3):273–288, 1990.
- [48] P Welander. On the temperature jump in a rarefied gas. *Arkiv Fys.*, 7(5):507–553, 1954.
- [49] E M Shakhov. Generalization of the Krook kinetic equation. *Izvestia AN SSSR, Mekhanika Zhidkosti i Gaza*, (5):142–145, 1968. translated in [17].
- [50] L Sirovich. Kinetic modeling of gas mixture. *Phys. Fluids*, 5(8):908–918, 1962.
- [51] T F Morse. Kinetic model equations for a gas mixture. *Phys. Fluids*, 7(12):2012–2013, 1964.
- [52] B B Hamel. Kinetic model for binary gas mixture. *Phys. Fluids*, 8(3):418–425, 1965.
- [53] V Garzó, A Santos, and J J Brey. A kinetic model for a multicomponent gas. *Phys. Fluids A*, 1(2):380–383, 1989.
- [54] B T Porodnov, P E Suetin, S F Borisov, and V D Akinshin. Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *J. Fluid Mech.*, 64(3):417–437, 1974.
- [55] B T Porodnov, A N Kulev, and F T Tukhvetov. Thermal transpiration in a circular capillary with a small temperature difference. *J. Fluid Mech.*, 88(4):609–622, 1978.
- [56] C Cercignani and M Lampis. Kinetic model for gas-surface interaction. *Transp. Theory and Stat. Phys.*, 1:101–114, 1971.
- [57] H Primakoff. The translational dispersion of sound in gases. *J. Acoust. Soc. Am.*, 13:14–18, 1942.
- [58] H S Tsien and R Schamberg. Propagation of plane sound waves in rarefied gases. *J. Acoust. Soc. Am.*, 18(2):334–341, 1946.
- [59] C S Wang Chang and G E Uhlenbeck. On the transport phenomena in rarefied gases. *Studies in Statistical Mechanics*, 5:1–16, 1970.
- [60] C S Wang Chang and G E Uhlenbeck. The dispersion of sound in helium. *Studies in Statistical Mechanics*, 5:17–26, 1970.

- [61] M Greenspan. Propagation of sound in five monatomic gases. *J. Acoust. Soc. Am.*, 28:644–648, 1956.
- [62] M Greenspan. Propagation of sound in rarefied helium. *J. Acoust. Soc. Am.*, 22:568, 1950.
- [63] C S Wang Chang and G E Uhlenbeck. On the propagation of sound in monatomic gases. *Studies in Statistical Mechanics*, 5:43–75, 1970.
- [64] C L Pekeris, Z Alterman, L Finkelstein, and K Frankowski. Propagation of sound in a gas of rigid spheres. *Phys. Fluids*, 5(12):1608–1616, 1962.
- [65] D Kahn and D Mintzer. Kinetic theory of sound propagation in rarefied gases. *Phys. Fluids*, 8(6):1090–1102, 1965.
- [66] D Kahn. Sound propagation in rarefied gases. *Phys. Fluids*, 9(9):1867–1869, 1966.
- [67] K Toba. Kinetic theory of sound propagation in a rarefied gas. *Phys. Fluids*, 11(11):2495–2497, 1968.
- [68] F B Hanson and T F Morse. Free-molecular expansion polynomials and sound propagation in rarefied gases. *Phys. Fluids*, 12(8):1564–1572, 1969.
- [69] L Sirovich and J K Thurber. Propagation of forced sound waves in rarefied gasdynamics. *J. Acoust. Soc. Am.*, 37(2):329–339, 1965.
- [70] E P Gross and E A Jackson. Kinetic models and the linearized Boltzmann equation. *Phys. Fluids*, 2(4):432–441, 1959.
- [71] E Meyer and G Sessler. Schallausbreitung in Gasen bei hohen Frequenzen und sehr niedrigen Drucken. *Z. Phys.*, 149:15–39, 1957. [in German].
- [72] J K Buckner and J H Ferziger. Linearized boundary value problem for a gas and sound propagation. *Phys. Fluids*, 9(12):2315–2322, 1966.
- [73] S K Loyalka and T C Cheng. Sound-wave propagation in a rarefied-gas. *Phys. Fluids*, 22(5):830–836, 1979.
- [74] J R Thomas and C E Siewert. Sound-wave propagation in a rarefied-gas. *Trans. Theory Stat. Phys.*, 8(4):219–240, 1979.
- [75] G Maidanik, H L Fox, and M Heckl. Propagation and reflection of sound in rarefied gases. I. Theoretical. *Phys. Fluids*, 8(2):259–265, 1965.
- [76] T C Cheng and S K Loyalka. Sound wave propagation in a rarefied gas. II. Gross-Jackson model. *Progress in Nuclear Energy*, 8:263–267, 1981.

- [77] W Marques Jr. Dispersion and absorption of sound in monatomic gases: An extended kinetic description. *J. Acoust. Soc. Am.*, 106(6):3282–3288, 1999.
- [78] R Schotter. Rarefied gas acoustics in the noble gases. *Phys. Fluids*, 17(6):1163–1168, 1974.
- [79] F Sharipov, W Marques Jr, and G M Kremer. Free molecular sound propagation. *J. Acoust. Soc. Am.*, 112(2):395–401, 2002.
- [80] R D M Garcia and C E Siewert. The linearized Boltzmann equation: Sound-wave propagation in a rarefied gas. *Z. angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 57:94–122, 2006.
- [81] N G Hadjiconstantinou and A L Garcia. Molecular simulation of sound wave propagation in simple gases. *Phys. Fluids*, 13(4):1040–1046, 2001.
- [82] N G Hadjiconstantinou. Sound wave propagation in a transition regime micro and nano-channels. *Phys. Fluids*, 14(2):802–809, 2002.
- [83] N G Hadjiconstantinou and O Simek. Sound propagation at small scales under continuum and non-continuum transport. *J. Fluid Mech.*, 488:399–408, 2003.
- [84] H Lamb. *Hydrodynamics*. Dover Publications Inc., 6 edition, 1993.
- [85] J H Park, P Bahukudumbi, and A Beskok. Rarefaction effects on shear driven oscillatory gas flows: A direct simulation Monte Carlo study in the entire Knudsen regime. *Phys. Fluids*, 16(2):317–330, 2004.
- [86] N G Hadjiconstantinou. Oscillatory shear-driven gas flows in the transition and free-molecular flow regimes. *Phys. Fluids*, 17:100611–9, 2005.
- [87] P Bahukudumbi, JH Park, and A Beskok. A unified engineering model for steady and quasi-steady shear-driven gas microflows. *Microscale Thermophysical Eng.*, 7(4):291–315, 2003.
- [88] T Veijola. Compact damping models for lateral structures including gas rarefaction effects. In *Modeling and Simulation of Microsystems*, pages 162–165. Third Internacional Conference, San Diego, 2000, 2000.
- [89] T Veijola and M Turowski. Compact damping models for laterally moving microstructures with gas rarefaction effects. *J. Microelectromechanical Systems*, 10(2):263–273, 2001.
- [90] D R Emerson, X-J Gu, S K Stefanov, S Yuhong, and Barber R W. Nonplanar oscillatory shear flow: From the continuum to the free-molecular regime. *Phys. Fluids*, 19:107105–16, 2007.
- [91] G H Tang, X J Gu, R W Barber, and D R Emerson. Lattice Boltzmann simulation of nonequilibrium effects in oscillatory gas flow. *Physical Review E*, 78(4):026706, 2008.



- [92] T T Bramlette and A B Huang. Kinetic theory of wave propagation. ii. binary gas mixtures. *Phys. Fluids*, 14:34, 1971.
- [93] J D Foch, G E Uhlenbeck, and M F Losa. Theory of sound propagation in mixtures of monatomic gases. *Phys. Fluid*, 15:1224, 1972.
- [94] AS Fernandes and W Marques. Sound propagation in binary gas mixtures from a kinetic model of the Boltzmann equation. *Physica A*, 332:29–46, 2004.
- [95] 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(1):229–303, 1984.
- [96] D Valougeorgis and S Naris. Acceleration schemes of the discrete velocity method: Gaseous flows in rectangular microchannels. *SIAM J. Scient. Comp.*, 25(2):534–552, 2003.
- [97] C Cercignani and C D Pagani. Variational approach to boundary value problems in kinetic theory. *Phys. Fluids*, 9(6):1167–1173, 1966.
- [98] S K Loyalka, N Petrellis, and T S Storvik. Some exact numerical results for the BGK model: Couette, Poiseuille and thermal creep flow between parallel plates. *Z. Angew. Math. Phys (ZAMP)*, 30:514–521, 1979.
- [99] F Sharipov and D Kalempa. Gas flow near a plate oscillating longitudinally with an arbitrary frequency. *Phys. Fluids*, 19(1):017110, 2007.
- [100] F Sharipov and D Kalempa. Oscillatory Couette flow at arbitrary oscillation frequency over the whole range of the knudsen number. *Microfluidics and Nanofluidics*, 4(5):363–374, 2008.
- [101] F Sharipov and D Kalempa. Numerical modelling of the sound propagation through a rarefied gas in a semi-infinite space on the basis of linearized kinetic equation. *J. Acoust. Soc. Am.*, 124(4):1993–2001, 2008.
- [102] F Sharipov and D Kalempa. Gas flow around a longitudinally oscillating plate at arbitrary ratio of collision frequency to oscillation frequency. In M S Ivanov and A K Rebrov, editors, *Rarefied Gas Dynamics*, pages 1140–1145. 25th Int. Symp., Russia 2006, Siberian Branch of the Russian Academy of Science, 2007.
- [103] M Abramowitz and I A Stegun, editors. *Handbook of Mathematical Functions with formulas, graphs and mathematical tables*. Dover Publications Inc., New York, 9 edition, 1972.
- [104] S Naris, D Valougeorgis, F Sharipov, and D Kalempa. Discrete velocity modelling of gaseous mixture flows in MEMS. *Superlattices and Microstructures*, 35:629–643, 2004.

- [105] S Naris, D Valougeorgis, D Kalempa, and F Sharipov. Flow of gaseous mixtures through rectangular microchannels driven by pressure, temperature and concentration gradients. *Phys. Fluids*, 17(10):100607.1–100607.12, 2005.
- [106] S Naris, D Valougeorgis, D Kalempa, and F Sharipov. Gaseous mixture flow between two parallel plates in the whole range of the gas rarefaction. *Physica A*, 336(3-4):294–318, 2004.
- [107] C L Pekeris. Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 41:661–669, 1955.
- [108] 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.

# Apêndice A

## Aproximações de funções especiais

As funções especiais  $I_n(z)$ , definidas como

$$I_n(z) = \int_0^\infty c^n \exp\left(-c^2 - \frac{z}{c}\right) dc, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.1})$$

satisfazem as seguintes relações:

$$\frac{dI_n(z)}{dz} = -I_{n-1}(z), \quad (\text{A.2})$$

$$2I_n(z) = (n-1)I_{n-2}(z) + zI_{n-3}(z), \quad (\text{A.3})$$

onde  $z$  pode ser um número real ou complexo (como é o caso no presente trabalho).

De acordo com a Ref. [103], a função  $I_1(z)$  pode ser representada através da seguinte série de potências

$$2I_1(z) = \sum_{k=0}^{\infty} (a_k \ln z + b_k) z^k, \quad (\text{A.4})$$

onde

$$a_k = -\frac{2a_{k-2}}{k(k-1)(k-2)}, \quad (\text{A.5})$$

$$b_k = -\frac{2b_{k-2} + (3k^2 - 6k + 2)a_k}{k(k-1)(k-2)}, \quad k > 2, \quad (\text{A.6})$$

$$a_0 = a_1 = 0, \quad a_2 = -b_0,$$

$$b_0 = 1, \quad b_1 = -\sqrt{\pi}, \quad b_2 = 0.6341765026 \quad (\text{A.7})$$

Portanto, todas as demais funções  $I_n(z)$  podem ser calculadas usando as relações (A.2) e (A.3) e a série de potências (A.4).

O comportamento assintótico dessas funções quando  $|z| \rightarrow \infty$  é dado por:

$$I_n(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{3}} 3^{-n/2} v^{n/2} \exp(-v) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k}{v^k}, \quad v = 3 \left(\frac{z}{2}\right)^{2/3}, \quad (\text{A.8})$$

onde

$$a_0 = 1, \quad a_1 = \frac{1}{12}(3n^2 + 3n - 1),$$

$$12(k+2)a_{k+2} = -(12k^2 + 36k - 3n^2 - 3n + 25)a_{k+1} \\ + \frac{1}{2}(n-2k)(2k+3-n)(2k+3+2n)a_k. \quad (\text{A.9})$$

# Apêndice B

## Método de aceleração de convergência

O método de velocidades discretas é muito utilizado em Dinâmica de Gases Rarefeitos mas, em muitas situações, a convergência do mesmo é muito lenta tal que um número muito grande de iterações é necessário para atingir resultados com a precisão desejada. Valougeorgis e Naris [96] desenvolveram um método de aceleração de convergência para o método de velocidades discretas e este método vem sendo utilizado com êxito na solução de muitos problemas relacionados a escoamentos de gases rarefeitos e misturas, e.g. [104–106]. Para exemplificar como funciona o método proposto em [96], a equação unidimensional correspondendo à equação cinética de BGK (Bhatnagar, Gross e Krook) para o problema clássico de Poiseuille é tomada como exemplo. Essa equação é escrita da seguinte forma:

$$c_x \frac{\partial h}{\partial x} + \delta h = \delta u \quad (\text{B.1})$$

onde

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int h(x, c_x) \exp(-c_x^2) dc_x \quad (\text{B.2})$$

é a velocidade do gás e  $\delta$  é o parâmetro de rarefação do gás. Para grandes valores de  $\delta$  a convergência do algoritmo baseado no método de velocidades discretas para resolver (B.1) é muito lenta e, portanto, se torna conveniente utilizar um método de aceleração de convergência visando diminuir o número de iterações necessário para resolver a equação com a mesma precisão. O método proposto por Valougeorgis e Naris [96] consiste em obter um conjunto de equações sintéticas, ou equações aceleradas, que é resolvido de forma acoplada com a equação cinética (B.1). Esse conjunto de equações sintéticas é obtido com o uso dos momentos de Hermite, definidos como:

$$F_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int H_n(c_x) h(x, c_x) \exp(-c_x^2) dc_x, \quad (\text{B.3})$$

onde  $H_n(c_x)$  são os polinômios de Hermite de ordem  $n$  ( $H_0 = 1$ ,  $H_1 = 2c_x$ ,  $H_2 = 4c_x^2 - 2$ , etc). Utilizando os dois primeiros momentos de Hermite, i.e.  $F_0$  e  $F_1$ , duas equações aceleradas são obtidas. A primeira delas é obtida multiplicando a equação (B.1) por  $H_0 \exp(-c_x^2)/\sqrt{\pi}$  e, posteriormente, integrando na variável  $c_x$  tal que a seguinte equação é obtida:

$$\frac{dF_1}{dx} = 0. \quad (\text{B.4})$$

A segunda equação sintética é obtida multiplicando a equação (B.1) por  $H_1 \exp(-c_x^2)/\sqrt{\pi}$  e, posteriormente, integrando na variável  $c_x$  de modo a obter a seguinte equação:

$$\frac{dF_0}{dx} + \delta F_1 = -\frac{1}{2} \frac{dF_2}{dx}. \quad (\text{B.5})$$

Portanto, o sistema de equações (B.4)-(B.5) deve ser resolvido de forma acoplada com a equação cinética (B.1). Essas equações são aproximadas usando um esquema de diferenças finitas centrais e são resolvidas através de um método iterativo no qual as equações sintéticas são resolvidas somente nos nós centrais da coordenada  $x$ .

# Apêndice C

## Modelo de McCormack

O modelo proposto por McCormack para a integral de colisões consiste em expandí-la num polinômio da velocidade molecular adimensional  $\mathbf{c}_\alpha$  do seguinte modo:

$$\hat{L}_{\alpha\beta}h_\alpha = -\gamma_{\alpha\beta}h_\alpha + \mathcal{A} + \mathcal{A}_k c_{\alpha k} + \mathcal{B}_{kl} c_{\alpha k} c_{\alpha l} + \mathcal{D}_k c_\alpha^2, \quad (\text{C.1})$$

onde os coeficientes  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{A}_k$ ,  $\mathcal{B}_{kl}$  e  $\mathcal{D}_k$  são funções dos momentos da função de distribuição das velocidades moleculares (densidade, velocidade hidrodinâmica, temperatura, tensor pressão e vetor fluxo de calor). Estes coeficientes são encontrados através da seguinte igualdade:

$$\int Q_\alpha(\mathbf{c})_\alpha \hat{L}_{\alpha\beta}^{\text{exato}}(\mathbf{c}_\alpha) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha = \int Q_\alpha(\mathbf{c})_\alpha \hat{L}_{\alpha\beta}^{\text{modelo}}(\mathbf{c}_\alpha) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (\text{C.2})$$

onde  $\hat{L}_{\alpha\beta}^{\text{modelo}}$  é dado na Eq. (C.1),  $\hat{L}_{\alpha\beta}^{\text{exato}}$  é a integral das colisões na forma exata cuja expressão pode ser encontrada na Ref. [6] e

$$Q_\alpha = 1, \quad c_{\alpha i}, \quad \frac{1}{2}c_\alpha^2, \quad c_{\alpha i}c_{\alpha j} - \frac{1}{3}c_\alpha^2\delta_{ij}, \quad \frac{1}{2}c_{\alpha i} \left( c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right). \quad (\text{C.3})$$

A forma final da integral de colisões de McCormack, escrita nas notações utilizadas no presente trabalho, é a seguinte:

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\alpha\beta}h_\alpha = & -\gamma_{\alpha\beta}h_\alpha + \gamma_{\alpha\beta}\varrho_\alpha + 2 \left( \frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[ \gamma_{\alpha\beta}u_{\alpha i} - (u_{\alpha i} - u_{\beta i})\nu_{\alpha\beta}^{(i)} \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \left( q_{\alpha i} - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_{\beta i} \right) \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \right] c_{\alpha i} + \left[ \gamma_{\alpha\beta}\tau_\alpha - 2 \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\beta} (\tau_\alpha - \tau_\beta) \nu_{\alpha\beta}^{(1)} \right] \\ & \times \left( c_\alpha^2 - \frac{3}{2} \right) + 2 \left[ (\gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha ij} + \Pi_{\beta ij} \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \right] c_{\alpha i} c_{\alpha j} + \frac{4}{5} \left( \frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \\ & \left[ (\gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}) q_{\alpha i} + \left( \frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_{\beta i} \nu_{\alpha\beta}^{(6)} - \frac{5}{4} (u_{\alpha i} - u_{\beta i}) \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \right] c_{\alpha i} \left( c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Os momentos da função de distribuição que aparecem em (C.4) são os seguintes:

(i) Desvio de densidade parcial

$$\varrho_\alpha = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int h_\alpha \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha; \quad (\text{C.5})$$

(ii) Componente da velocidade hidrodinâmica da espécie  $\alpha$  na direção  $j$

$$u_{\alpha j} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \left( \frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} \int c_{\alpha j} h_\alpha \exp(-c_\alpha^2) \mathbf{d}\mathbf{c}_\alpha; \quad (\text{C.6})$$

(iii) Desvio de temperatura parcial

$$\tau_\alpha = \frac{2}{3\pi^{3/2}} \int \left( c_\alpha^2 - \frac{3}{2} \right) h_\alpha \exp(-c_\alpha^2) \mathbf{d}\mathbf{c}_\alpha; \quad (\text{C.7})$$

(iv) Componente do vetor fluxo de calor parcial na direção  $j$

$$q_{\alpha j} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_{\alpha j} \left( c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) h_\alpha \exp(-c_\alpha^2) \mathbf{d}\mathbf{c}_\alpha; \quad (\text{C.8})$$

(v) Componente  $ij$  do deviante do tensor pressão parcial

$$\Pi_{\alpha ij} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int \left( c_{\alpha i} c_{\alpha j} - \frac{1}{3} c_\alpha^2 \delta_{ij} \right) h_\alpha \exp(-c_\alpha^2) \mathbf{d}\mathbf{c}_\alpha. \quad (\text{C.9})$$

A dependência do modelo de McCormack no potencial de interação intermolecular aparece nas seguintes quantidades:

$$\nu_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} n_\beta \Omega_{\alpha\beta}^{(11)}, \quad (\text{C.10})$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \right)^2 n_\beta \left( \Omega_{\alpha\beta}^{(12)} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{(22)} \right), \quad (\text{C.11})$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \frac{m_{\alpha\beta}^2}{m_\alpha m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{(22)} \right), \quad (\text{C.12})$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \frac{m_{\alpha\beta}^2}{m_\alpha m_\beta} n_\beta \left( \frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} - \Omega_{\alpha\beta}^{(22)} \right), \quad (\text{C.13})$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left[ \Omega_{\alpha\beta}^{(22)} + \left( \frac{15}{4} \frac{m_\alpha}{m_\beta} + \frac{25}{8} \frac{m_\beta}{m_\alpha} \right) \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} - \frac{1}{2} \frac{m_\beta}{m_\alpha} (4\Omega_{\alpha\beta}^{(12)} - \Omega_{\alpha\beta}^{(13)}) \right], \quad (\text{C.14})$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left( \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \left( \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{3/2} n_\beta \left[ -\Omega_{\alpha\beta}^{(22)} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{(12)} + \frac{1}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{(13)} \right], \quad (\text{C.15})$$

onde

$$m_{\alpha\beta} = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \quad (\text{C.16})$$

denota a massa reduzida. As quantidades  $\Omega_{\alpha\beta}^{jk}$  são as integrais de Chapman-Cowling [7] que dependem do potencial de interação intermolecular e são definidas da seguinte forma:

$$\Omega_{\alpha\beta}^{jk} = \left( \frac{k_B T}{2\pi m_{\alpha\beta}} \right)^{1/2} \int_0^\infty \int_\Omega \exp(-g^2) g^{2k+3} (1 - \cos^j \theta) \sigma_{\alpha\beta} \mathbf{d}\Omega \mathbf{d}g, \quad (\text{C.17})$$



onde

$$g = \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m}\right)^{1/2} |\mathbf{c}_\alpha - \mathbf{c}_\beta|, \quad (\text{C.18})$$

$\sigma_{\alpha\beta}$  denota a seção diferencial de espalhamento para colisões entre moléculas das espécies  $\alpha$  e  $\beta$  com velocidade relativa no interior de um ângulo sólido  $d\Omega$ .

Para o modelo de esferas-rígidas as integrais de Chapman-Cowling são escritas como:

$$\Omega_{\alpha\beta}^{jk} = \frac{(j+k)!}{2} \left[1 - \frac{1+(-1)^j}{2(j+1)}\right] \left(\frac{\pi k_B T}{2m_{\alpha\beta}}\right)^{1/2} \sigma_{\alpha\beta}^2, \quad (\text{C.19})$$

onde  $\sigma_{\alpha\beta}$  é a seção diferencial de choque que para esferas-rígidas é dada por:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{D_\alpha + D_\beta}{2}, \quad (\text{C.20})$$

onde  $D_\alpha$  denota o diâmetro da espécie  $\alpha$ .

Os diâmetros são calculados através do uso da expressão

$$\mu_\alpha = 1.016034 \frac{5}{16} \frac{\sqrt{m_\alpha k_B T}}{\sqrt{\pi} D_\alpha^2}, \quad (\text{C.21})$$

obtida diretamente da equação de Boltzmann [107, 108]. Os dados experimentais para a viscosidade  $\mu_\alpha$  à temperatura de 300K encontrados na Ref. [95] são utilizados. Na Ref. [95] as integrais de Chapman-Cowling são expressas em função de parâmetros obtidos experimentalmente para um potencial realístico de interação intermolecular e  $\sigma_{\alpha\beta}$  é tabelado para todas as possíveis misturas de gases nobres.

O parâmetro  $\gamma_{\alpha\beta}$  é proporcional à frequência de colisões entre as espécies  $\alpha$  e  $\beta$  e as seguintes combinações são utilizadas:

$$\gamma_1 = \gamma_{11} + \gamma_{12}, \quad \gamma_2 = \gamma_{21} + \gamma_{22}. \quad (\text{C.22})$$

# Apêndice D

## Potencias de interação intermolecular

Os modelos de interação intermolecular de esferas rígidas, centros de repulsão e Lennard-Jones são os mais utilizados em teoria cinética dos gases. Como é conhecido, as forças de interação são divididas em duas categorias: (i) forças de curto alcance ou forças de valência e (ii) forças de longo alcance ou forças de van der Waals (em homenagem ao físico holandês Johannes D. van der Waals). As forças de curto alcance são repulsivas e surgem quando as nuvens eletrônicas dos átomos ou moléculas se superpõem enquanto que as forças de van der Waals surgem como consequência da polarização entre as moléculas. Os modelos de esferas rígidas e centros de repulsão levam em consideração somente forças repulsivas enquanto que o modelo proposto por Lennard-Jones considera tanto forças repulsivas como atrativas e, por esse motivo, este último modelo é considerado mais realístico comparado aos demais.

A Figura D.1, extraída da Ref. [2], apresenta o perfil da função potencial em função da distância entre as partículas (átomos ou moléculas) gasosas para os três modelos de interação mencionados acima.

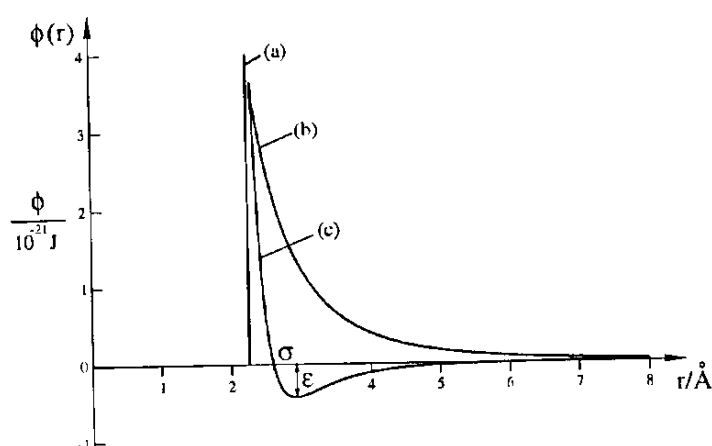


Figura D.1: Figura extraída da Ref. [2] para os modelos de interação intermolecular: (a) esferas-rígidas; (b) centros de repulsão; (c) Lennard-Jones

À seguir, uma breve descrição de cada um desses modelos é apresentada.

### Modelo de esferas-rígidas

Esse é o modelo mais simples no qual os átomos ou moléculas de gás são comparados a bolas de bilhar impenetráveis (esferas rígidas) com diâmetro  $\sigma$ . O modelo representa somente as forças de repulsão entre as esferas e a função potencial tem a seguinte forma:

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty, & \text{se } r < \sigma, \\ 0, & \text{se } r > \sigma, \end{cases} \quad (\text{D.1})$$

onde o diâmetro  $\sigma$  das esferas é o único parâmetro do modelo. Apesar da simplicidade do modelo, esse modelo é totalmente não-realístico.

### Modelo de centros de repulsão

Similarmente ao modelo de esferas rígidas, o modelo de centros de repulsão também representa somente as forças de repulsão entre as moléculas mas a função potencial não é tão abrupta quanto no modelo de esferas rígidas e possui a seguinte forma:

$$\phi(r) = \left(\frac{\sigma}{r}\right)^\nu, \quad (\text{D.2})$$

onde  $\nu$  é chamado de índice de repulsão. Denomina-se potencial Maxwelliano o caso especial em que  $\nu = 4$  e as partículas gasosas que obedecem a esse potencial são chamadas de partículas Maxwellianas. Note que, quando  $\nu \rightarrow \infty$ , o modelo torna-se o de esferas-rígidas.

### Modelo de Lennard-Jones

Esse modelo de interação intermolecular foi proposto pelo matemático Lennard-Jones é muito utilizado pois considera ambas as forças repulsivas e atrativas e, portanto, representa a interação dos átomos e moléculas de forma mais realística. Para este modelo a função potencial é dada por:

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right], \quad (\text{D.3})$$

onde o primeiro termo representa as forças de repulsão e o segundo termo representa as forças de atração. Nesse modelo,  $\sigma$  é a distância na qual o potencial muda de repulsivo para atrativo ( $\phi(\sigma) = 0$ ) e  $\epsilon$  é a profundidade do poço de potencial. Note que a função potencial é igual a  $-\epsilon$  quando  $r = 2^{1/6}\sigma$ .