

VALDETE DOS SANTOS COQUEIRO

**TRANSPORTE DE MOMENTO NO FLUXO DE
COUETTE PLANO DE MISTURAS BINÁRIAS**

CURITIBA-PR
2005

VALDETE DOS SANTOS COQUEIRO

**TRANSPORTE DE MOMENTO NO FLUXO DE
COUETTE PLANO DE MISTURAS BINÁRIAS**

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Ciências, Curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, Área de Concentração em Programação Matemática, Setor de Ciências Exatas e Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

Orientadora: Profa. Dra. Liliana Madalena Gramani Cumin

CURITIBA-PR
2005

TERMO DE APROVAÇÃO

VALDETE DOS SANTOS COQUEIRO

TRANSPORTE DE MOMENTO NO FLUXO DE COUETTE PLANO DE MISTURAS BINÁRIAS

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciências, no Curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia - Programação Matemática da Universidade Federal do Paraná, pela comissão formada pelos professores:

Aprovada por:

Profa. Dra. Liliana Madalena Gramani Cumin
(Presidente)

Prof. Dr. Alexandre Kirilov

Profa. Dra. Neida Maria Patias Volpi

Prof. Dr. Stefano De Leo

*Aos meus pais José e Luzia
e à minha irmã Wilma, pelo
amor e proteção durante o
decorrer da minha vida.*

*Às minhas sobrinhas Fer-
nanda, Vanessa Cristina,
Ana Carolina e Mayara pelo
amor e alegria transmitidos
no decorrer dos dias.*

*Ao meu noivo Ricardo (in
memorian) pelo amor e feli-
cidade partilhada tantos mo-
mentos.*

*“A mente que se abre a uma nova idéia jamais voltará
ao seu tamanho original.”*

Albert Einstein

Agradecimentos

A minha orientadora, Liliana Madalena Gramani Cumin, pela compreensão e dedicação com que orientou este trabalho, tornando possível a realização do mesmo.

Aos professores do DMA-UFPR, que contribuíram com seus conhecimentos, os quais foram essenciais para minha formação profissional.

A todos os colegas de curso pelos grupos de estudo que proporcionaram conhecimentos necessários a conclusão do mestrado, em especial ao Itamar pelos estudos realizados que contribuíram para o desenvolvimento desta dissertação e ao Amauri e ao Douglas pelo apoio constante.

Ao colegas do Departamento de Matemática da FECILCAM pela ajuda e compreensão durante a realização deste trabalho.

Aos meus amigos José Roberto e Rosangela pelo companheirismo e troca de conhecimentos no decorrer da minha vida profissional.

Resumo

Nesta dissertação será estudado o problema do escoamento de Couette. O problema consiste de uma mistura binária de gases nobres confinada entre duas placas paralelas suficientemente longas de forma que os efeitos de borda podem ser desprezados. Inicialmente o sistema encontra-se em equilíbrio, sendo fracamente perturbado através do movimento relativo das placas que caracteriza o escoamento de Couette. A função de distribuição para cada constituinte da mistura obedece a um sistema de equações íntegro-diferenciais acopladas que se baseiam na equação de Boltzmann. Todas as soluções encontradas são estáveis pois trata-se de problemas lineares. As soluções são estudadas com base no modelo cinético de McCormack para a equação de Boltzmann. Os cálculos numéricos são realizados para três misturas de gases nobres: Néon e Argônio, Hélio e Argônio, e Hélio e Xenônio. Foram calculados o tensor tensão, a velocidade hidrodinâmica e o fluxo de calor de cada constituinte, assim como o tensor tensão e a velocidade hidrodinâmica da mistura em todo o intervalo do número de Knudsen. As concentrações molares dos gases são consideradas nas proporções de 10%, 50% e 90%. Foram comparados os resultados obtidos quando se utilizam diferentes potenciais de interação entre as partículas, como por exemplo, o potencial de esfera-rígida e o potencial realístico. Também foi comparado a solução cinética e a solução hidrodinâmica para o tensor tensão da mistura.

Palavras-chave: fluxo de Couette, misturas de gases, potencial intermolecular, número de Knudsen.

Abstract

In this dissertation will studied the Couette flow problem. The problem consists of a binary mixture of noble gases confined between two parallel plates long enough so that the border effects could be neglected. In the beginning the system is in equilibrium, being slightly disturbed by of the plates relative movement, which characterizes the Couette flow. The distribution function for each constituent of the mixture obeys a coupled integral-differential equation system that is based on Boltzmann equation. All solutions found are stable since we are dealing with linear problems. The solutions are studied by considering McCormack kinetic model as the basis for Boltzmann equation. Numerical calculations were carried out for three mixtures of noble gases: Neon and Argon, Helium and Argon, and Helium and Xenon. The stress tensor, hydrodynamic velocity, and heat flow of each constituent were calculated, as well as the stress tensor and hydrodynamic velocity of the mixture over the whole Knudsen number interval. The molar concentrations of the gases were considered in the proportions of 10%, 50% and 90%. The results obtained were compared when different interaction potentials between the particles are used, as for example, the hard sphere potential and the realistic potential. It also compared the kinetic and the hydrodynamic solutions for the stress tensor of the mixture.

Key-words: Couette flow, mixtures of gases, intermolecular potential, Knudsen number.

Conteúdo

Resumo	viii
Abstract	ix
Lista de Figuras	xii
Lista de Tabelas	xiv
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	3
1.1.1 Objetivo Geral	3
1.1.2 Objetivos Específicos	3
1.2 Justificativa	3
1.3 Metodologia	4
1.4 Limitações do Trabalho	4
1.5 Estrutura do trabalho	4
2 Fundamentos da Mecânica do Contínuo	6
2.1 Equação Geral de Balanço	6
2.2 Balanço de Massa	10
2.3 Balanço do Momento Linear	11
2.4 Balanço de Energia	15
2.5 Equações Constitutivas	17
3 Fundamentos da Teoria Cinética dos Gases	20
3.1 Equação de Boltzmann para Gás Único	20
3.2 Equações de Balanço para Gás Único	25
3.3 Equações Constitutivas em Teoria Cinética para Gás Único	29
3.4 A Equação de Boltzmann para Misturas de Gases Monoatômicos	29
3.5 Equações de Balanço para Misturas de Gases Monoatômicos	33
3.6 Os Potenciais de Interação Molecular	34

4	Solução Cinética para Misturas Binárias de Gases Monoatômicos	36
4.1	Considerações Específicas do Problema	36
4.2	Modelo Cinético de McCormack	38
4.3	Método de Solução	40
4.4	Resultados e Discussões	45
5	Sol. Hidrodinâmica p/ Misturas Binárias de Gases Monoatômicos	56
5.1	Considerações Gerais e Solução	56
5.2	Resultados	59
6	Conclusões e Recomendações	61
	Bibliografia	64
A	Equação de Transporte	68
B	Programa	70

Lista de Figuras

2.1	Coordenadas materiais	7
2.2	Volume material	8
2.3	Corpo sujeito a forças externas	12
2.4	Equilíbrio de uma caixa de pílulas através da superfície S	13
2.5	Tensões em três faces de um cubóide	13
2.6	Corpo livre sujeito a tensões	14
3.1	Espaço de fase μ	21
3.2	Colisões direta (a) e de restituição (b)	23
3.3	Geometria de uma colisão binária	23
3.4	Fluxo de Couette entre duas placas paralelas	32
3.5	Potenciais de interação : (a) esfera-rígida; (b) centros de repulsão; (c) Lennard-Jones	34
4.1	Distância y vs a velocidade V da mistura e concentração $C_0 = 0,5$ para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, potencial realístico, $\delta = 10$.	53
4.2	Ampliação da velocidade para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, potencial realístico	54
4.3	Distância y vs a velocidade V da mistura e concentração $C_0 = 0,5$ para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, potencial esfera-rígida, $\delta = 10$	54
4.4	Ampliação da velocidade para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, esfera-rígida	55

Lista de Tabelas

4.1	Análise de δ_1 e δ_2 para misturas binárias e concentração $C_0 = 0,1$. . .	49
4.2	Análise de δ_1 e δ_2 para misturas binárias e concentração $C_0 = 0,5$. . .	49
4.3	Análise de δ_1 e δ_2 para misturas binárias e concentração $C_0 = 0,9$. . .	50
4.4	Tensor tensão Π da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , potencial realístico	50
4.5	Tensor tensão Π da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , potencial esfera-rígida	50
4.6	Tensor tensão de cada constituinte para a mistura He-Xe, potencial realístico	51
4.7	Tensor tensão de cada constituinte para a mistura He-Xe, potencial esfera-rígida	51
4.8	Velocidade de cada constituinte na distância $y = \frac{1}{2}$ para a mistura He-Xe, potencial realístico	51
4.9	Velocidade de cada constituinte na distância $y = \frac{1}{2}$ para a mistura Ne-Ar, potencial realístico	51
4.10	Velocidade de cada constituinte na distância $y = \frac{1}{2}$ para a mistura He-Ar, potencial realístico	52
4.11	Velocidade V da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , potencial realístico	52
4.12	Velocidade V da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , potencial esfera-rígida	52
4.13	Fluxo de calor de cada constituinte vs o parâmetro de rarefação δ e concentração $C_0 = 0,5$, potencial realístico	53
4.14	Fluxo de calor de cada constituinte vs o parâmetro de rarefação δ e concentração $C_0 = 0,5$, potencial esfera-rígida	53
5.1	Velocidade u da mistura na distância $y = \frac{1}{2}$ e o tensor tensão Π da mistura vs o parâmetro de rarefação δ para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe	60
6.1	Comparação da solução numérica do tensor tensão Π da mistura com a solução analítica (5.24) para $C_0 = 0,5$, potencial realístico	62

6.2	Comparação da solução numérica da velocidade V da mistura com a solução analítica (5.23) para $C_0 = 0,5$, potencial realístico	62
-----	--	----

Capítulo 1

Introdução

O estudo dos fenômenos de transporte no escoamento de gases rarefeitos tem importância devido às aplicações para o desenvolvimento tecnológico de equipamentos de vácuo, indústria aeronáutica, etc.

O escoamento de Couette¹ plano é caracterizado pelo movimento relativo das placas. Esse escoamento para um gás único [13], é um problema clássico da dinâmica de gases rarefeitos.

O transporte de momento no escoamento de Couette plano de um gás único é um problema que envolve a Mecânica do Contínuo e a Teoria Cinética dos gases. Durante os últimos anos, vários livros e artigos têm sido publicados sobre este tema [6, 10, 17, 19, 23, 25, 35, 41]. Entretanto, outros estudos envolvendo o escoamento de Couette plano também devem ser desenvolvidos, nos quais a análise do escoamento de misturas de gases tem a sua importância principalmente por se tratar de uma generalização da abordagem do gás único.

Considera-se neste trabalho o sistema constituído por duas placas paralelas infinitas contendo uma mistura binária entre elas. As placas estão sujeitas à mesma temperatura. Inicialmente, o sistema encontra-se em equilíbrio, sendo fracamente perturbado através do movimento relativo das placas que caracteriza um escoamento de Couette plano.

Em escoamento de gases rarefeitos costuma-se caracterizar o regime de escoamento pelo chamado número de Knudsen Kn o qual é um parâmetro que indica o grau de rarefação de um gás. É definido como a razão entre o livre caminho médio molecular² e um comprimento característico do problema em estudo. Assim, o regime de escoamento se divide 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 escoamento; (ii) regime hidrodinâmico ($Kn \rightarrow 0$) no qual o livre caminho médio molecular é muito pequeno comparado ao comprimento característico do escoamento e (iii) regime de transição ($Kn \simeq 1$), no qual o livre caminho médio molecular e o comprimento característico do escoamento possuem a mesma

¹Escoamento e fluxo são sinônimos dentro do contexto do nosso problema. O fluxo causado pelo movimento das placas é denominado de fluxo de Couette.

²O livre caminho médio molecular é definido como a média entre as distâncias entre as moléculas.

ordem de grandeza.

A Mecânica do Contínuo é aplicada somente ao regime hidrodinâmico. Para abranger todo o intervalo do número de Knudsen é necessário aplicar a Dinâmica dos Gases Rarefeitos. Este é um campo científico que tem se desenvolvido muito e cujos métodos se baseiam: (i) na solução da equação de Boltzmann [10, 13] (ii) ou na simulação direta de Monte Carlo [8]. Neste trabalho não será abordado o método de simulação de Monte Carlo.

A equação de Boltzmann [10, 13] é uma equação íntegro-diferencial, complexa devido a integral de colisões entre as partículas. Este termo que envolve esta integral de colisões é denominado de operador de colisões. Existem alguns trabalhos na literatura, como por exemplo [4, 38], nos quais a equação de Boltzmann é linearizada e resolvida numericamente com o operador de colisões exato, mas esses trabalhos se restringem somente ao uso do potencial de interação intermolecular de esfera-rígida, requerendo um esforço computacional muito grande. Para simplificar a equação de Boltzmann usando todo o intervalo do número de Knudsen surgiu a idéia de simplificar a integral de colisões utilizando um modelo matemático para essa integral. A escolha desse modelo matemático, também chamado de modelo cinético, deve satisfazer as seguintes condições: (i) a conservação da massa, do momento linear e da energia de cada colisão entre as partículas; (ii) a equação simplificada, isto é, a equação do modelo cinético ou também chamada de equação cinética, deve fornecer corretamente todos os coeficientes de transporte (viscosidade, condutividade térmica, etc) e (iii) no estado de equilíbrio a integral de colisões deve ser nula.

Neste trabalho, generalizando, diz-se que a consideração de uma mistura de gases constituída de n constituintes, envolverá n equações de Boltzmann, uma para cada constituinte, onde a integral de colisões presente na equação de Boltzmann descreverá a colisão de uma molécula com todas as demais moléculas dos outros constituintes.

Ao se considerar uma mistura de gases monoatômicos, a diferença entre os constituintes ocorrerá entre as suas massas atômicas, diâmetros moleculares e formas de interação entre as moléculas dos diferentes constituintes. Por exemplo, quando as moléculas são consideradas como esfera-rígida a diferença entre os diâmetros das moléculas torna-se representativa. Ainda, o tratamento matemático é baseado na Teoria Cinética dos Gases que envolverá uma função de distribuição f_α ($\alpha = 1, 2, \dots, n$) presente na equação de Boltzmann, para cada um dos n constituintes da mistura. Então se tem, de uma forma geral, que o sistema constitui-se de um sistema de n equações de Boltzmann acopladas para as n funções de distribuição.

Existem poucas publicações sobre o escoamento de uma mistura para um amplo intervalo do número de Knudsen. Com relação aos trabalhos experimentais sobre o fluxo de uma mistura ao longo de um tubo são citados os artigos [1, 2, 3, 5, 40]. Os resultados numéricos considerando o fluxo de uma mistura através de um canal são encontrados nos trabalhos [21, 30, 33, 48] e o fluxo de Couette para este mesmo estudo encontra-se em [34, 49].

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo Geral

Neste trabalho, o sistema é constituído por duas placas paralelas suficientemente longas, de forma que os efeitos de borda possam ser desprezados, contendo uma mistura binária entre elas. Inicialmente, as placas encontram-se em repouso caracterizando o equilíbrio do sistema. Este equilíbrio é fracamente perturbado pelo movimento relativo entre as placas. O objetivo deste trabalho é estudar o escoamento de Couette, o qual é caracterizado pelo movimento relativo das placas, considera-se uma mistura binária de gases nobres.

1.1.2 Objetivos Específicos

O objetivo específico deste trabalho é estudar o problema do fluxo de Couette plano para uma mistura binária de gases monoatômicos com base no modelo cinético de McCormack [36]. Considera-se três misturas binárias de gases nobres: Neônio e Argônio; Hélio e Argônio; e Hélio e Xenônio [24].

Estas misturas apresentam razões de massas $\frac{m_1}{m_2}$ bem distintas 0,505, 0,100, 0,030, além das razões entre os seus diâmetros $\frac{d_2}{d_1}$ serem de 1,406, 1,665 e 2,226, respectivamente. As concentrações consideradas para estas misturas serão nas proporções de 10%, 50% e 90%, para o primeiro constituinte.

O tensor tensão, a velocidade hidrodinâmica e o fluxo de calor de cada constituinte, assim como o tensor tensão e a velocidade hidrodinâmica da mistura serão calculados para um amplo intervalo do número de Knudsen $0 < Kn < \infty$, que correspondem na análise dos regimes hidrodinâmico, transição e de moléculas livres.

Estes cálculos serão feitos para dois tipos de potenciais intermoleculares: esferarígida e o potencial realístico, ambos considerando uma temperatura inicial igual à 300K.

1.2 Justificativa

O escoamento de Couette plano é um problema clássico da dinâmica de gases rarefeitos, o qual tem sido pesquisado por vários autores quando se refere ao caso de gás único.

Assim, o interesse sobre este tipo de fluxo em misturas de gases tem frequentemente aumentado, pois o estudo dos fenômenos de transporte no escoamento de gases rarefeitos é utilizado para o desenvolvimento tecnológico de equipamentos de vácuo, indústria aeronáutica, microengenharia, etc. Porém, existem poucos trabalhos na literatura sobre este fluxo para misturas de gases dentro de um amplo intervalo do número de Knudsen. Então, o fluxo de Couette será estudado para o

caso de uma mistura binária confinada entre duas placas paralelas suficientemente longas de forma que os efeitos de borda podem ser desprezados.

1.3 Metodologia

A função de distribuição para cada constituinte satisfaz a um sistema de equações íntegro-diferenciais acopladas e que se baseiam na equação de Boltzmann. Com a finalidade de facilitar os cálculos numéricos, utiliza-se uma expressão para a integral de colisões da equação de Boltzmann, que é uma função das frequências de colisão entre os constituintes e de uma função de distribuição de referência. Assim, transforma-se a equação de Boltzmann em uma equação modelo. A função de distribuição de referência baseia-se no modelo de McCormack [36] e é uma função da densidade, da temperatura, da velocidade, do tensor tensão e do fluxo de calor de cada constituinte da mistura. Esta equação modelo é linearizada em torno da função Maxwelliana em equilíbrio que depende da densidade do constituinte, da temperatura e da velocidade da mistura. A equação resultante dependerá dos momentos da função de distribuição e da velocidade das partículas dos constituintes. Para a solução do sistema acoplado, utiliza-se o método das velocidades discretas [25, 39].

1.4 Limitações do Trabalho

Ao se realizar os cálculos da velocidade da mistura utilizou-se uma teoria da perturbação. Esta teoria é válida desde que a velocidade das placas seja muito pequena, podendo-se aplicar uma teoria linear.

O desenvolvimento do trabalho é para gases ideais monoatômicos e quanto maior for o parâmetro de rarefação (δ), mais lentamente ocorrerá a convergência no programa numérico, resultando em um tempo computacional maior. Mesmo utilizando-se supercomputadores, para parâmetros de rarefação grandes ($\delta \geq 10$) o tempo computacional cresce de forma não linear.

A realização do trabalho tem como objetivo obter campos físicos utilizando-se a Teoria Cinética e a Teoria do Contínuo. A vantagem da utilização da Teoria Cinética é que esta abrange todo o intervalo do número de Knudsen enquanto que a Teoria do Contínuo é limitada, pois é aplicada para $Kn \rightarrow 0$.

1.5 Estrutura do trabalho

O trabalho está dividido em seis capítulos, levando-se em conta também a introdução.

No capítulo 2, explora-se os fundamentos da Mecânica do Contínuo.

No capítulo 3, trata-se dos fundamentos da Teoria Cinética dos Gases.

O capítulo 4 apresenta a exposição do problema a se resolver e a sua solução cinética.

O capítulo 5 trata do mesmo problema proposto, porém o sistema será resolvido com base nas equações da Mecânica do Contínuo obtendo a solução hidrodinâmica correspondente.

O último capítulo é dedicado às conclusões e são realizadas sugestões para o prosseguimento do trabalho em oportunidades futuras.

Será adotado a convenção da soma de Einstein para as componentes dos vetores e tensores onde índices repetidos representam uma soma, isto é,

$$F_{ij} v_j = \sum_{j=1}^3 F_{ij} v_j.$$

Para as componentes de misturas esta notação não será usada.

Capítulo 2

Fundamentos da Mecânica do Contínuo

2.1 Equação Geral de Balanço

Na cinemática de partículas, [28] a trajetória de uma partícula é descrita por um vetor função do tempo, isto é,

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t),$$

onde $\mathbf{r}(t)$ representa um vetor posição que, em forma de componentes, tem-se

$$x = x(t), \quad y = y(t), \quad z = z(t).$$

Se existirem N partículas, existirão N trajetórias cada qual representada pela equação

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_n(t), \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

ou seja, para uma partícula qualquer 1, sua trajetória será descrita pelo vetor posição $\mathbf{r}_1(t)$, para uma partícula qualquer 2, a descrição será através do vetor posição $\mathbf{r}_2(t)$ e assim sucessivamente.

Entretanto, no regime contínuo, não é mais possível identificar as partículas pela associação de um número a cada uma delas como se faz na cinemática de partículas. No entanto, é possível identificar um elemento infinitesimal de um contínuo, denominado de partícula, pela posição que ele ocupa em algum tempo t_0 . Por exemplo, se uma partícula do contínuo está inicialmente, num instante t_0 na posição (X_1, X_2, X_3) , tem-se, em geral, a trajetória de cada partícula no contínuo poderá ser descrita por uma equação vetorial da forma $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ com $\mathbf{x} = (\mathbf{X}, t_0) = \mathbf{X}$, onde \mathbf{x} é um vetor posição num tempo t para a partícula P que estava na posição \mathbf{X} em $t = t_0$.

Representando através de componentes:

$$x_i = x_i(X_1, X_2, X_3, t) \quad (i = 1, 2, 3),$$

com $x_i = x_i(X_1, X_2, X_3, t) = X_i$ onde (X_1, X_2, X_3) servem para identificar as diferentes partículas do corpo e são conhecidas como coordenadas materiais. A ilustração das coordenadas materiais encontra-se na figura (2.1)¹.

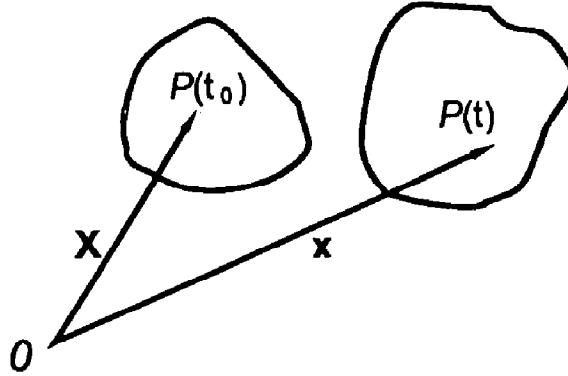


Figura 2.1: Coordenadas materiais

Duas descrições são usualmente empregadas para descrever o movimento de um contínuo [16]: a material e a espacial.

A descrição espacial ocupa-se com o que ocorre em regiões fixas do espaço com o decorrer do tempo, ao passo que a descrição material acompanha o movimento do corpo que, com o passar do tempo, ocupa diversas regiões do espaço.

A descrição espacial é então mais conveniente para analisar o escoamento de fluidos, enquanto que a material é preferida no estudo da deformação de sólidos e na análise dos princípios básicos da Mecânica do Contínuo.

Na descrição material, [20] as variáveis independentes são o lugar \mathbf{X} que identifica a partícula P num tempo t_0 enquanto que a descrição espacial utiliza como variáveis independentes o lugar \mathbf{x} atualmente ocupado pela partícula P e o tempo t .

No movimento de um corpo, a derivada material de um campo de valor escalar, vetorial ou tensorial, é uma derivada total que mede a taxa de variação (em relação ao tempo) da grandeza numa partícula fixa. Os campos podem ter como argumentos os pares (\mathbf{X}, t) ou (\mathbf{x}, t) , conforme seja adotada a descrição material ou espacial, respectivamente.

Seja F um campo escalar. Se F é dado na descrição material, então a derivada material simbolizada por \dot{F} , é expressa por

$$\frac{DF}{Dt}(\mathbf{X}, t) = \dot{F}(\mathbf{X}, t) = \left. \frac{\partial F}{\partial t}(\mathbf{X}, t) \right|_{\mathbf{X}=\text{const}}.$$

Se F é dado pela descrição espacial, então

¹Fonte: Lai, 1993.

$$\dot{F}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial F}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}, t) \cdot \dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t),$$

representa a derivada material numa descrição espacial. Pode-se representar a equação acima em componentes cartesianas como:

$$\dot{F} = \frac{DF}{Dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + u_j \frac{\partial F}{\partial x_j}, \quad (2.1)$$

onde u_j é o campo de velocidades.

Considerando o movimento do volume material $V(t)$ esquematizado na figura (2.2)² pode-se enunciar o seguinte teorema:

Teorema de Transporte de Reynolds [28]: Seja $V(t)$ um volume material cuja superfície $\partial V(t)$, de normal unitária \mathbf{n} , se move com uma velocidade \mathbf{u} [31]. Então para uma função qualquer contínua e diferenciável $A(x, t)$ tem-se

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial A(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dV + \int_{\partial V(t)} A(\mathbf{x}, t) (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS$$

ou

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V(t)} \left(\frac{DA(\mathbf{x}, t)}{Dt} + A(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) dV. \quad (2.2)$$

Nota-se que a notação D/Dt que aparece na frente da integral do lado esquerdo do sinal de igual da equação (2.2) enfatiza que a superfície de contorno da integral move-se com o material e calcula-se a taxa de variação do material.

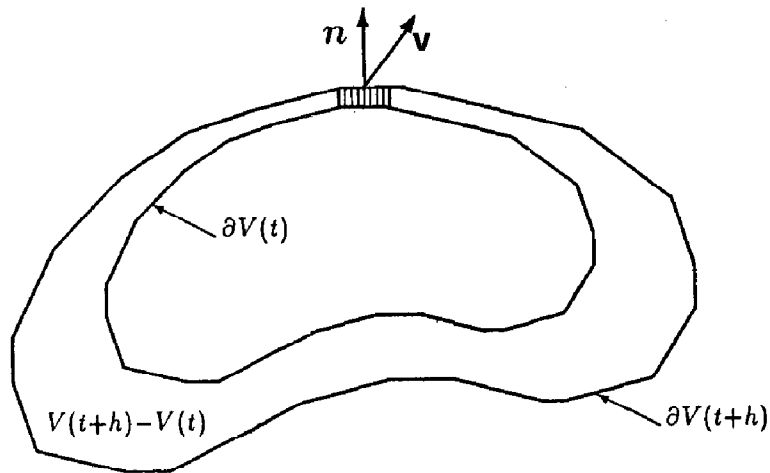


Figura 2.2: Volume material

²Fonte: Liu, 2002.

Demonstração : Para provar o teorema é fácil verificar que a derivada de $\int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV$ é definida como

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{V(t+\Delta t)} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) dV - \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV \right], \quad (2.3)$$

deve-se notar a diferença nos domínios $V(t + \Delta t)$ e $V(t)$. Denotando por ΔV a variação do movimento da superfície $\partial V(t)$ num pequeno intervalo de tempo Δt , desde que $V(t + \Delta t) = V(t) + \Delta V$ escreve-se (2.3) como sendo

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\Delta t} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) dV + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta V} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) dV \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\Delta t} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta V} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) dV + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) dV - \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV \right) \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{V(t+\Delta t) - V(t)} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) dV \right) \\ &\quad + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) dV - \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV \right). \end{aligned}$$

Para uma função diferenciável e contínua $A(\mathbf{x}, t)$ o último termo da equação anterior contribui com o valor $\int_{V(t)} \frac{\partial A(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dV$ para $\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV$.

Então

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{V(t+\Delta t) - V(t)} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) dV \right) \\ &\quad + \int_{V(t)} \frac{\partial A(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dV. \end{aligned} \quad (2.4)$$

O primeiro termo do lado direito da equação (2.4) pode ser reescrito de uma outra forma. Primeiramente, para um infinitesimal Δt o integrando será tomado com $A(\mathbf{x}, t)$ na superfície de contorno (devido ao fato de ser assumido que a função $A(\mathbf{x}, t)$ é uma função contínua), e a integral é igual a soma do produto de $A(\mathbf{x}, t)$ pelo volume varrido pelas partículas situadas na superfície $\partial V(t)$ no intervalo de tempo Δt . Logo, se n_i é o vetor unitário normal à superfície $\partial V(t)$, então o deslocamento da partícula na superfície de $\partial V(t)$ para $\partial V(t + \Delta t)$ é $u_i \Delta t$ e o volume varrido pelas partículas que ocupam este elemento de área dS é $\Delta V = u_i n_i dS \Delta t$.

Portanto, a integral sobre a variação de volume $V(t + \Delta t) - V(t)$ da equação (2.4) pode ser reescrita como uma integral no elemento de volume $(\mathbf{u}\Delta t)\cdot\mathbf{n}dS$, isto é,

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{V(t+\Delta t)-V(t)} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) dV \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{V(t+\Delta t)-V(t)} A(\mathbf{x}, t + \Delta t) (\mathbf{u}\Delta t)\cdot\mathbf{n}dS = \int_{\partial V(t)} A(\mathbf{x}, t) (\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}) dS. \end{aligned}$$

Então a equação (2.4) torna-se

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\partial V(t)} A(\mathbf{x}, t) (\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}) dS + \int_{V(t)} \frac{\partial A(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dV, \quad (2.5)$$

e usando o teorema da divergência de Gauss, em que a integral do divergente de um vetor sobre um volume V é igual à integral de superfície da componente normal do vetor sobre a superfície que limita V , o termo $\int_{\partial V(t)} A(\mathbf{x}, t) (\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}) dS$ iguala-se a $\int_{V(t)} \frac{\partial}{\partial x_j} (Au_j) dV$.

Assim a equação (2.5) transforma-se em

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_{V(t)} A(\mathbf{x}, t) dV &= \int_{V(t)} \frac{\partial A(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dV + \int_{V(t)} \frac{\partial}{\partial x_j} (Au_j) dV \\ &= \int_{V(t)} \left(\frac{\partial A}{\partial t} + u_j \frac{\partial A}{\partial x_j} + A \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) dV. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Considerando a derivada material representada pela equação (2.1) à equação (2.6) converte-se para

$$\frac{D}{Dt} \int_V A dV = \left(\int_V \frac{DA}{Dt} + A \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) dV \quad (2.7)$$

a qual será usada adiante e assim fica provado o teorema de transporte de Reynolds.

2.2 Balanço de Massa

A teoria termodinâmica dos fluidos tem por objetivo a determinação, em cada ponto do espaço e no instante de tempo t , dos campos de densidade de massa, velocidade e temperatura. O conhecimento destas grandezas se faz através do uso da equação de balanço [14] de massa, momento linear e energia que são equações gerais para sólidos e fluidos.

A massa é uma função aditiva e contínua cujo valor é um número real não negativo \mathcal{M} , independente do tempo, das dimensões e da forma que o corpo possa ter. Os argumentos dessa função são as partes³ \mathcal{P} do corpo. A aditividade da função

³Fonte: Liu, 2002.

$\mathcal{M}(\mathcal{P})$ implica a relação $\mathcal{M}(\mathcal{P}_1 + \mathcal{P}_2) = \mathcal{M}(\mathcal{P}_1) + \mathcal{M}(\mathcal{P}_2)$, quaisquer que sejam as partes disjuntas \mathcal{P}_1 e \mathcal{P}_2 contidas no corpo. Sua continuidade tem como consequência que $\mathcal{M} \rightarrow 0$ conforme o conjunto das partes \mathcal{P} tende para zero. A aditividade e a continuidade da função implica na existência de um campo escalar, chamado de densidade. Portanto, o princípio da conservação da massa estabelece simplesmente que a massa não pode ser criada e nem destruída num volume material, isto é, para um fluido ou sólido num volume material, a massa permanece constante.

Então pode-se dizer que o fluxo da densidade de massa é zero pois se está lidando com uma superfície material, ou seja, uma superfície que se move com as partículas. A produção da densidade de massa é zero pois a massa é conservada num volume material. O suprimento de massa também é zero pela razão que a densidade de massa não pode ser criada no interior de um volume material por meio de ações externas.

A massa contida num volume V num tempo t é

$$\mathcal{M} = \int_V \varrho dV$$

sendo $\varrho = \varrho(\mathbf{x}, t)$ representa a densidade local que é função da posição e do tempo. A conservação da massa requer que $\frac{D\mathcal{M}}{Dt} = 0$, por ser uma quantidade conservativa. A derivada $\frac{D\mathcal{M}}{Dt}$ é dada pela equação (2.7) desde que A seja identificado por ϱ . Então para um volume arbitrário V obtem-se uma forma alternativa para a lei da conservação da massa

$$\int_V \left(\frac{D\varrho}{Dt} + \varrho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) dV = 0.$$

0 Como o integrando é contínuo num volume do espaço e os limites de integração são arbitrários, obtem-se a equação de balanço de massa na forma local

$$\frac{D\varrho}{Dt} + \varrho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{\partial \varrho u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.8)$$

A equação acima é denominada de equação da continuidade.

Nota-se que, se o fluxo é estacionário, as propriedades do fluido dentro do volume considerado não variam no tempo, isto é, $\frac{\partial \varrho}{\partial t} = 0$, sendo que $\frac{\partial \varrho u_j}{\partial x_j} = 0$, logo esta quantidade é constante, tendo o mesmo valor em todos os pontos do fluido.

2.3 Balanço do Momento Linear

A segunda lei de movimento de Newton [20] no estudo da dinâmica, fundamentalmente diz que a força exercida sobre um corpo em um certo instante é igual a taxa de variação da quantidade de movimento durante este instante. Num instante de tempo t , o movimento linear de todas as partículas contidas num domínio V é

$$m_i = \int_V \varrho u_i dV.$$

Se o corpo está sujeito a forças de tensão T_i^n e a forças externas por unidade de volume F_i , então a força resultante é

$$f_i = \int_S T_i^n dS + \int_V F_i dV. \quad (2.9)$$

Considerando um corpo descrito pela figura (2.3)⁴ imagine uma superfície plana S que contém um ponto interno arbitrário P onde \mathbf{n} representa o vetor unitário normal a esta superfície. A superfície S separa o corpo em duas partes, a parte I e a parte II. Considerando a parte I como um corpo livre representa-se por ΔF a força resultante que age sobre um elemento de área ΔA da superfície S que contém P .

Define-se o vetor tensão [28] para a porção I no ponto P como o limite da razão da resultante das forças pelo elemento de área, quando este elemento de área tende a zero, isto é,

$$\mathbf{T} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta A}.$$

Se a parte considerada como corpo livre for a parte II, então pela Lei de Newton de ação e reação, deve-se ter um vetor tensão que age sobre o mesmo ponto mas em sentido oposto.

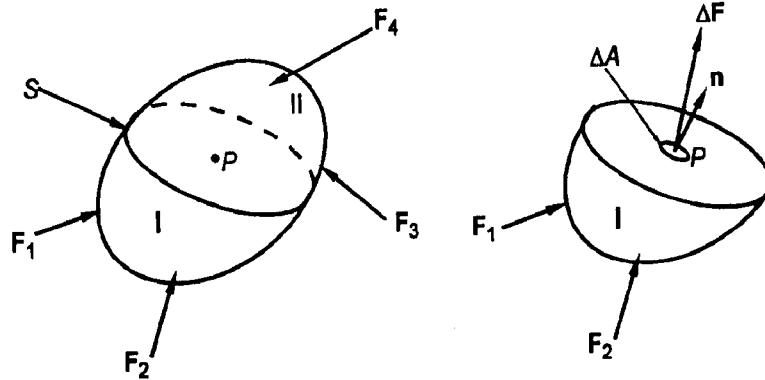


Figura 2.3: Corpo sujeito a forças externas

Então \mathbf{T}^+ , figura (2.4)⁵ representa a ação externa à superfície que apresenta a mesma magnitude porém sentido oposto a \mathbf{T}^- , o qual representa a ação interior à superfície.

Conforme a fórmula de Cauchy [20], conhecendo-se as componentes do tensor tensão [16] τ_{ij} pode-se escrever T_i^n agindo sobre qualquer superfície como sendo

$$T_i^n = \tau_{ij} n_j, \quad (2.10)$$

n_j é o vetor unitário normal a superfície de fronteira S do domínio V , mostrando que T_i^n é uma função linear e homogênea do versor \mathbf{n} e definindo o campo do tensor

⁴Fonte: Lai, 1993.

⁵Fonte: Lai, 1993.

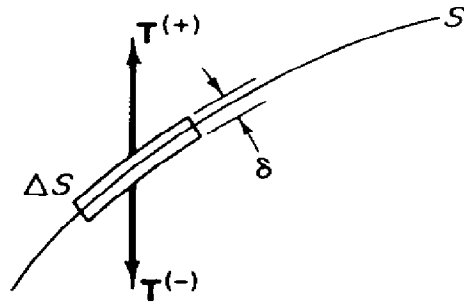


Figura 2.4: Equilíbrio de uma caixa de pílulas através da superfície S

tensão $\tau(\mathbf{x}, t)$. τ_{ij} representa a componente i da força por unidade de área atuando num elemento de superfície cuja normal dirigida para fora no ponto \mathbf{x} coincide com a direção j .

Na figura (2.5)⁶ τ_{11}, τ_{12} e τ_{13} são componentes do vetor τ_{1n} ; τ_{21}, τ_{22} e τ_{23} do vetor τ_{2n} e τ_{31}, τ_{32} e τ_{33} do vetor τ_{3n} .

As tensões τ_{11}, τ_{22} e τ_{33} são tensões normais, de tração quando positivas e de compressão quando negativas, e as outras seis são tensões de cisalhamento. Nas faces opostas, os versores normais são $-n_j$ e as componentes i dos vetores tensão são $-\tau_{ij}$.

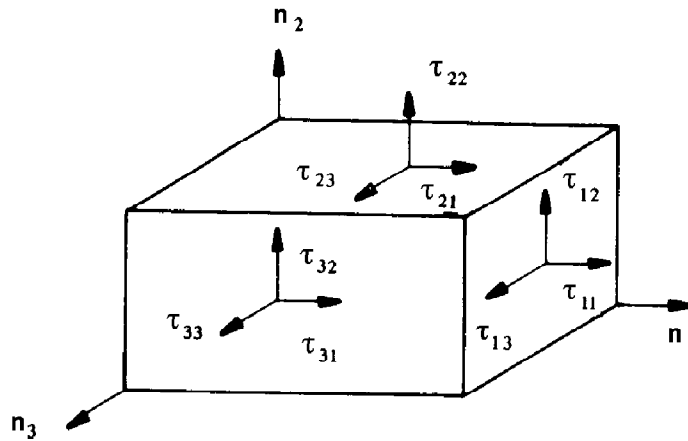


Figura 2.5: Tensões em três faces de um cubóide

Aplicando o teorema de divergência de Gauss e substituindo a expressão (2.10) na equação (2.9), escreve-se:

$$f_i = \int_V \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i \right) dV,$$

e pela segunda lei de Newton

$$\frac{D}{Dt} m_i = f_i,$$

⁶Fonte: Lai, 1993.

em um referencial inercial⁷.

No entanto, de acordo com a equação (2.7), identificando A por ρu_i tem-se que

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) \right) dV = \int_V \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i \right) dV.$$

Como a equação anterior deve ser tomada num volume arbitrário, o integrando dos dois lados será igual, portanto

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i. \quad (2.11)$$

A equação acima pode ser reescrita como

$$u_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} \right) + \rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i,$$

em que a quantidade que está no primeiro parênteses, de acordo com a equação da continuidade, é nula, enquanto que a quantidade do segundo parênteses representa a aceleração, ou seja, $\frac{D}{Dt} u_i$. Logo

$$\rho \frac{D u_i}{D t} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i, \quad (2.12)$$

representa a equação de balanço de momento linear.

Analisando agora o princípio do momento angular [28], considere o diagrama de um corpo livre como o esquematizado na figura (2.6)⁸.

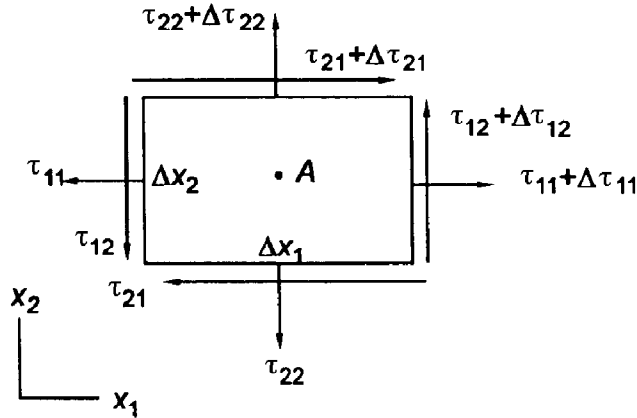


Figura 2.6: Corpo livre sujeito a tensões

⁷Sistema de referência inercial é aquele relativo ao qual um corpo permanece em repouso ou em movimento retilíneo uniforme, quando nenhuma força (ou resultante) atua sobre ele. Isto é, um referencial inercial é aquele em que a primeira lei de Newton descreve corretamente o movimento de um corpo em equilíbrio.

⁸Fonte: Lai, 1993.

A somatória do momento das forças de tensão em relação a um eixo que passa pelo ponto A e que é paralelo ao eixo x_3 será dada por:

$$\begin{aligned} \sum (M_A)_3 = & \tau_{12}(\Delta x_2)(\Delta x_3) \left(\frac{\Delta x_1}{2} \right) + (\tau_{12} + \Delta\tau_{12})(\Delta x_2)(\Delta x_3) \left(\frac{\Delta x_1}{2} \right) \\ & - \tau_{21}(\Delta x_1)(\Delta x_3) \left(\frac{\Delta x_2}{2} \right) - (\tau_{21} + \Delta\tau_{21})(\Delta x_1)(\Delta x_3) \left(\frac{\Delta x_2}{2} \right). \end{aligned}$$

Ainda tem-se que $\sum (M_A)_3$ representa o produto do momento de inércia pela componente da aceleração angular segundo o eixo x_3 , representada por α_3 , ou seja,

$$\begin{aligned} & \tau_{12}(\Delta x_2)(\Delta x_3) \left(\frac{\Delta x_1}{2} \right) + (\tau_{12} + \Delta\tau_{12})(\Delta x_2)(\Delta x_3) \left(\frac{\Delta x_1}{2} \right) - \tau_{21}(\Delta x_1)(\Delta x_3) \left(\frac{\Delta x_2}{2} \right) \\ & - (\tau_{21} + \Delta\tau_{21})(\Delta x_1)(\Delta x_3) \left(\frac{\Delta x_2}{2} \right) - \frac{\rho}{12}(\Delta x_1\Delta x_2\Delta x_3)[(\Delta x_1)^2 + (\Delta x_2)^2]\alpha_3. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Portanto, dividindo a equação (2.13) por $\Delta x_1\Delta x_2\Delta x_3$ e aplicando-se o limite quando $\Delta x_i \rightarrow 0$ obtém-se como conseqüência que o lado esquerdo da igualdade anterior torna-se nulo, além de $\Delta\tau_{12} \rightarrow 0$ e $\Delta\tau_{21} \rightarrow 0$, resultando assim

$$\tau_{12} = \tau_{21}.$$

Similarmente pode-se obter $\tau_{13} = \tau_{31}$ e $\tau_{23} = \tau_{32}$. De forma que estes resultados nos mostram que o tensor tensão é uma quantidade simétrica, isto é, $\tau_{ij} = \tau_{ji}$. Esta conclusão é válida para todos os corpos chamados de não-polares nos quais não existe um campo próprio de spin⁹.

2.4 Balanço de Energia

O princípio da conservação da energia [20] estabelece que a energia não pode ser criada e nem destruída. Por outro lado, a transferência de calor e a realização de trabalho são dois métodos de fornecimento ou retirada de energia de um sistema. Uma vez terminado o processo de transferência de energia, diz-se que houve mudança na energia interna do sistema. Então, se um sistema evolui, por diversos caminhos, de um estado para outro, nos quais o calor absorvido e o trabalho são medidos, constata-se que a soma entre o calor absorvido e o trabalho feito sobre o sistema é o mesmo para todos os caminhos entre o estado inicial e final, onde o calor absorvido é a energia adicionada ao sistema pela transferência de calor. Logo a soma entre estas quantidades representa a variação de energia interna do sistema que é independente dos estados intermediários.

Portanto, para qualquer sistema, o calor cedido deve ser igual ao aumento de energia no sistema diminuído da quantidade de energia referente ao trabalho realizado sobre o sistema.

⁹Fonte: Lai, 1993.

A lei da conservação de energia é a primeira lei da termodinâmica. Então, considerando duas formas de energia no meio contínuo tem-se que

$$U = K + \mathcal{E},$$

onde K representa a energia cinética contida num domínio regular V num tempo t dada por

$$K = \int_V \frac{1}{2} \rho u_i u_i dV,$$

em que u_i são as componentes do vetor velocidade da partícula que ocupa um elemento de volume dV e ρ é a densidade do material.

\mathcal{E} representa a energia interna escrita na forma

$$\mathcal{E} = \int_V \rho \epsilon dV,$$

com ϵ representando a energia interna por unidade de massa. Logo, a primeira lei da termodinâmica nos diz que

$$\Delta U = Q + W,$$

ou, expressando em termos de taxas tem-se

$$\frac{D}{Dt}(K + \mathcal{E}) = \dot{Q} + \dot{W} \quad (2.14)$$

em que \dot{Q} e \dot{W} são taxas temporais de Q e W .

Define-se a variação de calor pelo vetor fluxo de calor \mathbf{q} (com componentes q_1, q_2, q_3), dS como um elemento de superfície do corpo e n_i como um vetor unitário normal. Então, a taxa na qual o calor é transmitido através da superfície dS na direção de n_i será representada por $q_i n_i dS$. Portanto, a taxa de calor que entra será

$$\dot{Q} = - \int_S q_i n_i dS = - \int_V \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV,$$

onde o sinal menos indica que o calor fornecido ao corpo é positivo.

A taxa do trabalho feito pelo sistema é representada pela soma da potência da força por unidade de volume F_i em V e da potência da força de tensão T_i^n

$$\begin{aligned} \dot{W} &= \int_V F_i u_i dV + \int_S T_i^n u_i dS \\ &= \int_V F_i u_i dV + \int_S \tau_{ij} n_j u_i dS \\ &= \int_V F_i u_i dV + \int_V \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} dV. \end{aligned}$$

Substituindo as expressões de K , \mathcal{E} , \dot{Q} e \dot{W} na equação (2.14) deve-se ter

$$\frac{D}{Dt} \left[\int_V \frac{1}{2} \rho u_i u_i dV + \int_V \rho \epsilon dV \right] = - \int_V \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV + \int_V F_i u_i dV + \int_V \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} dV,$$

e com o uso da equação (2.7) a equação anterior será dada por:

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} \rho u_i u_i \right) + \frac{D}{Dt} (\rho \epsilon) + \left(\frac{1}{2} \rho u_i u_i \right) \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + (\rho \epsilon) \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right] dV \\ = - \int_V \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV + \int_V F_i u_i dV + \int_V \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} dV. \end{aligned}$$

A equação anterior é tomada num volume arbitrário e como os integrandos dos dois lados são iguais, obtém-se a expressão abaixo

$$\frac{1}{2} \rho \frac{Du^2}{Dt} + \frac{u^2}{2} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{u^2}{2} \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho \frac{D\epsilon}{Dt} + \epsilon \frac{D\rho}{Dt} + \rho \epsilon \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + F_i u_i + u_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (2.15)$$

Multiplicando-se a equação do momento (2.12) por u_i segue que

$$\rho u_i \frac{Du_i}{Dt} = u_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i u_i. \quad (2.16)$$

Logo a equação (2.15) pode ser simplificada, com base nas equações (2.8) e (2.16) e na relação

$$\rho u_i \frac{Du_i}{Dt} = \frac{1}{2} \rho \frac{Du^2}{Dt},$$

resultando em

$$\rho \frac{D\epsilon}{Dt} = - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad (2.17)$$

que representa a forma final da equação de balanço da energia interna específica¹⁰.

2.5 Equações Constitutivas

Será recapitulado as equações de balanço fundamentais do comportamento termodinâmico de um corpo. Elas são a equação da continuidade,

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0,$$

a equação de balanço de momento linear,

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i,$$

¹⁰Esta equação pode conter ainda um termo devido a radiação, porém para os nossos propósitos este é considerado nulo.

e a equação de balanço de energia interna específica,

$$\varrho \frac{D\epsilon}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}.$$

para referencial inercial.

Portanto, as equações de balanço acima, obtidas anteriormente, formam um sistema fechado¹¹ de equações diferenciais parciais para a densidade ϱ , a velocidade u_i e a energia interna ϵ , conhecendo-se o tensor tensão τ_{ij} e o vetor fluxo de calor q_i como função de ϱ , u_i e ϵ . Estas equações que faltam para tornar um problema termomecânico determinado são as chamadas equações constitutivas [47].

As equações constitutivas devem obedecer a determinadas condições gerais. Primeiramente, estas equações incluem constantes ou funções as quais caracterizam o material em consideração, e estas quantidades apresentam dimensões de forma que a homogeneidade dimensional da equação deverá ser satisfeita. Por exemplo, exige-se que estas equações sejam invariantes a mudanças de sistemas de referência. E ainda, na determinação do tensor tensão e do vetor fluxo de calor num ponto \mathbf{x} , a ação de outras partículas situadas além de uma certa vizinhança arbitrária de \mathbf{x} , pode ser desprezada.

Será considerado que o contínuo em estudo é um gás ideal monoatômico viscoso e condutor de calor e será empregado a densidade ϱ , a velocidade u_j e a temperatura T ao invés da densidade ϱ , da velocidade u_j e da energia interna específica ϵ como campos básicos.

Representando o tensor tensão por $\tau_{ij} = -P\delta_{ij} + \sigma_{ij}$ onde P é a pressão hidrostática e σ_{ij} o tensor viscoso, as equações constitutivas para o tensor viscoso, fluxo de calor e energia interna específica para um gás ideal monoatômico viscoso e condutor de calor são dadas através de:

$$\sigma_{ij} = \mu \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right], \quad (2.18)$$

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (2.19)$$

$$\epsilon = \frac{3}{2} \frac{k}{m} T. \quad (2.20)$$

A equação (2.18) representa a equação de um fluido Newtoniano sem o coeficiente de viscosidade volumétrica, desde que se esteja tratando de um gás monoatômico ideal. A equação (2.19) refere-se à lei de Fourier com o coeficiente de condutividade térmica κ dado em termos do coeficiente de viscosidade de cisalhamento μ através da equação abaixo [26]

$$\kappa = \frac{15}{4} \frac{k}{m} \mu. \quad (2.21)$$

¹¹Sistema fechado representa um sistema no qual o número de incógnitas é igual ao número de equações.

Para um gás ideal monoatômico tanto o coeficiente de condutividade térmica κ quanto o coeficiente de viscosidade de cisalhamento μ , dependem apenas da temperatura T . A equação (2.20) representa a equação de estado da energia interna por unidade de massa para um gás ideal monoatômico.

Capítulo 3

Fundamentos da Teoria Cinética dos Gases

3.1 Equação de Boltzmann para Gás Único

Considera-se um gás ideal¹ monoatômico constituído de N partículas que está contido num recipiente de volume V . Pode-se especificar o estado de uma partícula através de um ponto num espaço de seis dimensões determinado por três coordenadas de posição $\mathbf{x}=(x_1, x_2, x_3)$ e três coordenadas de velocidade $\mathbf{v}=(v_1, v_2, v_3)$.

Neste espaço o sistema de N partículas será descrito por N pontos com coordenadas $(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{v}_\alpha)$ com $\alpha = 1, 2, \dots, N$. Este espaço hexa-dimensional será denominado de espaço de fase μ .

O estado do gás no espaço de fase μ é caracterizado por uma função de distribuição $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, tal que

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{v} = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) dx_1 dx_2 dx_3 dv_1 dv_2 dv_3$$

resulta o número de partículas que, no tempo t , encontram-se no elemento de volume entre \mathbf{x} e $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ e com velocidades entre \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$, conforme está representado na figura (3.1).

Denota-se o elemento de volume no espaço de fase no instante de tempo t por

$$d\mu(t) = d\mathbf{x} d\mathbf{v}.$$

O número de partículas que estão neste elemento de volume no instante de tempo t é

$$N(t) = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mu(t).$$

No instante de tempo $t + \Delta t$ o elemento no espaço de fase será denotado por $d\mu(t + \Delta t)$ e o número de partículas neste elemento é dado por

$$N(t + \Delta t) = f(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, \mathbf{v} + \Delta\mathbf{v}, t + \Delta t) d\mu(t + \Delta t).$$

¹Denominação geral dos elementos químicos desprovidos de atividade química.

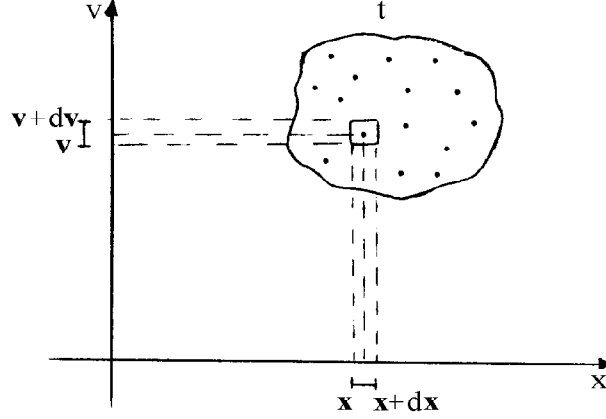


Figura 3.1: Espaço de fase μ

Se não houvessem colisões entre as partículas, $N(t)$ seria igual a $N(t + \Delta t)$, porém as colisões entre as partículas produzem uma mudança no número de partículas.

Como existem colisões, a diferença entre o número de partículas passa a ser representado por

$$\begin{aligned} \Delta N &= N(t + \Delta t) - N(t) \\ &= \int f(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, \mathbf{v} + \Delta \mathbf{v}, t + \Delta t) d\mu(t + \Delta t) - \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mu(t). \end{aligned}$$

Considera-se que as partículas do gás estão sujeitas a uma força externa $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ específica. A relação entre $d\mu(t + \Delta t)$ e $d\mu(t)$ é dada através do Jacobiano de transformação

$$d\mu(t + \Delta t) = |J| d\mu(t),$$

onde

$$J = \frac{\partial (x_1(t + \Delta t), x_2(t + \Delta t), \dots, v_3(t + \Delta t))}{\partial (x_1(t), x_2(t), \dots, v_3(t))}.$$

Tendo que

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + v_i \Delta t \quad v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + F_i \Delta t \quad i = 1, 2, 3$$

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial x_1} & \frac{\partial x_1}{\partial x_2} & \frac{\partial x_1}{\partial x_3} & \frac{\partial x_1}{\partial v_1} & \frac{\partial x_1}{\partial v_2} & \frac{\partial x_1}{\partial v_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial x_1} & \frac{\partial x_2}{\partial x_2} & \frac{\partial x_2}{\partial x_3} & \frac{\partial x_2}{\partial v_1} & \frac{\partial x_2}{\partial v_2} & \frac{\partial x_2}{\partial v_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial x_1} & \frac{\partial x_3}{\partial x_2} & \frac{\partial x_3}{\partial x_3} & \frac{\partial x_3}{\partial v_1} & \frac{\partial x_3}{\partial v_2} & \frac{\partial x_3}{\partial v_3} \\ \frac{\partial v_1}{\partial x_1} & \frac{\partial v_1}{\partial x_2} & \frac{\partial v_1}{\partial x_3} & \frac{\partial v_1}{\partial v_1} & \frac{\partial v_1}{\partial v_2} & \frac{\partial v_1}{\partial v_3} \\ \frac{\partial v_2}{\partial x_1} & \frac{\partial v_2}{\partial x_2} & \frac{\partial v_2}{\partial x_3} & \frac{\partial v_2}{\partial v_1} & \frac{\partial v_2}{\partial v_2} & \frac{\partial v_2}{\partial v_3} \\ \frac{\partial v_3}{\partial x_1} & \frac{\partial v_3}{\partial x_2} & \frac{\partial v_3}{\partial x_3} & \frac{\partial v_3}{\partial v_1} & \frac{\partial v_3}{\partial v_2} & \frac{\partial v_3}{\partial v_3} \end{pmatrix},$$

o Jacobiano pode ser escrito como sendo

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \Delta t & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \Delta l & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \Delta t \\ \frac{\partial F_1}{\partial x_1} \Delta t & \frac{\partial F_1}{\partial x_2} \Delta t & \frac{\partial F_1}{\partial x_3} \Delta t & 1 + \frac{\partial F_1}{\partial v_1} \Delta t & \frac{\partial F_1}{\partial v_2} \Delta t & \frac{\partial F_1}{\partial v_3} \Delta t \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1} \Delta t & \frac{\partial F_2}{\partial x_2} \Delta t & \frac{\partial F_2}{\partial x_3} \Delta t & \frac{\partial F_2}{\partial v_1} \Delta t & 1 + \frac{\partial F_2}{\partial v_2} \Delta t & \frac{\partial F_2}{\partial v_3} \Delta t \\ \frac{\partial F_3}{\partial x_1} \Delta t & \frac{\partial F_3}{\partial x_2} \Delta t & \frac{\partial F_3}{\partial x_3} \Delta t & \frac{\partial F_3}{\partial v_1} \Delta t & \frac{\partial F_3}{\partial v_2} \Delta t & 1 + \frac{\partial F_3}{\partial v_3} \Delta t \end{pmatrix},$$

e considerando até os termos lineares em Δt obtém-se

$$J \approx 1 + \frac{\partial F_i}{\partial v_i} \Delta t + \mathcal{O}[(\Delta t)^2].$$

Assim concluí-se que

$$d\mu(t + \Delta t) = \left(1 + \frac{\partial F_i}{\partial v_i} \Delta t \right) d\mu(t).$$

Por outro lado expandindo em série de Taylor $f(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, \mathbf{v} + \Delta \mathbf{v}, t + \Delta t)$ em torno do ponto $(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ e considerando somente termos lineares em Δt tem-se:

$$\begin{aligned} & f(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, \mathbf{v} + \Delta \mathbf{v}, t + \Delta t) \\ & \approx f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \frac{\partial f}{\partial x_i} \Delta x_i + \frac{\partial f}{\partial v_i} \Delta v_i + \frac{\partial f}{\partial t} \Delta t, \end{aligned}$$

onde

$$\Delta x_i = v_i \Delta t, \quad \Delta v_i = F_i \Delta t.$$

De forma que ΔN resulta como sendo

$$\begin{aligned} \Delta N &= N(t + \Delta t) - N(t) \\ &\approx \left[f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \frac{\partial f}{\partial x_i} v_i \Delta t + \frac{\partial f}{\partial v_i} F_i \Delta t + \frac{\partial f}{\partial t} \Delta t \right] \left(1 + \frac{\partial F_i}{\partial v_i} \Delta t \right) d\mu(t) - f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mu(t), \end{aligned}$$

e pode ser calculado o valor de ΔN dado por

$$\Delta N \approx \left[f \frac{\partial F_i}{\partial v_i} \Delta t + \frac{\partial f}{\partial x_i} v_i \Delta t + \frac{\partial f}{\partial v_i} F_i \Delta t + \frac{\partial f}{\partial t} \Delta t \right] d\mu(t),$$

e dividindo a expressão acima por Δt vem

$$\frac{\Delta N}{\Delta t} \approx \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x_i} v_i + \frac{\partial (f F_i)}{\partial v_i} \right] d\mu(t), \quad (3.1)$$

isto é, tem-se a variação do número de partículas em relação ao tempo que envolve derivada temporal, espacial e das velocidades da função de distribuição $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$.

A quantidade $\frac{\Delta N}{\Delta t}$ só será nula para o caso em que não existirem colisões entre as partículas. Portanto será determinado ΔN com base em quatro hipóteses:

- Para um gás rarefeito somente as interações entre os pares de partículas (colisões binárias) são levadas em consideração, pois a probabilidade de ocorrer colisões ternárias ou quaternárias é muito pequena em relação as colisões binárias.
- As forças externas durante a colisão podem ser desprezadas, isto é, o efeito das forças externas sobre as partículas durante a colisão é pequeno em comparação com as forças que agem entre as partículas.

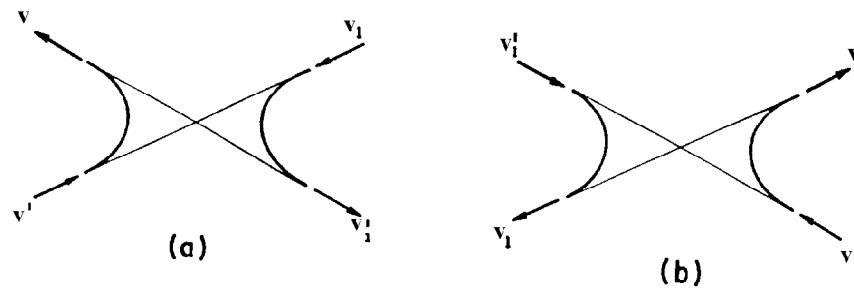


Figura 3.2: Colisões direta (a) e de restituição (b)

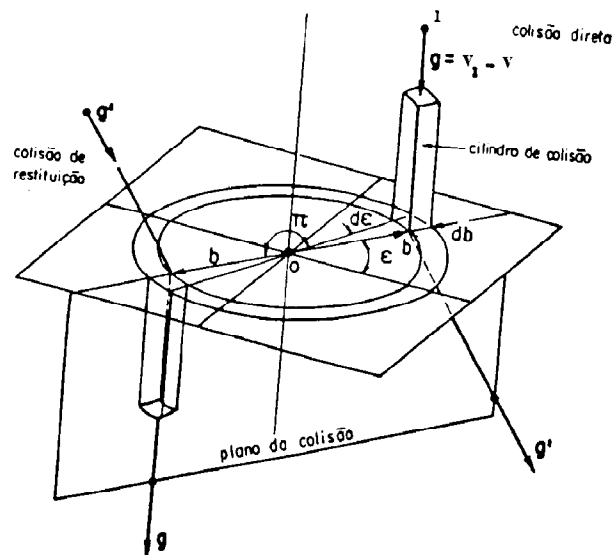


Figura 3.3: Geometria de uma colisão binária

- Não existe correlação entre a posição e a velocidade das partículas. Esta suposição é conhecida como a suposição do caos molecular².

- A variação da função de distribuição não é grande durante o intervalo de tempo de duração de uma colisão mas somente durante o tempo entre as colisões.

²Fonte: Kremer, 2003.

Considera-se duas partículas do gás cujas velocidades assintóticas pré-colisionais são denotadas por \mathbf{v} e \mathbf{v}_1 e as velocidades pós-colisionais por \mathbf{v}' e \mathbf{v}'_1 figura(3.2)³.

Na figura (3.3)⁴ a partícula com velocidade \mathbf{v} está no ponto O, enquanto que a outra partícula está se aproximando do plano segundo um ângulo reto e com velocidade relativa $\mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}$. Este movimento relativo é ainda caracterizado pelo parâmetro de impacto b e pelo ângulo azimutal ϵ .

Assim o volume do cilindro, chamado de cilindro de colisão, no intervalo de tempo Δt será dado pelo produto da área da base $b db d\epsilon$ pela altura $g\Delta t$. Pode-se então dizer que, no intervalo de tempo Δt , todas as partículas com velocidades entre \mathbf{v}_1 e $\mathbf{v}_1 + d\mathbf{v}_1$ e que se encontram no cilindro de colisão, irão colidir com as partículas com velocidades entre \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ localizadas no elemento de volume $d\mathbf{x}$ em torno do ponto O. O número das partículas com velocidade entre \mathbf{v}_1 e $\mathbf{v}_1 + d\mathbf{v}_1$ no cilindro de colisão é dado por

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) d\mathbf{v}_1 g \Delta t b db d\epsilon.$$

Estas partículas irão colidir com todas as partículas com velocidades entre \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ e que se encontram no elemento de volume $d\mathbf{x}$ em torno de O, isto é,

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{v}.$$

Logo deseja-se obter a variação com o tempo para uma orientação ϵ e para um determinado valor de b onde para isto tem-se que integrar sobre todos os valores do parâmetro de impacto b com variação de 0 a $+\infty$, sobre o ângulo azimutal ϵ variando de 0 a 2π e sobre todas as componentes da velocidade \mathbf{v}_1 de $-\infty$ a $+\infty$ tem-se

$$\left(\frac{\Delta N}{\Delta t}\right)^- = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mu(t). \quad (3.2)$$

Na equação anterior será representado somente por um símbolo de integração todas as cinco integrais descritas anteriormente onde $\left(\frac{\Delta N}{\Delta t}\right)^-$ denota a saída das partículas, que estavam com velocidade \mathbf{v} do elemento de volume $d\mu(t)$.

Porém, há colisões que criam pontos com velocidade \mathbf{v} no elemento de volume $d\mathbf{x} d\mathbf{v}$. Então ao se considerar a análise anterior pode-se afirmar que a densidade do número total de colisões que ocorrem no elemento de volume $d\mathbf{x}$ e tempo Δt é dada por

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t) b' db' d\epsilon' g' \Delta t d\mathbf{v}'_1 f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) d\mathbf{x} d\mathbf{v}'.$$

Serão utilizadas relações obtidas através da conservação de energia, conservação de momento angular representadas por $g' = g$ e $b' = b$, respectivamente, e considerar que ϵ representa apenas uma translação $d\epsilon' = d\epsilon$. Além disso, como o Jacobiano da transformação de velocidades é unitário, tem-se que $d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}' = d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}$ e a equação anterior pode ser escrita na forma

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) b db d\epsilon g \Delta t d\mathbf{x} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}.$$

³Fonte: Kremer, 1995.

⁴Fonte: Kremer, 1995.

Logo, a densidade do número total de colisões por intervalo de tempo Δt , que cria pontos no espaço de fase μ com velocidade \mathbf{v} no elemento de volume $d\mathbf{x} d\mathbf{v}$, é expressa como

$$\left(\frac{\Delta N}{\Delta t}\right)^+ = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mu(t). \quad (3.3)$$

Com base nos resultados (3.1)-(3.3) tem-se que ΔN é representada pela diferença entre as partículas ganhas e perdidas no elemento de volume $d\mu(t)$, o que resulta

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{\partial(f F_i)}{\partial v_i} = \int (f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 = Q(f, f), \quad (3.4)$$

que é denominada de equação de Boltzmann. Na equação (3.4) foram introduzidas abreviações para f'_1 , f' , f_1 e f representadas por $f'_1 \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t)$, $f' \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t)$, $f_1 \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t)$, $f \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, respectivamente.

Esta equação (3.4), é uma equação integro-diferencial não linear para a função de distribuição f . Observa-se que a equação de Boltzmann [9] foi deduzida para o caso de gases monoatômicos e em muitos casos \mathbf{F} não depende de \mathbf{v} , como por exemplo o caso da força de atração gravitacional e neste caso (3.4) se reduz a

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} - \int (f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 = Q(f, f). \quad (3.5)$$

3.2 Equações de Balanço para Gás Único

Na teoria cinética as quantidades que caracterizam o estado macroscópico de um gás são definidas a partir da função de distribuição $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$. Considerando como campos básicos os campos definidos pelos momentos da função de distribuição.

A primeira propriedade de uma partícula é a massa cuja integral do produto da massa da partícula pela função de distribuição integrada sobre todas as velocidades fornece a massa por unidade de volume, isto é, a densidade,

$$\varrho(\mathbf{x}, t) = \int m f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (3.6)$$

A cada partícula de massa m associa-se uma velocidade onde a integral do produto da massa pela velocidade da partícula e pela função de distribuição integrada sobre todas as velocidades fornece a densidade do momento linear,

$$\varrho u_i(\mathbf{x}, t) = \int m v_i f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (3.7)$$

E ainda pode-se ter a densidade de energia total representada por

$$\varrho e(\mathbf{x}, t) = \int \frac{1}{2} m v^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad (3.8)$$

pois $\frac{1}{2}mv^2$ é a energia cinética de uma partícula. Portanto, com base nas quantidades microscópicas m, mv_i e $\frac{1}{2}mv^2$ definiu-se a densidade de massa ρ , a densidade de momento linear ρu_i e a densidade de energia ρe através das equações (3.6), (3.7), (3.8), respectivamente.

Sendo v_i a velocidade de uma partícula e u_i que é a velocidade do gás, pode-se definir $V_i = v_i - u_i$ como a velocidade peculiar que representa a diferença entre uma velocidade microscópica v_i e uma velocidade macroscópica u_i que é a velocidade do gás.

Para qualquer função de distribuição $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$

$$\int V_i f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = 0, \quad (3.9)$$

que é provada com o uso da definição da velocidade peculiar, ou seja,

$$\int (v_i - u_i) f d\mathbf{v} = \int v_i f d\mathbf{v} - u_i \int f d\mathbf{v} = \frac{\rho u_i}{m} - u_i \frac{\rho}{m} = 0.$$

A densidade de energia total dada pela equação (3.8) pode ser separada como a soma de duas energias,

$$\rho e = \int \frac{1}{2} m (V^2 + 2\mathbf{V} \cdot \mathbf{u} + u^2) f d\mathbf{v},$$

onde a integral envolvendo a quantidade $\mathbf{V} \cdot \mathbf{u}$ é nula devido a equação (3.9). Portanto

$$\rho e = \frac{1}{2} \int m V^2 f d\mathbf{v} + \frac{1}{2} \int m u^2 f d\mathbf{v},$$

$$\rho e = \frac{1}{2} \int m V^2 f d\mathbf{v} + \frac{1}{2} \rho u^2,$$

onde $\frac{1}{2} \int m V^2 f d\mathbf{v}$ representa a densidade de energia interna e $\frac{1}{2} \rho u^2$ representa a densidade de energia cinética translacional.

Pode-se ainda representar a densidade da energia interna por

$$\rho \epsilon = \frac{1}{2} \int m V^2 f d\mathbf{v}, \quad (3.10)$$

onde ϵ representa a energia interna específica.

Então os momentos da função de distribuição são dados pelas equações (3.6)-(3.8), enquanto que o momento da função de distribuição de ordem N é definido através de

$$p_{i_1 i_2 \dots i_N}(\mathbf{x}, t) = \int m V_{i_1} V_{i_2} \dots V_{i_N} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v},$$

que representa um tensor simétrico em todos os índices.

O momento de ordem zero é a densidade de massa, enquanto que o momento de primeira ordem é nulo como conseqüência da equação (3.9) multiplicada pela massa da partícula. O momento de segunda ordem é chamado de tensor pressão dado por

$$p_{ij}(\mathbf{x}, t) = \int mV_iV_jf(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{v}.$$

O tensor pressão é igual ao tensor tensão em módulo, ou seja $\tau_{ij} = -p_{ij}$. O tensor viscoso σ_{ij} é definido por

$$\sigma_{ij} = P\delta_{ij} - m \int V_iV_jf d\mathbf{v}. \quad (3.11)$$

O momento de terceira ordem é representado por

$$p_{ijk}(\mathbf{x}, t) = \int mV_iV_jV_kf(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{v},$$

que não tem denominação. Uma contração importante do momento de terceira ordem é o vetor fluxo de calor expresso como

$$q_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2}p_{jji} = \frac{1}{2} \int V^2V_if(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{v}. \quad (3.12)$$

A soma dos elementos da diagonal principal está associada com a pressão do gás P através da expressão

$$p_{ij} = \int mV^2f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{v} = 3P(\mathbf{x}, t). \quad (3.13)$$

Com a representação da energia interna sendo dada pela equação (3.10), conclui-se que

$$P = \frac{3}{2}\rho\epsilon.$$

Por outro lado, a equação que relaciona a pressão P com a densidade ρ e a temperatura absoluta T é denominada de equação de estado térmica, onde para um gás ideal clássico é expressa por

$$P = \rho \frac{k}{m} T.$$

Conseqüentemente, a temperatura absoluta para um gás clássico monoatômico é dada por

$$T(\mathbf{x}, t) = \frac{m}{k} \frac{P}{\rho} = \frac{2}{3} \frac{m}{k} \epsilon = \frac{m}{3\rho k} \int mV^2f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{v}.$$

Os momentos de ordem superior não têm nomes próprios específicos.

Uma interpretação para o tensor tensão é que ele representa um transporte de momento linear por se tratar de um produto entre o momento linear e uma velocidade, por outro lado o transporte de energia é dado pelo vetor fluxo de calor onde o fator $\frac{1}{2}mV^2$ está relacionado com a energia.

Agora pode-se obter as equações de balanço de massa, momento linear e energia a partir da equação de transporte⁵. Primeiramente, obtem-se o balanço da densidade de massa substituindo $\psi = m$ na equação de transporte. Com o uso das equações (3.6) e (3.7), resulta de uma forma simples

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (3.14)$$

que é a equação da continuidade.

A seguir, o balanço da densidade de momento linear vem da substituição de $\psi = mv_i$ na equação de transporte. Considerando que

$$mv_i v_j = m(V_i V_j + V_i u_j + V_j u_i + u_i u_j), \quad F_j \frac{\partial mv_i}{\partial v_j} = m F_j \delta_{ij} = m F_i$$

e as equações (3.7), (3.14) e (3.6), conclui-se que

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j - \tau_{ij}) = \rho F_i. \quad (3.15)$$

Para se obter o balanço da densidade de energia substitui-se $\psi = \frac{1}{2}mv^2$ na equação de transporte. Transformando $v^2 v_j$ em velocidade peculiar

$$v^2 v_j = (V^2 + 2V_k u_k + u^2)(V_j + u_j),$$

$$F_j \frac{\partial (\frac{1}{2}mv^2)}{\partial v_j} = F_j \frac{\partial (\frac{1}{2}mv_k v_k)}{\partial v_j} = m F_j v_k \delta_{kj} = m F_i v_j$$

e usando as equações (3.7), (3.12), (3.13), (3.15) encontra-se facilmente a expressão

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\epsilon + \frac{1}{2}u^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \left(\epsilon + \frac{1}{2}u^2 \right) u_i + q_i - \tau_{ij} u_j \right] = \rho F_i u_i. \quad (3.16)$$

Outras formas alternativas podem ser encontradas, como por exemplo o balanço da energia interna específica. Vide a equação (2.17) do capítulo 2.

Em resumo, tem-se a teoria dos 5 campos escalares ρ , u_i , e ϵ , através das equações

$$\rho = \int m f d\mathbf{v},$$

$$\rho u_i = \int m v_i f d\mathbf{v},$$

$$\rho \epsilon = \int \frac{1}{2} m v^2 f d\mathbf{v},$$

onde as leis de balanço são as mesmas da termodinâmica do contínuo.

Para determinar estes 5 campos é necessário encontrar as equações constitutivas da teoria cinética que relacionem os termos constitutivos (ρ, u_i, T) com as grandezas (ϵ, q_i, p_{ij}) .

⁵A equação de transporte, assim como sua dedução, encontra-se no Apêndice A.

3.3 Equações Constitutivas em Teoria Cinética para Gás Único

A idéia básica do método de Chapman-Enskog [15, 27] é dividir a função de distribuição em dois termos aditivos. O primeiro termo consiste de uma função de distribuição de Maxwell que fornece os valores locais da densidade, velocidade e temperatura. Este termo corresponde à primeira aproximação para a função de distribuição. O segundo termo consiste de um desvio da função de distribuição de Maxwell e corresponde à segunda aproximação para a função de distribuição. Deste resultam as grandezas de transporte que estão relacionadas com o tensor viscoso σ_{ij} e com o fluxo de calor q_i . Então como resultado obtém-se

$$\sigma_{ij} = \mu \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_r}{\partial x_r} \delta_{ij} \right], \quad (3.17)$$

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (3.18)$$

$$\mu = \frac{5}{16} \frac{1}{\Omega^{(2,2)}} \left(\frac{mkT}{\pi} \right)^{1/2}, \quad (3.19)$$

$$\kappa = \frac{15}{4} \frac{k}{m} \mu = \frac{75}{64} \frac{k}{m} \frac{1}{\Omega^{(2,2)}} \left(\frac{mkT}{\pi} \right)^{1/2}. \quad (3.20)$$

As equações constitutivas (3.17), (3.18) representam, respectivamente, as leis de Navier-Stokes e Fourier. Os coeficientes μ e κ são denominados genericamente como coeficiente de transporte, pois estão associados, respectivamente, ao transporte de momento linear e energia. μ é conhecido como coeficiente de viscosidade de cisalhamento enquanto que κ como coeficiente de condutividade térmica. $\Omega^{(2,2)}$ representa a integral dada na forma geral abaixo que depende do tipo de interação entre as partículas

$$\Omega^{(l,r)} = \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\gamma^2} \gamma^{2r+3} (1 - \cos^l \chi) b \, db \, d\gamma, \quad (3.21)$$

onde $\gamma = \left(\frac{m}{4kT} \right)^{1/2} g$ e g é o mesmo da seção 3.1. Para o potencial de esfera-rígida $\Omega^{(2,2)} = a^2$, onde a é o diâmetro da partícula.

3.4 A Equação de Boltzmann para Misturas de Gases Monoatômicos

A função de distribuição para cada constituinte α da mistura obedece a equação de Boltzmann

$$v'_{\alpha i} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial x'_i} = \sum_{\beta=1}^n \int (f'_{\alpha} f'_{\beta} - f_{\alpha} f_{\beta}) g_{\beta\alpha} b db d\epsilon d\mathbf{v}_{\beta} = \sum_{\beta=1}^n Q_{\alpha\beta}(f_{\alpha}, f_{\beta}). \quad (3.22)$$

A equação (3.22)⁶ representa uma equação íntegro-diferencial, não-linear para o caso de mistura de gases monoatômicos em regime de escoamento estacionário ($\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} = 0$) e sem a presença de forças externas ($F_i = 0$).

A principal dificuldade matemática apresentada na equação de Boltzmann está associada com o termo de colisão $Q_{\alpha\beta}(f_{\alpha}, f_{\beta})$. Muitas alternativas são analisadas com o objetivo de simplificar o termo de colisão facilitando assim a solução da equação de Boltzmann.

Expressões mais simples para este termo tem sido propostas por diversos autores. Estas são conhecidas como modelo de colisão e a equação de Boltzmann na qual o termo de colisão é substituído por um modelo passa a ser chamada de equação modelo [7, 37] ou modelo cinético. A idéia por detrás desta substituição é facilitar a resolução da equação de Boltzmann de forma a fornecer resultados satisfatórios, isto é, a equação modelo deve apresentar bons resultados que podem ser comparáveis aos resultados da solução exata da equação de Boltzmann [40]. Assim o termo de colisão poderá ser substituído por um operador $J(f)$ o qual conserva as seguintes propriedades:

$$\int m_{\alpha} Q_{\alpha\beta} d\mathbf{v}_{\alpha} = 0, \quad (3.23)$$

$$\int m_{\alpha} v_{\alpha i} Q_{\alpha\beta} d\mathbf{v}_{\alpha} + \int m_{\beta} v_{\beta i} Q_{\beta\alpha} d\mathbf{v}_{\beta} = 0, \quad (3.24)$$

$$\int \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2 Q_{\alpha\beta} d\mathbf{v}_{\alpha} + \int \frac{1}{2} m_{\beta} v_{\beta}^2 Q_{\beta\alpha} d\mathbf{v}_{\beta} = 0, \quad (3.25)$$

que expressam a conservação da massa, do momento linear e da energia de cada colisão de uma partícula α com uma partícula β sendo m_{α} e m_{β} a massa da partícula dos constituintes α e β , respectivamente. Isto significa que, entre cada colisão de uma partícula α com uma partícula β deve-se conservar a massa, o momento linear e a energia, ou seja, a massa da mistura é conservada sem se tratar de reações químicas, o momento linear da mistura é conservado para qualquer (α, β) de uma colisão binária e a energia da mistura é conservada para qualquer (α, β) .

No modelo cinético utilizado a expressão do operador de colisão quadrática é dada por

$$Q_{\alpha\beta} = -\nu'_{\alpha\beta} (f_{\alpha} - f_{\alpha\beta}^R). \quad (3.26)$$

O sinal negativo acima é devido ao tempo de relaxação (a função decai com o tempo). $\nu'_{\alpha\beta}$ denota a frequência de colisão que independe das velocidades das partículas e $f_{\alpha\beta}^R$ a função de distribuição de referência. Primeiramente o objetivo é determinar $f_{\alpha\beta}^R$ que é uma função fora do equilíbrio. A frequência de colisão obedece

⁶Todas as quantidades dimensionais serão denotadas por uma plica, ', a partir desta seção.

a relação simétrica $n_\alpha \nu'_{\alpha\beta} = n_\beta \nu'_{\beta\alpha}$ onde $n_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{m_\alpha}$ representa a densidade do número de partículas do constituinte α .

Então substituindo-se a expressão do operador de colisão quadrática (3.26) na equação (3.22) encontra-se a equação modelo

$$v'_{\alpha i} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x'_i} = - \sum_{\beta=1}^n \nu'_{\alpha\beta} (f_\alpha - f_{\alpha\beta}^R), \quad (3.27)$$

com a qual será trabalhado. Esta equação cinética está escrita na forma dimensional.

Considerando uma mistura de gases de n constituintes confinada entre duas placas paralelas, tem-se que inicialmente o sistema encontra-se em equilíbrio pois as placas estão em repouso. Este equilíbrio será fracamente perturbado através do movimento relativo entre as placas. Assim para este problema tem-se que f_α representa a função de distribuição dos constituintes

$$f_\alpha(\mathbf{x}', \mathbf{v}'_\alpha) = f_\alpha^M(\mathbf{v}'_\alpha) \left[1 + h_\alpha(y', \mathbf{v}'_\alpha) \frac{U}{v_0} \right], \quad (3.28)$$

onde f_α^M é a função de distribuição Maxwelliana [27] correspondente ao estado de equilíbrio

$$f_\alpha^M = n_{0\alpha} \left(\frac{m_\alpha}{2\pi kT_0} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m_\alpha}{2kT_0} v_\alpha'^2 \right), \quad (3.29)$$

$h_\alpha(y', \mathbf{v}'_\alpha)$ representa a perturbação da função de distribuição do sistema e $n_{0\alpha}$ é a distribuição da densidade em equilíbrio do número de partículas do constituinte α entre as placas. Assume-se que as velocidades das placas U são pequenas comparadas com a velocidade molecular característica da mistura, $U \ll v_0$, $v_0 = \left(\frac{2kT_0}{m} \right)^{1/2}$ onde m é a massa molecular média. É conveniente introduzir quantidades adimensionais para as quantidades da velocidade molecular do constituinte α , \mathbf{v}'_α e a posição \mathbf{x}' .

Assim, a velocidade dimensional \mathbf{v}'_α está relacionada com a velocidade adimensional \mathbf{c}_α através do parâmetro $\beta_{0\alpha} = \left(\frac{m_\alpha}{2kT_0} \right)^{1/2}$, ou seja

$$\mathbf{v}'_\alpha = \beta_{0\alpha}^{-1} \mathbf{c}_\alpha \quad (3.30)$$

e introduz-se a grandeza adimensional

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{x}'}{D}, \quad (3.31)$$

onde D representa a distância entre as placas paralelas suficientemente longas conforme a figura (3.4).

Agora com todo o conjunto de expressões (3.28)-(3.31) é possível escrever primeiramente o lado esquerdo da equação (3.27) na forma adimensional. Para isto trabalha-se com o termo $v'_{\alpha i} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x'_i}$. Portanto

$$v'_{\alpha i} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x'_i} = \beta_{0\alpha}^{-1} c_{\alpha y} \frac{1}{D} \frac{\partial f_\alpha}{\partial y}.$$

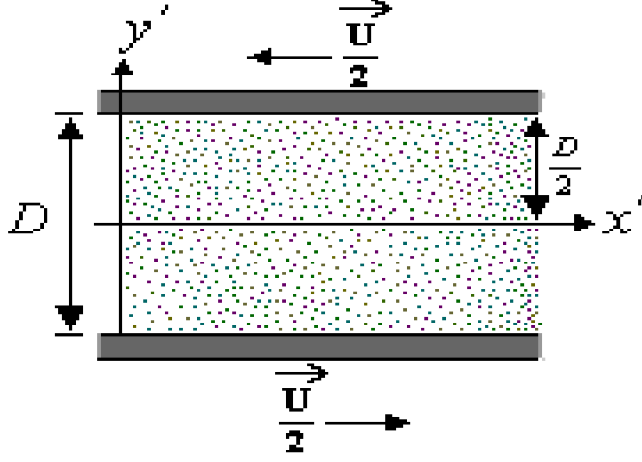


Figura 3.4: Fluxo de Couette entre duas placas paralelas

A derivada da função de distribuição dos constituintes f_α em relação a componente radial y é igual a

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial y} = \frac{\partial f_\alpha^M}{\partial y} \left[1 + h_\alpha \frac{U}{v_0} \right] + f_\alpha^M \frac{\partial h_\alpha}{\partial y} \frac{U}{v_0},$$

como $\frac{\partial f_\alpha^M}{\partial y} = 0$ tem-se

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial y} = n_{0\alpha} \left(\frac{m_\alpha}{2\pi kT_0} \right)^{3/2} \exp(-c_\alpha^2) \frac{\partial h_\alpha}{\partial y} \frac{U}{v_0}.$$

Então consegue-se representar o lado esquerdo da equação (3.27) na seguinte forma adimensional

$$\frac{1}{\beta_{0\alpha} D} f_\alpha^M \frac{U}{v_0} \left(c_{\alpha y} \frac{\partial h_\alpha}{\partial y} \right) = - \sum_{\alpha=1}^n \nu'_{\alpha\beta} (f_\alpha - f_{\alpha\beta}^R).$$

Isolando $c_{\alpha y} \frac{\partial h_\alpha}{\partial y}$ tem-se

$$\left(c_{\alpha y} \frac{\partial h_\alpha}{\partial y} \right) \frac{U}{v_0} = D \left(\frac{m_\alpha}{2kT_0} \right)^{1/2} \sum_{\alpha=1}^n \nu'_{\alpha\beta} \left(\frac{f_{\alpha\beta}^R}{f_\alpha^M} - \frac{f_\alpha}{f_\alpha^M} \right). \quad (3.32)$$

Utilizando o modelo proposto por McCormack [36] pode-se reescrever a equação (3.32) como

$$c_{\alpha y} \frac{\partial h_\alpha}{\partial y} = D \left(\frac{m_\alpha}{2kT_0} \right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^n \hat{L}_{\alpha\beta} h, \quad (\alpha, \beta) = (1, \dots, n). \quad (3.33)$$

sendo que $\hat{L}_{\alpha\beta} h$ (3.33) representa uma expansão de um polinômio da velocidade adimensional c_α . Estes são apresentados na seção 4.2.

3.5 Equações de Balanço para Misturas de Gases Monoatômicos

As quantidades macroscópicas para cada constituinte α da mistura, a densidade parcial de massa ϱ_α e a densidade parcial do momento linear $\varrho_\alpha u'_{\alpha i}$, são definidos em termos da função de distribuição $f_\alpha = (\mathbf{x}, \mathbf{v}'_\alpha, \mathbf{t})$ e a partir das quantidades microscópicas m_α e $m_\alpha v'_{\alpha i}$, ou seja, a densidade parcial de massa com a representação

$$\varrho_\alpha(\mathbf{x}', t) = \int m_\alpha f_\alpha d\mathbf{v}'_\alpha, \quad (3.34)$$

e a densidade parcial do momento linear por

$$\varrho_\alpha u'_{\alpha i}(\mathbf{x}', t) = \int m_\alpha v'_{\alpha i} f_\alpha d\mathbf{v}'_\alpha. \quad (3.35)$$

Além disso o deviante do tensor tensão⁷ $\tau'_{\langle ij \rangle}$ e o fluxo de calor q'_α do constituinte α são divididos em: tensor tensão parcial

$$\tau'_{ij}{}^\alpha = \int m_\alpha V_{\alpha i} V_{\alpha j} f_\alpha d\mathbf{v}'_\alpha, \quad (3.36)$$

e fluxo de calor parcial

$$q'_{\alpha i} = \frac{1}{2} \int m_\alpha V_\alpha^2 V_{\alpha i} f_\alpha d\mathbf{v}'_\alpha, \quad (3.37)$$

onde m_α representa a massa da partícula α . Também foi introduzida a velocidade peculiar do constituinte α , $V_{\alpha i}$, definida como a diferença entre a velocidade molecular e a velocidade linear.

Para uma mistura de n gases monoatômicos ideais tem-se que a densidade de massa da mistura ϱ , a densidade do momento linear da mistura ϱu_i , o tensor tensão da mistura τ'_{ij} e o fluxo de calor da mistura q'_i são fornecidos por

$$\varrho = \sum_{\alpha=1}^n \varrho_\alpha, \quad (3.38)$$

$$\varrho u'_i = \sum_{\alpha=1}^n \varrho_\alpha u'_{\alpha i}, \quad (3.39)$$

$$\tau'_{ij} = \sum_{\alpha=1}^n \tau'_{ij}{}^\alpha, \quad (3.40)$$

$$q'_i = \sum_{\alpha=1}^n q'_{\alpha i}, \quad (3.41)$$

nos quais concluí-se que a densidade da mistura é a soma das densidades dos constituintes e de uma forma semelhante para as outras grandezas.

⁷Deviante do tensor pressão $p'_{\langle ij \rangle}$ é definido como o tensor de traço nulo $p'_{\langle ij \rangle} = p'_{ij} - \frac{1}{3} p'_{rr} \delta_{ij}$, onde o tensor pressão é igual ao tensor tensão em módulo, ou seja $\tau'_{ij}{}^\alpha = -p'_{ij}{}^\alpha$.

3.6 Os Potenciais de Interação Molecular

De uma maneira geral, as forças de interação que agem sobre os átomos e moléculas podem ser divididos em dois tipos: forças de curto alcance, também chamadas de forças de valência ou forças químicas, e forças de longo alcance, denominadas de forças de van der Waals. As forças de valência são forças repulsivas e surgem quando as partículas se aproximam uma das outras e suas nuvens eletrônicas se superpõem. As forças de van der Waals são forças atrativas de longo alcance e podem ser subdivididas em: (i) contribuições eletrostáticas (interações entre os vários momentos de multipolo); (ii) contribuições de indução (interação entre a distribuição de carga de uma partícula e os momentos induzidos na outra partícula); (iii) contribuições de dispersão (interação entre duas distribuições de cargas induzidas).

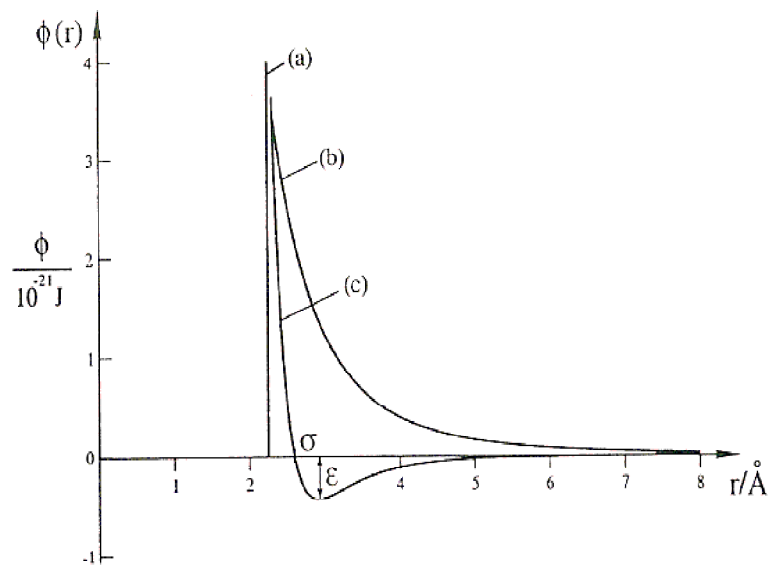


Figura 3.5: Potenciais de interação : (a) esfera-rígida; (b) centros de repulsão; (c) Lennard-Jones

Na figura (3.5)⁸ estão representados os potenciais de interação [27] mais utilizados na teoria cinética dos gases em função da distância entre as partículas e que são: a) *Potencial de Esfera-Rígida*. Este potencial representa somente as forças de repulsão entre esferas rígidas de diâmetro a

$$\begin{cases} \Phi(r) = \infty & \text{quando } r < a, \\ \Phi(r) = 0 & \text{quando } r > a. \end{cases} \quad (3.42)$$

b) *Potencial de Centros de Repulsão*. A função potencial neste modelo tem a forma

$$\Phi(r) = \frac{\kappa}{\nu - 1} \frac{1}{r^{\nu-1}}, \quad \kappa > 0, \quad \nu > 0, \quad (3.43)$$

⁸Fonte: Kremer, 2003.

e também representa somente as forças de repulsão. Denomina-se de potencial maxwelliano o caso em que $\nu = 5$ e as partículas, que obedecem a este potencial, são chamadas de partículas maxwellianas.

c) *Potencial de Lennard-Jones*. A função potencial deste modelo fornece uma representação simples e realística para partículas esféricas e não-polares através da forma

$$\Phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]. \quad (3.44)$$

O termo $(\sigma/r)^{12}$ representa as forças de repulsão enquanto que o termo $-(\sigma/r)^6$ as forças de atração. Para $r = \sigma$ tem-se $\Phi(r) = 0$ e para $r = 2^{1/6}\sigma$ tem-se $\Phi(r) = -\epsilon$ onde ϵ é a profundidade do poço potencial e σ representa o diâmetro característico das moléculas.

Neste trabalho serão considerados dois potenciais de interação: esfera-rígida e um potencial realístico⁹ de interação. O modelo de esfera-rígida é muito utilizado devido a sua simplicidade enquanto que o potencial realístico fornece uma descrição mais física de interação entre as partículas. No algoritmo deste trabalho os diâmetros das espécies dos constituintes das misturas consideradas são parâmetros de entrada e dependem do potencial de interação entre as partículas. Para o caso dos potenciais, esfera-rígida e realístico, os valores são tabelados em [24].

⁹O potencial realístico é um potencial empírico cuja formulação encontra-se na referência [24].

Capítulo 4

Solução Cinética para Misturas Binárias de Gases Monoatômicos

Será considerado uma mistura binária de gases ideais monoatômicos confinada entre duas placas paralelas, sendo D a distância entre elas, infinitamente longa¹ de forma que os efeitos de borda podem ser desprezados. Não há presença de forças externas e o fluxo² é estacionário.

Será calculado a velocidade, o fluxo de calor e o tensor tensão para três misturas binárias: Neônio e Argônio; Hélio e Argônio; e Hélio e Xenônio, dentro de um amplo intervalo do parâmetro de rarefação. Os gases nobres Neônio, Argônio, Hélio e Xenônio apresentam pesos moleculares iguais à 20,18, 39,95, 4,00 e 131,30 respectivamente. As misturas Neônio e Argônio, Hélio e Argônio e Hélio e Xenônio possuem razões de massas $\frac{m_1}{m_2}$ bem distintas 0,505, 0,100, 0,030, sendo este o motivo da escolha destas misturas, e razão de diâmetros $\frac{d_2}{d_1}$ de 1,406, 1,665 e 2,226, [24] respectivamente. Será considerado três concentrações 10%, 50% e 90% em relação ao primeiro constituinte. Os constituintes serão denotados por sub-índices 1 e 2. Os potenciais de interação utilizados são: esfera-rígida e potencial realístico.

4.1 Considerações Específicas do Problema

Define-se algumas quantidades que serão utilizadas na mistura binária.

A densidade n do número de partículas da mistura binária, entre as placas, será função da densidade do número de partículas de cada constituinte da mistura

$$n = n_1 + n_2. \quad (4.1)$$

¹A distância D entre as placas é muito menor do que o comprimento das mesmas.

²Volume de fluido que passa através da seção transversal de um tubo por unidade de tempo.

A temperatura da mistura será igual a

$$T = \frac{\sum_{\alpha=1}^2 n_{\alpha} T_{\alpha}}{\sum_{\alpha=1}^2 n_{\alpha}} = \frac{n_1 T_1 + n_2 T_2}{n_1 + n_2}, \quad (4.2)$$

e a concentração molar C_0 a mistura em equilíbrio poderá ser escrita como a razão entre a densidade do número de partículas do constituinte $\alpha = 1$ e a densidade do número de partículas da mistura binária

$$C_0 = \frac{n_1}{n}, \quad (4.3)$$

ou ainda,

$$\frac{n_2}{n} = \frac{n - n_1}{n} = 1 - C_0, \quad (4.4)$$

oude

$$n_1 = n_{01} = C_0 n_0, \quad (4.5)$$

e de forma análoga

$$n_2 = n_{02} = (1 - C_0) n_0. \quad (4.6)$$

As expressões (4.5) e (4.6) indicam que a densidade dos constituintes não sofre perturbação pois n_{01} e n_{02} representam as distribuições da densidade do número de partículas entre as placas. Inicialmente a mistura encontra-se em equilíbrio e as placas estão em repouso. Será considerado a situação em que o estado de equilíbrio é fracamente perturbado quando as placas são movidas com velocidade U em sentidos opostos. Assim a perturbação na velocidade será denotada por $\frac{U}{v_0}$, onde $\frac{U}{v_0} \ll 1$ pois $U \ll v_0$ onde U é a velocidade da placa e v_0 a velocidade da mistura.

A temperatura do constituinte $\alpha = 1$ é igual a temperatura de equilíbrio do sistema T_0 , acrescida de uma perturbação,

$$T_1 = T_0 \left(1 + \tau_1 \frac{U}{v_0} \right). \quad (4.7)$$

De uma mesma forma para $\alpha = 2$

$$T_2 = T_0 \left(1 + \tau_2 \frac{U}{v_0} \right), \quad (4.8)$$

onde τ_1, τ_2 representam os desvios relativos as temperaturas dos constituintes. Substituí-se (4.5)-(4.8) em (4.2) como se segue:

$$T = \frac{C_0 n_0 T_0 \left(1 + \tau_1 \frac{U}{v_0} \right) + (1 - C_0) n_0 T_0 \left(1 + \tau_2 \frac{U}{v_0} \right)}{C_0 n_0 + (1 - C_0) n_0}, \quad (4.9)$$

e efetuando as multiplicações e desprezando os termos de ordem igual ou superior a 2 de $\frac{U}{v_0}$, a equação (4.9) se transformará em:

$$T = T_0 \left[1 + C_0 \tau_1 \frac{U}{v_0} + (1 - C_0) \tau_2 \frac{U}{v_0} \right]. \quad (4.10)$$

A densidade de massa da mistura binária, será função da densidade de massa de cada constituinte da mistura

$$\varrho = \varrho_1 + \varrho_2.$$

Da mesma forma para o tensor tensão e o fluxo de calor.

4.2 Modelo Cinético de McCormack

O modelo cinético proposto por McCormack [36] representa $\hat{L}_{\alpha\beta}h$ como uma expansão num polinômio da velocidade adimensional c_α

$$\hat{L}_{\alpha\beta}h = -\gamma_{\alpha\beta}h_\alpha + A + A_k c_{\alpha k} + B_{kl} c_{\alpha k} c_{\alpha l} + D_k c_{\alpha k} c_\alpha^2, \quad (4.11)$$

onde os coeficientes denotados por A, A_k, B_{kl} e D_k são funções dos momentos da função de distribuição das velocidades moleculares (densidade, velocidade hidrodinâmica, temperatura, tensor tensão e vetor fluxo de calor).

Considerando uma mistura binária, confinada entre duas placas paralelas, com velocidades relativas sujeitas a uma mesma temperatura, tem-se

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\alpha\beta}h = & -\gamma_{\alpha\beta}h_\alpha + 2 \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[\gamma_{\alpha\beta} u_\alpha - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} (u_\alpha - u_\beta) - \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(2)}}{2} \left(q_\alpha - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta \right) \right] c_{\alpha x} \\ & + 4 [(\gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_\beta] c_{\alpha x} c_{\alpha y} + \frac{4}{5} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[(\gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}) q_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_\beta \right. \\ & \left. - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_\alpha - u_\beta) \right] c_{\alpha x} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right), \quad \alpha, \beta = 1, 2, \end{aligned} \quad (4.12)$$

e as quantidades $\nu_{\alpha\beta}^{(N)}$, que representam a frequência de colisões entre os constituintes α e β , são definidas como:

$$\nu_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} n_\beta \Omega_{\alpha\beta}^{(11)}, \quad (4.13)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \right)^2 n_\beta \left(\Omega_{\alpha\beta}^{(12)} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} \right), \quad (4.14)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \frac{m_{\alpha\beta}^2}{m_\alpha m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} + \frac{m_\beta}{m_\alpha} \Omega_{\alpha\beta}^{(22)} \right), \quad (4.15)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \frac{m_{\alpha\beta}^2}{m_\alpha m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3} \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} - \Omega_{\alpha\beta}^{(22)} \right), \quad (4.16)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left[\Omega_{\alpha\beta}^{(22)} + \left(\frac{15}{4} \frac{m_\alpha}{m_\beta} + \frac{25}{8} \frac{m_\beta}{m_\alpha} \right) \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} - \frac{1}{2} \frac{m_\beta}{m_\alpha} (5\Omega_{\alpha\beta}^{(12)} - \Omega_{\alpha\beta}^{(13)}) \right], \quad (4.17)$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \right)^3 \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta} \right)^{3/2} n_\beta \left(-\Omega_{\alpha\beta}^{(22)} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{(12)} + \frac{1}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{(13)} \right), \quad (4.18)$$

onde $m_{\alpha\beta}$ denota a massa reduzida

$$m_{\alpha\beta} = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \quad (4.19)$$

e $\Omega_{\alpha\beta}^{(ij)}$ são as integrais de Chapman-Cowling [15], conforme equação (3.21), as quais dependem do potencial de interação intermolecular os quais, os utilizados neste trabalho estão descritos na seção 3.3. As integrais de Chapman-Cowling, em termos dos diâmetros moleculares, são definidas da forma

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(ij)} = \frac{(j+i)!}{8} \left[1 - \frac{1+(-1)^j}{2(i+1)} \right] \left(\frac{\pi kT}{2m_{\alpha\beta}} \right)^{1/2} (d_\alpha + d_\beta)^2, \quad (4.20)$$

onde d_α e d_β são diâmetros moleculares dos constituintes α e β , respectivamente.

Os parâmetros $\gamma_{\alpha\beta}$ são proporcionais as freqüência de colisões entre os constituintes α e β e estão definidos em [18, 42, 44, 45, 46].

Os momentos adimensionais da função de distribuição são escritos [22] do seguinte modo:

$$u_\alpha(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} \int \exp(-c_\alpha^2) h_\alpha(y, \mathbf{c}_\alpha) c_{\alpha x} d\mathbf{c}_\alpha, \quad (4.21)$$

$$q_\alpha(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} \int \exp(-c_\alpha^2) h_\alpha(y, \mathbf{c}_\alpha) c_{\alpha x} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (4.22)$$

$$\Pi_\alpha(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int \exp(-c_\alpha^2) h_\alpha(y, \mathbf{c}_\alpha) c_{\alpha x} c_{\alpha y} d\mathbf{c}_\alpha, \quad (4.23)$$

onde u_β , q_β e Π_β são semelhantes as equações (4.21), (4.22), (4.23), respectivamente bastando trocar α por β .

Então o problema a ser resolvido é

$$c_{\alpha y} \frac{\partial h_\alpha}{\partial y} = D \left(\frac{m_\alpha}{2kT_0} \right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^2 \hat{L}_{\alpha\beta} h \quad (\alpha = 1, 2) \quad (4.24)$$

onde $\hat{L}_{\alpha\beta} h$ é dada pela equação (4.12). As condições de contorno para a perturbação h_α da equação (4.24) são dadas por:

para $y = \frac{D}{2}$ tem-se $h_\alpha\left(\frac{D}{2}, \mathbf{c}_\alpha\right) = \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} c_{\alpha x}$, para $c_{\alpha y} \leq 0$

e quando

$y = -\frac{D}{2}$ tem-se $h_\alpha\left(-\frac{D}{2}, \mathbf{c}_\alpha\right) = -\left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} c_{\alpha x}$ para $c_{\alpha y} \leq 0$,

ou de forma compacta

$$h_\alpha(y, \mathbf{c}_\alpha) = h_\alpha\left(\pm \frac{D}{2}, \mathbf{c}_\alpha\right) = \pm \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} c_{\alpha x} \quad \text{para} \quad c_{\alpha y} \leq 0. \quad (4.25)$$

4.3 Método de Solução

A equação (4.24) é função das componentes da velocidade adimensional $c_{\alpha i} = (c_{\alpha x}, c_{\alpha y}, c_{\alpha z})$. Como a solução independe das coordenadas x e z para eliminar as variáveis $c_{\alpha x}$ e $c_{\alpha z}$ da equação (4.24) duas funções são introduzidas:

$$\Phi_\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] h_\alpha c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z}, \quad (4.26)$$

$$\Psi_\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] h_\alpha c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z}. \quad (4.27)$$

Portanto para se escrever a equação (4.24) em função de Φ_α deve-se multiplicá-la pelo fator $\frac{c_{\alpha x} e^{-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)}}{\pi}$ e depois integrá-la em todo o intervalo, ou seja,

$$\begin{aligned} & c_{\alpha y} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] h_\alpha c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \\ &= D\beta_{0\alpha} \left\{ -\gamma_{\alpha\beta} \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] h_\alpha c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right. \\ &+ 2 \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} \left[\gamma_{\alpha\beta} u_\alpha \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] c_{\alpha x}^2 dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right. \\ &\quad \left. - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} (u_\alpha - u_\beta) \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] c_{\alpha x}^2 dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(2)}}{2} \left(q_\alpha - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta \right) \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] c_{\alpha x}^2 dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right] \\ &+ 4(\gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_\alpha \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \\ &\quad \left. + 4\nu_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_\beta \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{4}{5} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[(\gamma_{\alpha\beta} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}) q_\alpha \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \times c_{\alpha x}^2 \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right. \\
& + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_\beta \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] c_{\alpha x}^2 \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \\
& \left. - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_\alpha - u_\beta) \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] c_{\alpha x}^2 \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right] \Bigg\}, \quad (4.28)
\end{aligned}$$

considerando $\beta_{0\alpha}$ dado na seção 3.4.

Utilizando as seguintes integrais³

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] h_\alpha c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} = \Phi_\alpha, \\
& \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] c_{\alpha x}^2 dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} = \frac{1}{2}, \\
& \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] c_{\alpha x}^2 \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} = \left(\frac{c_{\alpha y}^2}{2} - \frac{1}{4} \right), \quad (4.29)
\end{aligned}$$

a equação (4.28) se transforma em

$$\begin{aligned}
c_{\alpha y} \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial y} = D\beta_{0\alpha} \Bigg\{ & -\gamma_{\alpha\beta} \Phi_\alpha + \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left(\gamma_{\alpha\beta} u_\alpha - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} (u_\alpha - u_\beta) - \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(2)}}{2} \left(q_\alpha - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta \right) \right) \\
& + 2 \left((\gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_\beta \right) c_{\alpha y} \\
& + \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[\frac{4}{5} \left((\gamma_{\alpha\beta} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}) q_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_\beta \right) \right. \\
& \quad \left. - \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_\alpha - u_\beta) \right] \frac{1}{2} \left(c_{\alpha y}^2 - \frac{1}{2} \right) \Bigg\}. \quad (4.30)
\end{aligned}$$

³Na integração utiliza-se a seguinte fórmula

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \Gamma \left(\frac{n+1}{2} \right) \left(\frac{1}{\alpha} \right)^{\frac{n+1}{2}}$$

onde α é uma constante e Γ é a função gama definida por

$$\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$$

$$\Gamma(n+1) = n! \text{ se } n \text{ é inteiro}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \text{ e } \Gamma(1) = 1.$$

Seguindo o mesmo procedimento, multiplica-se a equação (4.24) pelo fator $\frac{c_{\alpha x}[c_{\alpha x}^2+c_{\alpha z}^2-2]e^{-(c_{\alpha x}^2+c_{\alpha z}^2)}}{\pi}$ e integra-se a equação resultante em relação a $dc_{\alpha x}$ e $dc_{\alpha z}$

$$\begin{aligned}
& c_{\alpha y} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] h_{\alpha} c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \\
&= D\beta_{0\alpha} \left\{ -\gamma_{\alpha\beta} \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] h_{\alpha} c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right. \\
&\quad + 2 \left(\frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left[\gamma_{\alpha\beta} u_{\alpha} \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] \right. \right. \\
&\quad \quad \quad \left. \left. \times c_{\alpha x}^2 dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right. \\
&\quad - \nu_{\alpha\beta}^{(1)} (u_{\alpha} - u_{\beta}) \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] c_{\alpha x}^2 dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \\
&\quad \left. - \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(2)}}{2} \left(q_{\alpha} - \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} q_{\beta} \right) \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] c_{\alpha x}^2 dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right\} \\
&\quad + 4(\gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha} \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] \right. \\
&\quad \quad \quad \left. \times c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \\
&\quad + 4\nu_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_{\beta} \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] c_{\alpha x}^2 c_{\alpha y} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \\
&\quad + \frac{4}{5} \left(\frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left[(\gamma_{\alpha\beta} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}) q_{\alpha} \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] \right. \right. \\
&\quad \quad \quad \left. \left. \times [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] c_{\alpha x}^2 \left(c_{\alpha}^2 - \frac{5}{2} \right) dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right. \\
&\quad \left. + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \left(\frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}} \right)^{1/2} q_{\beta} \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] c_{\alpha x}^2 \left(c_{\alpha}^2 - \frac{5}{2} \right) dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right. \\
&\quad \left. - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_{\alpha} - u_{\beta}) \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] c_{\alpha x}^2 \left(c_{\alpha}^2 - \frac{5}{2} \right) dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} \right] \right\}. \tag{4.31}
\end{aligned}$$

As integrais

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] h_{\alpha} c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} = \Psi_{\alpha},$$

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] c_{\alpha x}^2 dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} = 0,$$

e

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)] [c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2] c_{\alpha x}^2 \left(c_{\alpha x}^2 - \frac{5}{2} \right) dc_{\alpha x} dc_{\alpha z} = 1, \quad (4.32)$$

transformam a equação (4.31) em

$$c_{\alpha y} \frac{\partial \Psi_{\alpha}}{\partial y} = D\beta_{0\alpha} \left\{ -\gamma_{\alpha\beta} \Psi_{\alpha} + \left(\frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left[\frac{4}{5} \left[[\gamma_{\alpha\beta} + \nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}] q_{\alpha} + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \left(\frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}} \right)^{1/2} q_{\beta} \right] - \nu_{\alpha\beta}^{(2)} (u_{\alpha} - u_{\beta}) \right] \right\}. \quad (4.33)$$

Assim, resumidamente, transformou-se a equação (4.24) em um sistema de equações para Φ_{α} e Ψ_{α} que são (4.30) e (4.33).

O parâmetro $\gamma_{\alpha\beta}$, nas equações (4.30) e (4.33), é proporcional a frequência de colisão entre os constituintes α e β [11]. Este parâmetro $\gamma_{\alpha\beta}$ aparece somente nas combinações

$$\gamma_1 = \gamma_{11} + \gamma_{12} \quad \gamma_2 = \gamma_{21} + \gamma_{22}. \quad (4.34)$$

Portanto, é suficiente definir γ_1 e γ_2 . Para este modelo de parâmetro, conforme o artigo [11], tem-se a expressão $\gamma_{\alpha} = \frac{P_{\alpha}}{\mu_{\alpha}}$ com P_{α} e μ_{α} representando a pressão parcial e a viscosidade parcial. Estas são dadas por

$$\mu_{\alpha} = P_{\alpha} (\Psi_{\beta} + \nu_{\alpha\beta}^{(4)}) (\Psi_{\alpha} \Psi_{\beta} - \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \nu_{\beta\alpha}^{(4)}), \quad (4.35)$$

com

$$\mu = \mu_1 + \mu_2, \quad (4.36)$$

$$\Psi_{\alpha} = \nu_{\alpha\alpha}^{(3)} - \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} + \nu_{\alpha\beta}^{(3)} \quad (4.37)$$

e $\nu_{\alpha\beta}^{(3)}$, $\nu_{\alpha\beta}^{(4)}$ dados por (4.15) e (4.16), respectivamente.

É utilizado com maior frequência o parâmetro de rarefação do constituinte α da mistura definido por,

$$\delta_{\alpha} = D \left(\frac{m_{\alpha}}{2kT_0} \right)^{1/2} \gamma_{\alpha}. \quad (4.38)$$

Assim pode-se representar as equações (4.30) e (4.33) em termos deste parâmetro, ou seja

$$c_{\alpha y} \frac{\partial \Phi_{\alpha}}{\partial y} = \delta_{\alpha} \left\{ -\Phi_{\alpha} + \left(\frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left(u_{\alpha} - \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(1)}}{\gamma_{\alpha\beta}} (u_{\alpha} - u_{\beta}) - \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(2)}}{2\gamma_{\alpha\beta}} \left(q_{\alpha} - \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} q_{\beta} \right) \right) \right. \\ \left. + 2 \left(\left(1 - \frac{\nu_{\alpha\alpha}^{(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{(4)} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)}}{\gamma_{\alpha\beta}} \right) \Pi_{\alpha} + \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(4)}}{\gamma_{\alpha\beta}} \Pi_{\beta} \right) c_{\alpha y} \right\}$$

$$+ \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} \left[\frac{4}{5} \left(\left(1 + \frac{\nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}}{\gamma_{\alpha\beta}} \right) q_\alpha + \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(6)}}{\gamma_{\alpha\beta}} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha}\right)^{1/2} q_\beta \right) - \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(2)}}{\gamma_{\alpha\beta}} (u_\alpha - u_\beta) \right] \frac{1}{2} \left(c_{\alpha y}^2 - \frac{1}{2} \right), \quad (4.39)$$

$$c_{\alpha y} \frac{\partial \Psi_\alpha}{\partial y} = \delta_\alpha \left\{ -\Psi_\alpha + \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} \left[\frac{4}{5} \left[\left[1 + \frac{\nu_{\alpha\alpha}^{(6)} - \nu_{\alpha\alpha}^{(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}}{\gamma_{\alpha\beta}} \right] q_\alpha + \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(6)}}{\gamma_{\alpha\beta}} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha}\right)^{1/2} q_\beta \right] - \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(2)}}{\gamma_{\alpha\beta}} (u_\alpha - u_\beta) \right] \right\}. \quad (4.40)$$

Nas equações (4.39) e (4.40) os momentos adimensionais da função de distribuição u_α , u_β , q_α , q_β , Π_α e Π_β são descritos nas equações (4.21)-(4.23) e representam as incógnitas. Estes momentos podem ser escritos em função de Φ_α e Ψ_α . Tal procedimento é descrito abaixo:

i) Para $u_\alpha(y)$,

$$\begin{aligned} u_\alpha(y) &= \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\frac{m}{m_\alpha}\right)^{1/2} \int e^{-c_\alpha^2} h_\alpha(y, \mathbf{c}_\alpha) c_{\alpha x} d\mathbf{c}_\alpha \\ &= \frac{1}{\pi^{1/2}} \left(\frac{m}{m_\alpha}\right)^{1/2} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)} h_\alpha c_{\alpha x} d c_{\alpha x} d c_{\alpha z} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-c_{\alpha y}^2} d c_{\alpha y} \end{aligned}$$

e usando (4.26) obtém-se

$$u_\alpha(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{m_\alpha}\right)^{1/2} \int e^{-c_{\alpha y}^2} \Phi_\alpha d c_{\alpha y}. \quad (4.41)$$

ii) Para $q_\alpha(y)$

$$\begin{aligned} q_\alpha(y) &= \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\frac{m}{m_\alpha}\right)^{1/2} \int e^{-c_\alpha^2} h_\alpha(y, \mathbf{c}_\alpha) c_{\alpha x} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) d\mathbf{c}_\alpha \\ &= \frac{1}{\pi^{1/2}} \left(\frac{m}{m_\alpha}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)} h_\alpha c_{\alpha x} (c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2) d c_{\alpha x} d c_{\alpha z} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)} h_\alpha c_{\alpha x} d c_{\alpha x} d c_{\alpha z} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(c_{\alpha y}^2 - \frac{1}{2} \right) e^{-c_{\alpha y}^2} d c_{\alpha y}, \end{aligned}$$

com (4.26) e (4.27) vem

$$q_\alpha(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{m_\alpha}\right)^{1/2} \int \left[\Psi_\alpha + \Phi_\alpha \left(c_{\alpha y}^2 - \frac{1}{2} \right) \right] e^{-c_{\alpha y}^2} d c_{\alpha y}. \quad (4.42)$$

iii) Com o mesmo procedimento encontra-se $\Pi_\alpha(y)$

$$\Pi_\alpha(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int e^{-c_\alpha^2} h_\alpha(y, \mathbf{c}_\alpha) c_{\alpha x} c_{\alpha y} d\mathbf{c}_\alpha$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\pi^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\pi} \left(e^{-(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2)} h_{\alpha} c_{\alpha x} d c_{\alpha x} d c_{\alpha z} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} c_{\alpha y} e^{-c_{\alpha y}^2} d c_{\alpha y} \\
\Pi_{\alpha}(y) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int e^{-c_{\alpha y}^2} c_{\alpha y} \Phi_{\alpha} d c_{\alpha y}, \tag{4.43}
\end{aligned}$$

onde u_{β} , q_{β} e Π_{β} são semelhantes as equações (4.41), (4.42), (4.43), respectivamente bastando trocar α por β .

O objetivo agora é resolver este sistema de equações íntegro-diferenciais (4.39) e (4.40) nas quais utilizando (4.25) em (4.26)-(4.27), se obtém as respectivas condições de contorno. Este sistema de equações pode ser reduzido à um sistema de equações de integrais para os momentos da função de distribuição. Entretanto, este método requer um grande tempo computacional, especialmente para grandes valores do parâmetro de rarefação δ , que é o inverso do número de Knudsen K_n . Este é um dos motivos pelos quais deve-se usar o método das velocidades discretas [25, 39].

4.4 Resultados e Discussões

O parâmetro δ_{α} presente nas equações (4.39) e (4.40), corresponde ao parâmetro de rarefação do constituinte α da mistura. No programa numérico⁴ utiliza-se o parâmetro de rarefação da mistura⁵, denotado por δ , como um parâmetro de entrada. Conseqüentemente, é necessário estabelecer uma relação entre os parâmetros de rarefação da mistura e dos constituintes. Esta relação [11, 43] é dada por

$$\delta_{\alpha} = \frac{\mu}{\mu_{\alpha}} \frac{P_{\alpha}}{P} \left(\frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \delta, \tag{4.44}$$

onde μ e μ_{α} denotam, respectivamente, a viscosidade da mistura e a viscosidade parcial, cujas expressões são dadas em [42].

O sistema de equações cinéticas (4.39) e (4.40) foram resolvidas numericamente para um amplo intervalo do parâmetro de rarefação δ , pelo método das velocidades discretas [25, 39] com um erro numérico relativo⁶ menor que 0,1%. A precisão numérica foi estimada comparando os resultados obtidos para diferentes grades dos parâmetros, ou seja, utilizou-se uma malha adequada. Os valores considerados para o parâmetro de rarefação δ variam de $0,01 \leq \delta \leq 40$. Deve-se ressaltar que este intervalo abrange o regime de moléculas livres para $\delta \rightarrow 0$ (especificando o intervalo $0,01 \leq \delta < 1$), o regime de transição $\delta \simeq 1$ e o regime hidrodinâmico para $\delta \rightarrow \infty$ (especificando o intervalo $\delta \geq 40$). Portanto o maior valor considerado para δ é 40, o qual já representa com certeza o regime hidrodinâmico. Valores maiores do que 40 não serão considerados devido ao tempo de execução do programa numérico. Estas mesmas considerações existirão no capítulo 5 e nas conclusões deste trabalho.

⁴O programa numérico encontra-se no Apêndice B.

⁵O parâmetro de rarefação δ é o inverso do número de Knudsen, $\delta = \frac{D P_0}{\mu v_0}$, que está definido na seção 5.2.

⁶Este erro é calculado após a convergência do programa estabelecendo a diferença entre duas iterações não sucessivas.

Quanto maior o valor de δ maior é o tempo para se atingir a convergência do programa numérico. Conforme aumentava o parâmetro de rarefação o tempo de rodagem do programa cresce de forma não linear. Uma maneira de amenizar este problema é se utilizar supercomputadores para a rodagem dos programas no caso de grandes valores do parâmetro de rarefação.

Para investigar a influência da lei de interação intermolecular no tensor tensão e nos demais campos da velocidade e do fluxo de calor, dois tipos de potenciais foram usados: o potencial de esfera-rígida e o potencial realístico.

Quando trata-se do potencial de esfera-rígida, para calcular os diâmetros moleculares d_α , utiliza-se a seguinte razão entre suas massas e viscosidades

$$\frac{d_2}{d_1} = \left(\frac{\mu_1}{\mu_2} \right)^{1/2} \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^{1/4}. \quad (4.45)$$

Estas viscosidades são obtidas experimentalmente à uma temperatura de $T=300\text{K}$ [24].

Estes diâmetros d_α aparecem nas integrais de Chapman-Cowling definidas pela equação (4.20).

Como resultado destes dados obtém-se os valores da razão $\frac{d_2}{d_1}$ como 1,406, 1,665 e 2,226 para as misturas Nêonio e Argônio (Ne-Ar), Hélio e Argônio (He-Ar) e Hélio e Xenônio (He-Xe), respectivamente.

Pode-se expressar a razão entre os parâmetros de rarefação dos constituintes utilizando-se a equação (4.44) obtendo

$$\frac{\delta_1}{\delta_2} = \frac{\mu_1 P_1}{\mu_2 P_2} \left(\frac{m_1}{m_2} \right)^{1/2}, \quad (4.46)$$

em termos das viscosidades parciais, das pressões e das massas de cada constituinte. Usando a expressão $P_\alpha = n_\alpha k T_\alpha$ e as equações (4.7),(4.8) e (4.45) obtém-se a razão entre os parâmetros de rarefação dos constituintes em função das densidades e dos diâmetros, isto é,

$$\frac{\delta_1}{\delta_2} = \frac{n_1}{n_2} \left(\frac{d_1}{d_2} \right)^2. \quad (4.47)$$

Os valores dos parâmetros de rarefação dos constituintes, δ_1 e δ_2 , fornecido o parâmetro de rarefação da mistura, δ , são apresentados nas tabelas (4.1), (4.2) e (4.3) para as concentrações 0,1, 0,5 e 0,9, respectivamente. Observa-se que para $0,01 \leq \delta < 1$ os constituintes encontram-se no regime de moléculas livres. Para $\delta \simeq 1$ tem-se duas situações: os constituintes encontram-se no regime de moléculas livres ou um deles encontra-se no regime de transição e o outro no regime de moléculas livres. Para $\delta \rightarrow \infty$ ambos se encontram no regime hidrodinâmico.

Para o potencial realístico as integrais $\Omega_{\alpha\beta}^{(ij)}$ foram calculadas usando as expressões dadas na referência [24] assumindo a mesma temperatura do potencial de esfera-rígida, isto é $T = 300\text{K}$. Os coeficientes de transporte de misturas, isto é, viscosidade, condutividade térmica, coeficiente de difusão e coeficiente de difusão térmica, são calculados segundo as integrais de Chapman-Cowling [19, 24, 42].

Kestin et al [24] obtiveram a expressão analítica das integrais $\Omega_{\alpha\beta}^{(ij)}$, a qual fornece valores experimentais de todos os coeficientes de transporte.

Todos os cálculos foram feitos para um amplo intervalo do parâmetro de rarefação δ , isto é 0,01 à 40. Foram considerados três valores de concentração C_0 , isto é, 10%, 50% e 90%, em relação ao primeiro constituinte da mistura.

Os resultados numéricos do tensor tensão Π da mistura são fornecidos nas tabelas (4.4)-(4.5) para o potencial realístico e potencial de esfera-rígida, respectivamente. Da análise numérica destes valores concluí-se que:

- i) O tensor tensão Π da mistura sempre decresce com o aumento do parâmetro de rarefação δ . Este resultado era esperado, pois tem-se este mesmo comportamento para o caso de gás único.
- ii) A dependência do tensor tensão Π da mistura na concentração C_0 é forte para a mistura com menor razão de massa molecular, onde a diferença entre o tensor tensão da mistura entre as concentrações $C_0 = 0,1$ e $C_0 = 0,9$ pode passar de 25%, enquanto que para a mistura Ne-Ar este desvio não excede 5,3%.
- iii) O tensor tensão é fracamente sensível a lei de interação intermolecular. A diferença entre os valores de Π da mistura que correspondem ao potencial realístico e àqueles para o potencial de esfera-rígida não excedem 1%. Os dados do tensor tensão de cada constituinte, Π_1 e Π_2 , para a mistura binária He-Xe são apresentadas nas tabelas (4.6)-(4.7) para o potencial realístico e o de esfera-rígida, respectivamente. Pode-se observar que o constituinte de maior massa tem um tensor tensão maior e a medida que o parâmetro de rarefação cresce o tensor tensão de cada constituinte decresce. Então Π_α diminui com o aumento de δ e o gás mais pesado apresenta maior Π_α pois o transporte é maior e é proporcional a massa.

Quanto a velocidade de cada constituinte e da mistura concluí-se que:

- i) O perfil da velocidade de cada constituinte, isto é, u_1 e u_2 , são praticamente funções lineares de coordenada y . Assim, é suficiente analisar somente a velocidade perto do plano superior, isto é em $y = 1/2$. Neste ponto as velocidades variam de 0 para 1/2 quando o parâmetro de rarefação δ varia de 0 para ∞ , pois as placas foram movidas com uma velocidade relativa de $U/2$. Os valores da velocidade de cada constituinte, perto do plano superior ($y = 1/2$), para a mistura He-Xe, são dadas na tabela (4.8) para o potencial realístico. Pode ser visto que para $C_0 = 0,1$ e $0,5$, o constituinte de massa menor tem uma velocidade menor. Em $C_0 = 0,9$ as velocidades dos constituintes são praticamente iguais. Este mesmo comportamento observa-se para as outras duas misturas Ne-Ar e He-Ar conforme as tabelas (4.9)-(4.10).

- ii) Nas tabelas (4.11) e (4.12) tem-se os valores da velocidade V das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe para o potencial realístico e esfera-rígida, respectivamente, em função de y , onde esta obedece a mesma forma das equações (3.38)-(3.41).

Para $n = 2$, a velocidade dimensional da mistura é $V' = \sum_{i=1}^2 u_{\alpha}$, que adimensionalmente é dada por $V = \frac{m_1 u_1 + m_2 u_2}{m_1 + m_2}$. Esta velocidade V é tomada como a média ponderada entre as velocidades u_1 e u_2 que são grandezas adimensionais dada pela equação (4.41).

- iii) As placas foram movidas com uma velocidade relativa de $U/2$. Em $y = 0$, $u_1 = u_2 = 0$ e a velocidade da mistura é nula.
- iv) O perfil da velocidade V da mistura é linear e simétrico em relação a origem conforme as figuras (4.1) e (4.3), independente do parâmetro de rarefação e concentração utilizados. Assim, basta analisar os dados apenas entre uma das seguintes razões, $-\frac{D}{2} \leq y \leq 0$ ou $0 \leq y \leq \frac{D}{2}$. As figuras (4.2) e (4.4) são ampliações dos valores da velocidade V da mistura quando y está próximo de zero. Percebe-se que as retas referentes as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe são coincidentes.
- v) Nota-se também que para o perfil da velocidade positiva, as partículas que se encontram mais próximas das placas apresenta uma velocidade maior enquanto que esta velocidade vai diminuindo chegando a zero no ponto $y = 0$. Este é um comportamento que está de acordo com os resultados para gás único.
- vi) Para as três misturas de gases consideradas observa-se que para $C_0 = 0, 1$ a velocidade da mistura para o potencial esfera-rígida é maior do que para o potencial realístico, considerando-se qualquer valor do parâmetro de rarefação, isto não acontece para as concentrações $C_0 = 0, 5$ e $0,9$.

O fluxo de calor para cada constituinte das misturas consideradas são apresentadas nas tabelas (4.13) e (4.14) para os potenciais realístico e de esfera-rígida. Pode-se observar que:

- i) O fluxo de calor de cada constituinte é amplamente variável conforme tem-se o aumento do parâmetro de rarefação, não obedecendo a uma regra específica.
- ii) Para o caso esfera-rígida e parâmetro de rarefação igual à 0,01 tem-se a menor diferença entre q_1 e q_2 e a maior diferença é apresentada para $\delta = 40$.

Tabela 4.1: Análise de δ_1 e δ_2 para misturas binárias e concentração $C_0 = 0,1$

δ	$C_0 = 0,1$					
	Ne - Ar		He - Ar		He - Xe	
	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2
0,01	0,0081	0,01	0,0076	0,0099	0,0059	0,0098
0,02	0,0162	0,02	0,0152	0,0198	0,0118	0,0196
0,04	0,0324	0,04	0,0304	0,0396	0,0236	0,0392
0,1	0,081	0,1	0,076	0,099	0,059	0,098
0,2	0,162	0,2	0,152	0,198	0,118	0,196
0,4	0,324	0,4	0,304	0,396	0,236	0,392
1	0,81	1	0,76	0,99	0,59	0,98
2	1,62	2	1,52	1,98	1,18	1,96
4	3,24	4	3,04	3,96	2,36	3,92
10	8,1	10	7,6	9,9	5,9	9,8
20	16,2	20	15,2	19,8	11,8	19,6
40	32,4	40	30,4	39,6	23,6	39,2

Tabela 4.2: Análise de δ_1 e δ_2 para misturas binárias e concentração $C_0 = 0,5$

δ	$C_0 = 0,5$					
	Ne - Ar		He - Ar		He - Xe	
	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2
0,01	0,0088	0,011	0,0078	0,0093	0,006	0,0087
0,02	0,0176	0,022	0,0156	0,0186	0,012	0,0174
0,04	0,0352	0,044	0,0312	0,0372	0,024	0,0348
0,1	0,088	0,11	0,078	0,093	0,06	0,087
0,2	0,176	0,22	0,156	0,186	0,12	0,174
0,4	0,352	0,44	0,312	0,372	0,24	0,348
1	0,88	1,1	0,78	0,93	0,6	0,87
2	1,76	2,2	1,56	1,86	1,2	1,74
4	3,52	4,4	3,12	3,72	2,4	3,48
10	8,8	11	7,8	9,3	6	8,7
20	17,6	22	15,6	18,6	12	17,4
40	32,2	44	31,2	37,2	24	34,8

Tabela 4.3: Análise de δ_1 e δ_2 para misturas binárias e concentração $C_0 = 0,9$

δ	$C_0 = 0,9$					
	Ne - Ar		He - Ar		He - Xe	
	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2
0,01	0,0097	0,012	0,0088	0,0089	0,0073	0,0071
0,02	0,0194	0,024	0,0176	0,0178	0,0146	0,0142
0,04	0,0388	0,048	0,0352	0,0356	0,0292	0,0284
0,1	0,097	0,11	0,088	0,089	0,073	0,071
0,2	0,194	0,24	0,176	0,178	0,146	0,142
0,4	0,388	0,48	0,352	0,356	0,292	0,294
1	0,97	1,2	0,88	0,89	0,73	0,71
2	1,94	2,4	1,76	1,78	1,46	1,42
4	3,88	4,8	3,52	3,56	2,92	2,84
10	9,7	12	8,8	8,9	7,3	7,1
20	19,4	24	17,6	17,8	14,6	14,2
40	38,8	48	35,2	35,6	29,2	28,4

Tabela 4.4: Tensor tensão Π da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , potencial realístico

δ	Π								
	Ne - Ar			He - Ar			He - Xe		
	$C_0 = 0,1$	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9
0,01	0,2784	0,2758	0,2778	0,2731	0,2482	0,2471	0,2700	0,2291	0,2019
0,02	0,2759	0,2735	0,2755	0,2708	0,2466	0,2453	0,2679	0,2275	0,2007
0,04	0,2712	0,2691	0,2712	0,2665	0,2431	0,2419	0,2637	0,2245	0,1984
0,1	0,2587	0,2576	0,2597	0,2550	0,2336	0,2326	0,2525	0,2162	0,1920
0,2	0,2412	0,2414	0,2435	0,2388	0,2201	0,2194	0,2368	0,2045	0,1827
0,4	0,2139	0,2160	0,2182	0,2134	0,1987	0,1984	0,2122	0,1856	0,1676
1	0,1629	0,1675	0,1696	0,1649	0,1566	0,1571	0,1648	0,1480	0,1365
2	0,1183	0,1239	0,1257	0,1215	0,1177	0,1185	0,1221	0,1125	0,1059
4	0,07725	0,08242	0,08377	0,08048	0,07957	0,08035	0,08128	0,07700	0,07406
10	0,03806	0,04139	0,04213	0,04023	0,04065	0,04119	0,04087	0,03994	0,03933
20	0,02064	0,02264	0,02306	0,02196	0,02242	0,02275	0,02237	0,02220	0,02211
40	0,01078	0,01188	0,01210	0,01150	0,01182	0,01201	0,01174	0,01176	0,01179

Tabela 4.5: Tensor tensão Π da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , potencial esfera-rígida

δ	Π								
	Ne - Ar			He - Ar			He - Xe		
	$C_0 = 0,1$	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9
0,01	0,2783	0,2758	0,2778	0,2731	0,2484	0,2471	0,2701	0,2292	0,2019
0,1	0,2583	0,2577	0,2598	0,2549	0,2336	0,2326	0,2525	0,2164	0,1919
1	0,1614	0,1678	0,1699	0,1643	0,1568	0,1572	0,1648	0,1485	0,1361
10	0,03742	0,04143	0,04230	0,03985	0,04067	0,04134	0,04075	0,04004	0,03935
40	0,01051	0,01188	0,01216	0,01138	0,01182	0,01206	0,01169	0,01177	0,01183

Tabela 4.6: Tensor tensão de cada constituinte para a mistura He-Xe, potencial realístico

δ	$C_0 = 0,1$		$C_0 = 0,5$		$C_0 = 0,9$	
	Π_1	Π_2	Π_1	Π_2	Π_1	Π_2
0,01	0,05157	0,2943	0,06826	0,3900	0,1371	0,7853
0,1	0,04943	0,2751	0,06540	0,3671	0,1303	0,7470
1	0,03649	0,1791	0,04827	0,2476	0,09243	0,5328
10	0,01028	0,04426	0,01411	0,06577	0,02653	0,1545
40	0,002852	0,01273	0,004073	0,01944	0,007932	0,04654

Tabela 4.7: Tensor tensão de cada constituinte para a mistura He-Xe, potencial esfera-rígida

δ	$C_0 = 0,1$		$C_0 = 0,5$		$C_0 = 0,9$	
	Π_1	Π_2	Π_1	Π_2	Π_1	Π_2
0,01	0,05137	0,2944	0,06808	0,03903	0,1370	0,7860
0,1	0,04787	0,2753	0,06391	0,3690	0,1295	0,7528
1	0,03072	0,1797	0,04259	0,2544	0,08941	0,5564
10	0,007130	0,04449	0,01092	0,06915	0,02492	0,1692
40	0,001652	0,01281	0,002895	0,02064	0,007407	0,05163

Tabela 4.8: Velocidade de cada constituinte na distância $y = \frac{1}{2}$ para a mistura He-Xe, potencial realístico

δ	$C_0 = 0,1$		$C_0 = 0,5$		$C_0 = 0,9$	
	u_1	u_2	u_1	u_2	u_1	u_2
0,01	0,007801	0,01230	0,007861	0,01108	0,009275	0,009269
0,1	0,05188	0,07228	0,05215	0,06690	0,05883	0,05852
1	0,2060	0,2509	0,2050	0,2382	0,2197	0,2175
10	0,4245	0,4407	0,4204	0,4331	0,4236	0,4219
40	0,4796	0,4829	0,4775	0,4802	0,4773	0,4765

Tabela 4.9: Velocidade de cada constituinte na distância $y = \frac{1}{2}$ para a mistura Ne-Ar, potencial realístico

δ	$C_0 = 0,1$		$C_0 = 0,5$		$C_0 = 0,9$	
	u_1	u_2	u_1	u_2	u_1	u_2
0,01	0,01126	0,01292	0,01107	0,01349	0,01198	0,01603
0,1	0,06747	0,07604	0,06676	0,07719	0,07075	0,08511
1	0,2427	0,2622	0,2400	0,2596	0,2476	0,2672
10	0,4406	0,4465	0,4374	0,4433	0,4395	0,4449
40	0,4833	0,4849	0,4821	0,4837	0,4826	0,4841

Tabela 4.10: Velocidade de cada constituinte na distância $y = \frac{1}{2}$ para a mistura He-Ar, potencial realístico

δ	$C_0 = 0,1$		$C_0 = 0,5$		$C_0 = 0,9$	
	u_1	u_2	u_1	u_2	u_1	u_2
0,01	0,01003	0,01246	0,009962	0,01173	0,01101	0,01158
0,1	0,06222	0,07318	0,06192	0,06970	0,06661	0,06832
1	0,2308	0,2536	0,2286	0,2443	0,2381	0,2388
10	0,4355	0,4422	0,4318	0,4366	0,4343	0,4339
40	0,4825	0,4834	0,4808	0,4815	0,4810	0,4807

Tabela 4.11: Velocidade V da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , potencial realístico

δ	V								
	Ne - Ar			He - Ar			He - Xe		
	$C_0 = 0,1$	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9
0,01	0,01236	0,01268	0,01467	0,01224	0,01157	0,01153	0,01217	0,01099	0,009269
0,02	0,02255	0,02302	0,02616	0,02231	0,02117	0,02106	0,02218	0,02018	0,01722
0,04	0,03884	0,03941	0,04385	0,03839	0,03658	0,03630	0,03815	0,03505	0,03037
0,1	0,07316	0,07369	0,08029	0,07218	0,06899	0,06817	0,07167	0,06646	0,05853
0,2	0,1132	0,1134	0,1217	0,1115	0,1067	0,1051	0,1106	0,1031	0,09144
0,4	0,1674	0,1667	0,1755	0,1647	0,1581	0,1554	0,1634	0,1534	0,1377
1	0,2557	0,2530	0,2606	0,2515	0,2429	0,2387	0,2495	0,2372	0,2175
2	0,3256	0,3216	0,3272	0,3208	0,3117	0,3072	0,3186	0,3060	0,2861
4	0,3871	0,3827	0,3864	0,3826	0,3744	0,3707	0,3806	0,3694	0,3523
10	0,4446	0,4413	0,4431	0,4416	0,4361	0,4339	0,4402	0,4327	0,4219
20	0,4700	0,4679	0,4688	0,4682	0,4648	0,4635	0,4673	0,4626	0,4561
40	0,4844	0,4832	0,4836	0,4834	0,4814	0,4807	0,4828	0,4801	0,4765

Tabela 4.12: Velocidade V da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , potencial esfera-rígida

δ	V								
	Ne - Ar			He - Ar			He - Xe		
	$C_0 = 0,1$	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9
0,01	0,01293	0,01249	0,01438	0,01242	0,01118	0,01072	0,01219	0,01032	0,008124
0,1	0,07578	0,07293	0,07886	0,07307	0,06728	0,06453	0,07183	0,06351	0,05311
1	0,2616	0,2517	0,2573	0,2537	0,2393	0,2306	0,2501	0,2308	0,2044
10	0,4470	0,4410	0,4419	0,4426	0,4348	0,4306	0,4405	0,4301	0,4156
40	0,4852	0,4831	0,4832	0,4838	0,4809	0,4796	0,4830	0,4792	0,4743

Tabela 4.13: Fluxo de calor de cada constituinte vs o parâmetro de rarefação δ e concentração $C_0 = 0,5$, potencial realístico

δ	Ne-Ar		He-Ar		He-Xe	
	q_1	q_2	q_1	q_2	q_1	q_2
0,01	-0,003860	-0,005825	-0,003441	-0,004800	-0,003100	-0,004316
0,1	-0,02081	-0,02594	-0,01938	-0,02334	-0,01817	-0,02200
1	-0,04515	-0,04039	-0,04509	-0,04184	-0,04478	-0,04246
10	-0,01958	-0,01117	-0,02712	-0,01342	-0,03146	-0,01502
40	-0,007941	-0,002726	-0,01659	-0,003690	-0,02123	-0,004364

Tabela 4.14: Fluxo de calor de cada constituinte vs o parâmetro de rarefação δ e concentração $C_0 = 0,5$, potencial esfera-rígida

δ	Ne-Ar		He-Ar		He-Xe	
	q_1	q_2	q_1	q_2	q_1	q_2
0,01	-0,004581	-0,004984	-0,004528	-0,004340	-0,004471	-0,004017
0,1	-0,02288	-0,02386	-0,02269	-0,02204	-0,02252	-0,02109
1	-0,04415	-0,04188	-0,04486	-0,04209	-0,04540	-0,04241
10	-0,01833	-0,01224	-0,02816	-0,01419	-0,03317	-0,01568
40	-0,008814	-0,002468	-0,02160	-0,003751	-0,02802	-0,004535

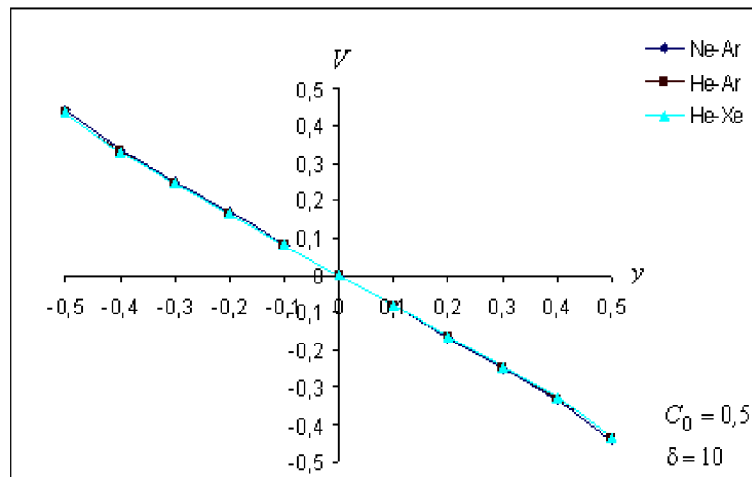


Figura 4.1: Distância y vs a velocidade V da mistura e concentração $C_0 = 0,5$ para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, potencial realístico, $\delta = 10$

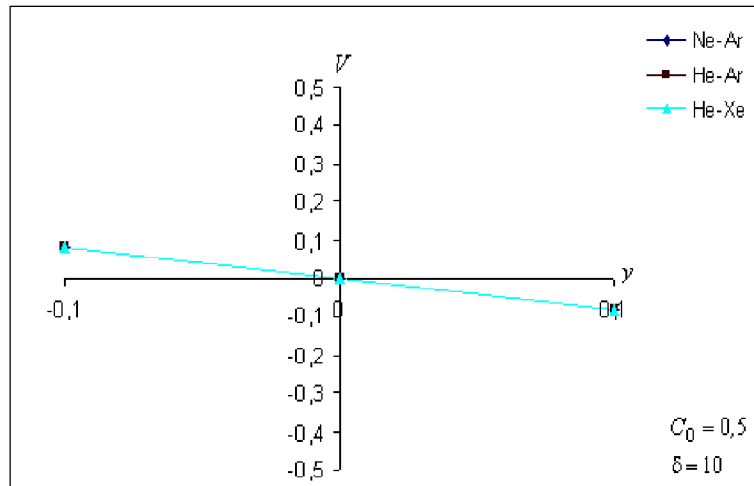


Figura 4.2: Ampliação da velocidade para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, potencial realístico

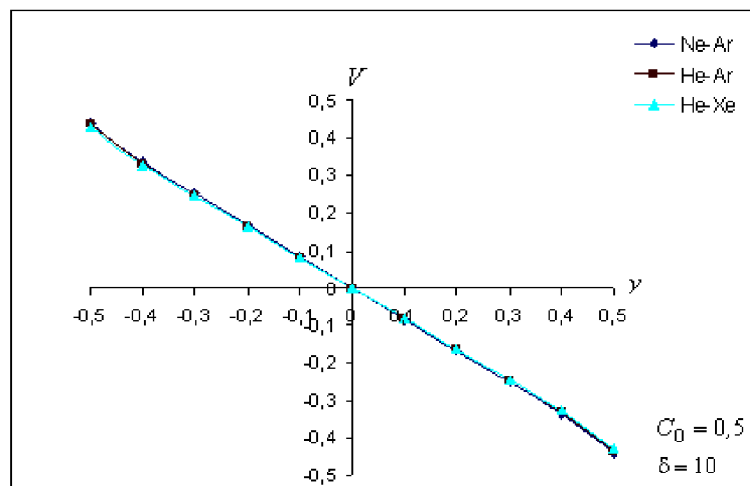


Figura 4.3: Distância y vs a velocidade V da mistura e concentração $C_0 = 0,5$ para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, potencial esfera-rígida, $\delta = 10$

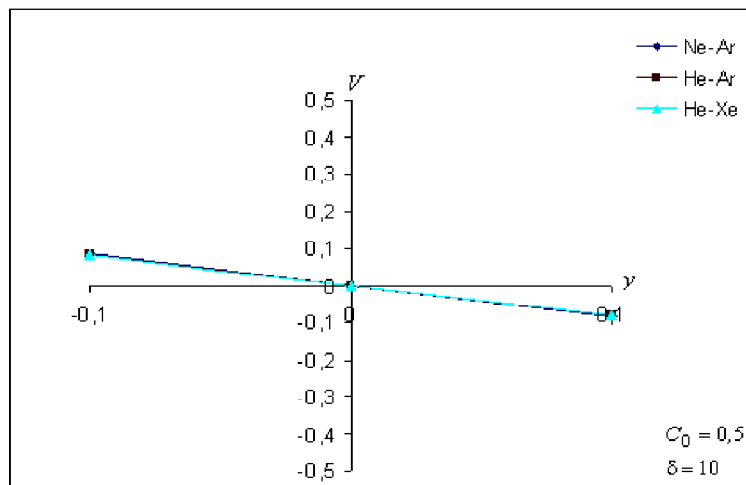


Figura 4.4: Ampliação da velocidade para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, esférica

Capítulo 5

Solução Hidrodinâmica para Misturas Binárias de Gases Monoatômicos

O problema a ser resolvido neste capítulo considera uma mistura binária confinada entre duas placas paralelas suficientemente longas de forma que os efeitos de borda podem ser desprezados. Inicialmente as placas encontram-se em repouso, caracterizando o equilíbrio do sistema. Este equilíbrio é fracamente perturbado pelo movimento relativo entre as placas. Este sistema será resolvido com base nas equações da Mecânica do Contínuo obtendo a solução hidrodinâmica correspondente. Esta solução corresponde a determinação da velocidade e do tensor tensão da mistura. À solução hidrodinâmica encontrada serão aplicadas condições de contorno apropriadas.

5.1 Considerações Gerais e Solução

Considera-se uma mistura binária de gases monoatômicos entre duas placas paralelas fixadas a uma distância $y' = \pm D/2$, conforme figura (3.4). O estado de equilíbrio é fracamente perturbado por um movimento das placas na direção x' com velocidades $\pm U/2$, respectivamente. Assume-se que as velocidades do plano são pequenas comparadas com a velocidade molecular característica da mistura, isto é:

$$U \ll v_0, \quad v_0 = \left(\frac{2kT_0}{m} \right)^{1/2}, \quad (5.1)$$

onde k é a constante de Boltzmann, T_0 é uma temperatura de equilíbrio, m é a massa molecular média

$$m = C_0 m_1 + (1 - C_0) m_2, \quad (5.2)$$

e C_0 a concentração molar da mistura em equilíbrio.

O objetivo é calcular o tensor tensão P'_{xy} entre as placas e a velocidade da mistura u'_x . Esta velocidade da mistura u'_x está relacionada com as velocidades médias de

cada constituinte $u'_{\alpha x}$ ($\alpha = 1, 2$) através de

$$u'_x = \frac{1}{\varrho_1 + \varrho_2} (\varrho_1 u'_{1x} + \varrho_2 u'_{2x}), \quad \varrho_\alpha = n_{0\alpha} m_\alpha, \quad (5.3)$$

onde ϱ_α , ($\alpha = 1, 2$) representa a densidade de massa de cada constituinte da mistura, $n_{0\alpha}$ a distribuição da densidade em equilíbrio do número de partículas do constituinte α e m_α a massa da partícula do constituinte α .

O principal parâmetro utilizado na Dinâmica dos Gases Rarefeitos é o número de Knudsen, Kn , definido como a razão entre o livre caminho médio molecular, λ , e um comprimento característico, D , do escoamento, ou seja,

$$Kn = \frac{\lambda}{D}. \quad (5.4)$$

Costuma-se utilizar com maior freqüência o chamado parâmetro de rarefação do gás, δ , que é inversamente proporcional ao número de Knudsen e, de acordo com [40], é definido como

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{Kn}. \quad (5.5)$$

O parâmetro de rarefação δ (ou o inverso do número de Knudsen Kn) caracteriza a rarefação do gás. No regime hidrodinâmico ($\delta \rightarrow \infty$ ou $Kn \rightarrow 0$) o livre caminho médio é muito menor que o comprimento característico do escoamento e, conseqüentemente, o meio gasoso pode ser considerado como um meio contínuo no qual as equações da hidrodinâmica podem ser aplicadas. Na teoria cinética dos gases [19] pode-se expressar o livre caminho médio da seguinte forma

$$\lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\mu}{P_0} v_0, \quad (5.6)$$

onde P_0 denota a pressão em equilíbrio e μ a viscosidade do gás considerado. Assim com o uso das equações (5.4), (5.6) em (5.5) obtém-se a seguinte expressão para o parâmetro de rarefação

$$\delta = \frac{DP_0}{\mu v_0}. \quad (5.7)$$

A equação (5.7) também é válida para misturas gasosas já que a pressão P_0 e a viscosidade μ da mistura são quantidades mensuráveis¹.

No regime hidrodinâmico, utiliza-se a equação de Navier-Stokes [29], com as condições de contorno sem deslizamento da velocidade² [40], escritas abaixo

$$u'_x = \frac{U}{D} y', \quad (5.8)$$

$$P'_{xy} = -\mu \frac{\partial u'_x}{\partial y'} \quad (5.9)$$

¹Quantidades mensuráveis são quantidades que podem ser medidas.

²O deslizamento da velocidade (velocity slip), [7] ocorre em uma região próxima à placa cuja dimensão é da ordem do livre caminho médio, denominada como camada de Knudsen [25].

ou reescrevendo,

$$P'_{xy} = -\mu \frac{U}{D}. \quad (5.10)$$

É conveniente introduzir quantidades adimensionais para a velocidade da mistura, posição e o tensor tensão como sendo:

$$u = \frac{u'_x}{U}, \quad (5.11)$$

$$y = \frac{y'}{D}, \quad (5.12)$$

$$\Pi = -\frac{v_0}{2UP_0} P'_{xy}. \quad (5.13)$$

Reescrevendo as equações (5.8) e (5.10) em termos das quantidades adimensionais, obtém-se

$$u = y, \quad (5.14)$$

e

$$\Pi = \frac{1}{2\delta}, \quad (5.15)$$

onde foram utilizadas as fórmulas (5.11)-(5.13) e (5.7).

Em Mecânica do Contínuo é comum considerar as seguintes condições de contorno para a velocidade e o tensor tensão na superfície das placas

$$u'_x = u_{\text{superfície}} \quad , \quad P'_{xy} = P'_{xy \text{ superfície}} \quad (5.16)$$

isto é, a velocidade e o tensor tensão da mistura são iguais a velocidade e o tensor tensão da superfície.

As expressões (5.16) são válidas quando o número de Knudsen é pequeno, isto é, no regime hidrodinâmico. Entretanto quando o número de Knudsen aumenta, ou seja, o gás se torna mais rarefeito, as condições acima não são mais válidas, pois há um deslizamento da velocidade.

Para avaliar a condição de deslizamento da velocidade escreve-se, de acordo com o trabalho [40], que

$$u'_x = \pm \frac{U}{2} \mp \sigma_P \frac{\mu v_0}{P} \frac{\partial u'_x}{\partial y'}, \quad \text{em} \quad y' = \pm \frac{D}{2}. \quad (5.17)$$

onde σ_P é o coeficiente de deslizamento viscoso.

A velocidade é escrita como uma função da posição, sendo representada por

$$u'_x = A + By', \quad (5.18)$$

onde A e B são constantes a serem determinadas.

Substituindo as condições de contorno (5.17) em (5.18) encontra-se as constantes A e B . Estes cálculos seguem abaixo:

para $y' = \frac{D}{2}$

$$\frac{U}{2} - \sigma_P \frac{\mu v_0}{P} B = A + \frac{BD}{2} \quad (5.19)$$

para $y' = -\frac{D}{2}$

$$-\frac{U}{2} + \sigma_P \frac{\mu v_0}{P} B = A - \frac{BD}{2} \quad (5.20)$$

Resolvendo o sistema de equações (5.19) e (5.20) obtém-se que $A = 0$ e $B = \frac{U}{D} \left(1 + 2\sigma_P \frac{\mu v_0}{DP}\right)^{-1}$.

Assim utilizando a equação (5.7) será possível expressar a velocidade u'_x por

$$u'_x = \frac{U}{D} \left(1 + \frac{2\sigma_P}{\delta}\right)^{-1} y'. \quad (5.21)$$

Utilizando (5.21) em (5.9) tem-se

$$P'_{xy} = -\mu \frac{U}{D} \left(1 + \frac{2\sigma_P}{\delta}\right)^{-1}. \quad (5.22)$$

Obtem-se a seguir as equações adimensionais para (5.21) e (5.22). A velocidade da mistura, em termos das quantidades adimensionais (5.11) e (5.12), se transforma em

$$u = \left(1 + \frac{2\sigma_P}{\delta}\right)^{-1} y, \quad (5.23)$$

e o tensor tensão adimensional da mistura é obtido através da substituição de (5.13) em (5.22)

$$\Pi = \frac{\mu v_0}{2P_0 D} \left(1 + \frac{2\sigma_P}{\delta}\right)^{-1}$$

e agora utilizando novamente o parâmetro de rarefação δ dado por (5.7) vem:

$$\Pi = \frac{1}{2\delta + 4\sigma_P}. \quad (5.24)$$

Os valores do coeficiente de deslizamento viscoso σ_P são encontrados em [40] para um gás único, e em [12, 21, 22, 43] para misturas de gases.

As equações (5.23) e (5.24) são equações que expressam a velocidade adimensional da mistura e o tensor tensão da mistura em função do parâmetro de rarefação e o coeficiente de deslizamento viscoso.

5.2 Resultados

Na tabela (5.1) são apresentados valores da velocidade u da mistura na distância $y = 1/2$ do tensor tensão Π da mistura em função do parâmetro de rarefação δ , conforme as equações (5.23) e (5.24). Os valores do coeficiente de deslizamento σ_P foram retirados do artigo [43] para todas as misturas consideradas.

Tabela 5.1: Velocidade u da mistura na distância $y = \frac{1}{2}$ e o tensor tensão Π da mistura vs o parâmetro de rarefação δ para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe

δ	Ne - Ar $\sigma_p = 1.040$		He - Ar $\sigma_p = 1.150$		He - Xe $\sigma_p = 1.259$	
	u	Π	u	Π	u	Π
0,1	0,02294	0,2294	0,02083	0,2083	0,01910	0,1910
0,2	0,04386	0,2193	0,04000	0,2000	0,03679	0,1840
0,4	0,08066	0,2016	0,07407	0,1852	0,06854	0,1714
1	0,1623	0,1623	0,1515	0,1515	0,1421	0,1421
2	0,2451	0,1225	0,2326	0,1163	0,2213	0,1107
4	0,3289	0,08224	0,3175	0,07937	0,3068	0,07671
10	0,4139	0,04139	0,4065	0,04065	0,3994	0,03994
20	0,4529	0,02264	0,4484	0,02242	0,4441	0,02220
40	0,4753	0,01188	0,4728	0,01182	0,4704	0,01176

Capítulo 6

Conclusões e Recomendações

Foi realizado um estudo do fluxo de Couette plano de misturas binárias de gases monoatômicos. O tensor tensão, a velocidade hidrodinâmica e o fluxo de calor de cada constituinte, assim como o tensor tensão e a velocidade hidrodinâmica da mistura foram calculadas para três misturas de gases nobres, Neônio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio, nos três regimes de escoamento: regime de moléculas livres ($\delta \rightarrow 0, Kn \rightarrow \infty$), transição ($\delta \simeq 1, Kn \simeq 1$) e hidrodinâmico ($\delta \rightarrow \infty, Kn \rightarrow 0$). Foram usados os potenciais intermoleculares: potencial realístico e esfera-rígida e concentrações nas proporções de 10%, 50% e 90% em relação ao primeiro constituinte das misturas consideradas.

No regime cinético o parâmetro de rarefação δ pode assumir valores muito pequenos enquanto que no regime hidrodinâmico este mesmo parâmetro poderá assumir valores muito grandes. Portanto o objetivo é poder comparar através da variação do parâmetro de rarefação δ o comportamento do tensor tensão e a velocidade hidrodinâmica da mistura pois, no limite do regime cinético para o regime hidrodinâmico, o tensor tensão e a velocidade hidrodinâmica da mistura obtidos na solução cinética formada pelo sistema de equações (4.39) e (4.40), tem que ser aproximadamente igual aos obtidos através da solução hidrodinâmica (5.23) e (5.24).

Uma comparação dos valores numéricos do tensor tensão Π da mistura¹ obtidos na solução cinética com os valores analíticos obtidos na solução hidrodinâmica (5.24) na condição de deslizamento² estão mostrados na tabela (6.1). Pode ser visto que para $\delta \geq 10$ a solução analítica (5.24) coincide com a solução numérica da equação cinética dentro da precisão numérica. Esta concordância nestes resultados era esperada, pois, por exemplo, $\delta = 40$ já representa o regime de escoamento hidrodinâmico de forma que os resultados devem coincidir dentro da precisão numérica. No alcance $1 \leq \delta < 10$ a solução (5.24) fornece uma boa aproximação. Para $0,01 \leq \delta < 1$ a solução analítica e a solução cinética não coincidem pois se está no regime de escoamento de moléculas livres. Assim, a tabela (6.1) abrange o alcance inteiro da rarefação δ da mistura. Então concluí-se que para grandes valores do parâmetro de rarefação δ , a solução analítica da equação de Navier-Stokes com a condição de

¹Valores presentes na tabela (4.4).

²Valores presentes na tabela (5.1).

deslizamento na velocidade pode ser aplicada com sucesso se o coeficiente de deslizamento viscoso correspondente for correto. Note que o coeficiente de deslizamento viscoso [40] depende significativamente da composição da mistura considerada.

Concluí-se que o tensor tensão decresce com o aumento do parâmetro de rarefação e é fracamente afetado pelo modelo de interação intermolecular.

Tabela 6.1: Comparação da solução numérica do tensor tensão Π da mistura com a solução analítica (5.24) para $C_0 = 0,5$, potencial realístico

δ	Π					
	Ne - Ar $\sigma_p = 1,040$		He - Ar $\sigma_p = 1,150$		He - Xe $\sigma_p = 1,259$	
	resultado numérico	Eq.(5.24)	resultado numérico	Eq.(5.24)	resultado numérico	Eq.(5.24)
0,01	0,2758	0,2392	0,2482	0,2165	0,2291	0,1978
0,1	0,2576	0,2294	0,2336	0,2083	0,2162	0,1910
0,2	0,2414	0,2193	0,2201	0,2000	0,2045	0,1840
0,4	0,2160	0,2016	0,1987	0,1852	0,1856	0,1714
1	0,1675	0,1623	0,1566	0,1515	0,1480	0,1421
2	0,1239	0,1225	0,1177	0,1163	0,1125	0,1107
4	0,08242	0,08224	0,07957	0,07937	0,07700	0,07671
10	0,04139	0,04139	0,04065	0,04065	0,03994	0,03994
20	0,02264	0,02264	0,02242	0,02242	0,02220	0,02220
40	0,01188	0,01188	0,01182	0,01182	0,01176	0,01176

Tabela 6.2: Comparação da solução numérica da velocidade V da mistura com a solução analítica (5.23) para $C_0 = 0,5$, potencial realístico

δ	V					
	Ne - Ar $\sigma_p = 1,040$		He - Ar $\sigma_p = 1,150$		He - Xe $\sigma_p = 1,259$	
	resultado numérico	Eq.(5.23)	resultado numérico	Eq.(5.23)	resultado numérico	Eq.(5.23)
0,01	0,01268	0,00239	0,01157	0,00216	0,01099	0,00198
0,1	0,07369	0,02294	0,06899	0,02083	0,06646	0,01910
0,2	0,1134	0,04386	0,1067	0,04000	0,1031	0,03679
0,4	0,1667	0,08065	0,1581	0,07407	0,1534	0,06854
1	0,2530	0,1623	0,2429	0,1515	0,2372	0,1421
2	0,3216	0,2451	0,3117	0,2326	0,3060	0,2213
4	0,3827	0,3289	0,3744	0,3175	0,3694	0,3068
10	0,4413	0,4139	0,4361	0,4065	0,4327	0,3994
20	0,4679	0,4529	0,4648	0,4484	0,4626	0,4441
40	0,4832	0,4753	0,4814	0,4728	0,4801	0,4704

A tabela (6.2) mostra os valores numéricos da velocidade V , da mistura³ obtidos na solução cinética com os valores analíticos obtidos na solução hidrodinâmica (5.23) na condição de deslizamento⁴. Pode ser visto que para $\delta = 40$ a solução (5.23) se aproxima da solução numérica da equação cinética com um erro de no máximo de 2,1%. Percebe-se que a diferença entre os valores da velocidade hidrodinâmica da solução (5.23) com a solução numérica para a mistura Ne-Ar são menores, enquanto que para a mistura He-Xe a diferença entre os valores são maiores. Pode-se observar que a velocidade hidrodinâmica cresce com o aumento do parâmetro de rarefação.

Uma extensão desta linha de pesquisa para trabalhos futuros seria:

- i) Considerar outros fenômenos de transporte no fluxo de Couette. A força termodinâmica que perturbará o equilíbrio estará relacionada com um gradiente de concentração dos constituintes da mistura.
- ii) Trabalhar com misturas ternária de gases monoatômicos.

³Valores presentes na tabela (4.11).

⁴Valores presentes na tabela (5.1).

Bibliografia

- [1] ADZUMI, H., “Studies on the flow of gaseous mixture through capillaries. I. The viscosity of binary gaseous mixture”, Bull. Chem. Soc. Japan **12**, 199-226 (1937).
- [2] ADZUMI, H., “Studies on the flow of gaseous mixture through capillaries. II. The molecular flow of gaseous mixture”, Bull. Chem. Soc. Japan **12**, 285-291 (1937).
- [3] ADZUMI, H., “Studies on the flow of gaseous mixture through capillaries. III. The flow of gaseous mixture at medium pressure”, Bull. Chem. Soc. Japan **12**, 292-303 (1937).
- [4] AOKI, K., NISHINO, K., SONE, Y. and SUGIMOTO, H., “Numerical analysis of steady flows of a gas condensing on or evaporating from its plane condensed phase on the basis of kinetic theory: effect of gas motion along the condensed phase”, Phys Fluids A **3**(9), 2260-2275 (1991).
- [5] BENTZ, J. A. Bentz, TOMPSON, R. V. and LOYALKA, S. K., “Viscosity and velocity slip coefficient for gas mixture: measurements with a spinning rotor”, J. Vac. Sci. Technol. A **17**, 235-241 (1999).
- [6] BARICHELLO, L. B., CAMARGO, M., RODRIGUES, P. and SIEWERT, C. E., “Unified solution to classical flow problem based on the BGK model”, ZAMP **52**, 517 (2001).
- [7] BIRD, G. A., “Molecular gas dynamics”, Clarendon Press - Oxford, (1976).
- [8] BIRD, G. A., “Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows” (Oxford University Press, Oxford, 1994).
- [9] CERCIGNANI, C., “Theory and application of the Boltzmann equation”, Scottish Acad. Press Edinburgh, (1975).
- [10] CERCIGNANI, C., “The Boltzmann Equation and its Application” (Springer, New York, 1988).
- [11] CERCIGNANI, C. SHARIPOV, F., “Gaseous mixture slit flow at intermediate Knudsen numbers”, Phys. Fluids, **16**(1992)2095.

- [12] CERCIGNANI, C., LAMPIS, M., LENTATI, A., “Calculation of the slip coefficient for a mixture”, in: B.D. Shizgal, D.P. Weaver (Eds.), *Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulation*, 18th. Symp., Vancouver, Canada, Progr. Astron. Aeron., **159**, AIP, Washington, 565-573 (1994).
- [13] CERCIGNANI, C., “*Rarefied Gas Dynamics*” (Cambridge University Press 2000).
- [14] CHADWICK P., “*Continuum Mechanics - Concise theory and problems*”, London George Allen & Unwin Ltd, (1976).
- [15] CHAPMAN, S and COWLING, T. G., “*The mathematical theory of non-uniform gases*”, University Press, Cambridge, (1952).
- [16] COIMBRA, A. L., “*Lição de mecânica do contínuo*”, Editora da Universidade de São Paulo, (1978).
- [17] CUMIN, L. M. G., SHARIPOV, F. and KREMER, G. M., “Rarefied gas flow between two cylinders caused by the evaporation and condensation on their surfaces”, *Phys. Fluids* **10**, 3203-3208 (1998).
- [18] CUMIN, L. M. G., “Fenômenos de transporte em um gás rarefeito em rotação com evaporação e condensação nas superfícies”, Departamento de Física, UFPR, (2000).
- [19] FERZIGER, J. H. and KAPER, H. G., “*Mathematical theory of transport processes in gases*” (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972)
- [20] FUNG, Y. C., “*A first course in continuum mechanics*”, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., (1969).
- [21] IVCHENKO, I. N., LOYALKA, S. K., and THOMPSON, R. V., “Slip coefficients for binary gas mixture”, *J. Vac. Sci. Technol. A* **15**, 2375-2381 (1997).
- [22] IVCHENKO, I. N., LOYALKA, S. K., and THOMPSON, R. V., “Boundary slip phenomena in a binary gas mixture”, *Z. Angew. Math. Phys.* **53**(1), 58-72 (2002).
- [23] KENNARD, E. H., “*Kinetic Theory of Gases*” (McGraw-Hill, New York, 1938).
- [24] KESTIN, J., KNIERIM, K., MASON, E. A., NAJAFI, B., RO, S. T. and WALDMAN, M., “Equilibrium and Transport Properties of the Noble Gases and Their Mixtures at Low Density”, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **13** (1), (1984).
- [25] KOGAN, M. N., “*Rarefied Gas Dynamics*” (Plenum, New York, 1969).
- [26] KREMER, G. M., “A equação de Boltzmann e os processos de transporte em gases”, Departamento de Física, UFPR, novembro (1995).

- [27] KREMER, G. M., “Uma introdução à Equação de Boltzmann”, Departamento de Física, UFPR, março (2003).
- [28] LAI, W. Michael, RUBIN, David, KREMPPL Erhard, “Introduction to continuum mechanics”, Pergamon Press, (1993).
- [29] LANDAU, L. D., LIFSHITZ, E. M., “Theoretical physics”, vol.5: Statistical Physics, Part 1 (Nauka, Moscow, 1976) ch. XII.
- [30] LANG, H. and MULLER, W. J. C., “Slip effect in mixture of monatomic gases for general surface accommodation”, *Z.Naturforsch* **30**, 855-867 (1975).
- [31] LIU, I-Shih, “Mechanics of continuum media”, Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- [32] LIU, I-Shih, SPRINGER, “Continuum mechanics”, Berlin (2002).
- [33] LOYALKA, S. K., “Temperature jump in a gas mixture”, *Phys. Fluids* **17**, 897-899 (1974).
- [34] MARQUES JR, W., KREMER, G. M. and SHARIPOV, F., “Couette flow with slip and jump boundary conditions”, *Cont Mech. Thermody.* **12**, 379-386 (2000).
- [35] MAXWELL, J. C., “On stress in rarefied gases arising from inequalities of temperature”, in *Scientific Papers of James Clerk Maxwell*, edited by W. D. Niven (Dover, New York, 1965) **2**, 681-712.
- [36] MCCORMACK, F. J., “Construction of linearized kinetic models for gaseous mixtures and molecular gases”, *Physics of Fluids*, **16**, 2095 (1973).
- [37] OHWADA, T., “Higher order approximation methods for the Boltzmann Equation”, *J. of Computational Physics*, **139** (1), (1998).
- [38] ONISHI, Y., “On the behaviour of a slightly rarefied gas mixture over plane boundaries”, *Z Angew: Math, ZAMP*, **37**, 573-596 (1986).
- [39] SHARIPOV, F., and SUBBOTIN, E. A, “On optimization of the discrete velocity method used in rarefied gas dynamics”, *ZAMP* **44**, (1993).
- [40] SHARIPOV, F. and SELEZNEZ, V., “Data on internal gas flows”, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **27**, 657-706 (1998).
- [41] SHARIPOV, F., CUMIN, L. M. G. and KREMER, G. M., “Transport phenomena in rotating rarefied gases”, *Phys. Fluids* **13**, 335-346 (2001).
- [42] SHARIPOV, F., KALEMPA, D., “Gaseous mixture flow through a long tube at arbitrary Knudsen number”, *J. Vac. Sci. Technol. A* **20**(3), (2002).

- [43] SHARIPOV, F., KALEMPA, D., “Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous slip coefficient”, *Phys. Fluids*, **15**(6), 1800-1806 (2003).
- [44] SHARIPOV, F., KALEMPA, D., “Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. II. Thermal slip coefficient”, *Phys. Fluids*, **16**(3), 759-764 (2004).
- [45] SHARIPOV, F., CUMIN, L. M. G. and KALEMPA, D., “Plane Couette flow of binary gaseous mixture in the whole range of the Knudsen number”, *Phys. Fluids*, **25**(3), (2004).
- [46] SHARIPOV, F., KALEMPA, D., “Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. III. Diffusion slip coefficient”, *Phys. Fluids*, submitted for publication.
- [47] SPENCER, A. J. M., “Continuum Mechanics”, Longman Mathematical Texts, (1980).
- [48] TAKATA, S., “Diffusion slip for a binary mixture of hard-sphere molecular gases: Numerical analysis based on the linearized Boltzmann equation”, In *Rarefied Gas Dynamics*, T. J. Bartel and M. A. Gallis, eds., 22-29 (AIP, New York, 2001)
- [49] VALOUGEORGIS, D., “Couette flow of a binary gas mixture”, *Phys. Fluids*, **31** (3), (1988).

Apêndice A

Equação de Transporte

A equação de Boltzmann é uma função da posição, da velocidade das partículas e do tempo através da função de distribuição.

Seja $\psi = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ uma função arbitrária. Multiplicando-se a equação de Boltzmann (3.5) pela função ψ e integrando sobre todos os valores de \mathbf{v} tem-se uma integral em função da posição \mathbf{x} e do tempo t que são quantidades macroscópicas.

Então

$$\int \psi \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{v} + \int \psi v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} d\mathbf{v} + \int \psi F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} d\mathbf{v} = \int \psi (f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}. \quad (\text{A.1})$$

Agora serão feitas transformações na equação (A.1). Inicialmente considera-se os três primeiros termos da equação acima:

$$\int \psi \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{v} = \int \frac{\partial f \psi}{\partial t} d\mathbf{v} - \int f \frac{\partial \psi}{\partial t} d\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \int \psi f d\mathbf{v} - \int f \frac{\partial \psi}{\partial t} d\mathbf{v}, \quad (\text{A.2})$$

$$\int \psi v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} d\mathbf{v} = \int \frac{\partial \psi v_i f}{\partial x_i} d\mathbf{v} - \int f v_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} d\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial x_i} \int \psi v_i f d\mathbf{v} - \int f v_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} d\mathbf{v}, \quad (\text{A.3})$$

$$\int \psi F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} d\mathbf{v} = \int \frac{\partial \psi F_i f}{\partial v_i} d\mathbf{v} - \int F_i f \frac{\partial \psi}{\partial v_i} d\mathbf{v}. \quad (\text{A.4})$$

Na primeira integral do lado direito da equação (A.4) deve-se notar que a derivada é em relação a v_i e a integral em relação a \mathbf{v} , logo a derivada parcial não é uma constante em relação ao integrando. Usando o teorema da divergência de Gauss onde \mathbf{n} é a normal unitária

$$\int \psi F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} d\mathbf{v} = \int \frac{\partial \psi F_i f}{\partial v_i} d\mathbf{v} - \int F_i f \frac{\partial \psi}{\partial v_i} d\mathbf{v} = \oint_S \psi F_i f n_i dS - \int F_i f \frac{\partial \psi}{\partial v_i} d\mathbf{v}.$$

Na integral $\oint_S \psi F_i f n_i dS$, dS representa o elemento de área de uma superfície que está situada em pontos infinitamente distantes no espaço das velocidades. Assim a nulidade desta integral resulta do fato da função de distribuição f decrescer rapidamente para grandes valores da velocidade. Portanto

$$\int \psi F_i \frac{\partial f}{\partial v_i} d\mathbf{v} = - \int F_i f \frac{\partial \psi}{\partial v_i} d\mathbf{v}. \quad (\text{A.5})$$

Analisando o lado direito da equação (A.1),

$$\int \psi f'_1 f' g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v} = \int \psi' f_1 f g' b' db d\epsilon' d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}' = \int \psi' f_1 f g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}, \quad (\text{A.6})$$

onde a relação (A.6) foi obtida levando-se em conta as equações válidas para uma colisão de restituição, conforme a figura (3.3) isto é,

$$g' = g, \quad b' = b, \quad d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}' = d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}, \quad d\epsilon' = d\epsilon.$$

Então

$$\begin{aligned} \int \psi(f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v} &= \int (\psi' - \psi) f_1 f g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v} \\ &= \frac{1}{2} \int (\psi - \psi')(f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Por outro lado, mudando o papel das partículas que colidem, isto é, trocando-se $(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ por $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}'_1)$ tem-se que

$$\frac{1}{2} \int (\psi - \psi')(f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v} = \frac{1}{2} \int (\psi_1 - \psi'_1)(f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}. \quad (\text{A.8})$$

Concluí-se, através das equações (A.2), (A.3), (A.5), (A.7) e (A.8) que a equação (A.1) pode ser expressa como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \psi f d\mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int \psi v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} d\mathbf{v} - \int \left[\frac{\partial \psi}{\partial t} d\mathbf{v} + v_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} d\mathbf{v} + F_i \frac{\partial \psi}{\partial v_i} d\mathbf{v} \right] f d\mathbf{v} \\ = \frac{1}{4} \int (\psi_1 + \psi - \psi'_1 - \psi)(f'_1 f' - f_1 f) g b db d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

que é conhecida como a equação de transporte.

Apêndice B

Programa

Apresenta-se abaixo o programa para o potencial de esfera-rígida.

```
C      Last change: MM   13 Apr 2004   4:24 am
C      Couette flow-Rigid-Spheres
C
C      PARAMETER(NC=14,NY=10000)
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C      DIMENSION U1(NY+1),QX1(NY+1),U01(NY+1),Q01(NY+1),U2(NY+1),
C      *QX2(NY+1),U02(NY+1),Q02(NY+1),PXY01(NY+1),PXY02(NY+1),AM(2),
C      *C(NC),W(NC),UN1(2,2),UN2(2,2),UN3(2,2),
C      *SI(2,2),T(2),OM11(2,2),OM22(2,2),AMZ(2,2),OMZ11(2,2),UN6(2,2),
C      *OMZ22(2,2),HFP2(NY+1),HPP2(NY+1),PXY1(NY+1),PXY2(NY+1),CA(2,2),
C      *OMZ12(2,2),OMZ13(2,2),OM12(2,2),OM13(2,2),UN4(2,2),UN5(2,2)
C      *,f(nc,nc+1),g(nc,nc+1),c1(nc),ga(2,2),u0(NY+1),u(NY+1)
C
C      Definition of the input data
C      CONC: concentration;
C      T(i): concentration of ith species;
C      AM(i): mass of ith species;
C      SI(i): diameter of ith species;
C
C      open(11,file='li',STATUS='old')
C      E=1.D-10
C      DEL=1.D0
C      MAX=500000D0
C      CONC=0.5
C
C      He - Ar
C      AM(1)=4.0026D0
C      AM(2)=39.948D0
C      SI(1,1)=0.2610
C      SI(2,2)=0.3350
C      SI(1,2)=0.3084
C      SI(2,1)=SI(1,2)
C
C      Ne - Ar
C      AM(1)=20.179D0
C      AM(2)=39.948D0
C      SI(1,1)=0.2755
C      SI(2,2)=0.3350
```

```

C      SI (1,2)=0.3119
C      SI (2,1)=-SI (1,2)
C
C      He - Xe
C
C      AM(1)=4.0026D0
C      AM(2)=131.29D0
C      SI (1,1)=0.2610
C      SI (2,2)=0.3885
C      SI (1,2)=0.3533
C      SI (2,1)=SI (1,2)
C
C      RM=AM(1)/AM(2)
C      T(1)=CONC
C      T(2)=1.D0-CONC
C      DY=1./NY
C      NY1=NY+1
C      PI=ACOS(-1.D0)
C      SRM=SQRT(RM)
C      S3RM=SRM**3
C      SRMI=SQRT(1.D0/RM)
C      S3RMI=SRMI**3
C
C      Rigid-Spheres
C
C      DO M=1,2
C        DO N=1,2
C          OMZ11(M,N)=1.D0
C          OMZ22(M,N)=1.D0
C          OMZ12(M,N)=1.D0
C          OMZ13(M,N)=1.D0
C        END DO
C      END DO
C
C      NU=1
C      TEMP=300.
C      CALL OMEGAINT(NU,TEMP,OMZ11,OMZ22,OMZ12,OMZ13)
C
C      INTEGRALS OF CHAPMAN-COWLING
C
C      DO M=1,2
C        DO N=1,2
C          AMZ(M,N)=AM(M)*AM(N)/(AM(M)+AM(N))
C          OM11(M,N)=4.*SI(M,N)**2/SQRT(AMZ(M,N))
C          OM22(M,N)=2.D0*OM11(M,N)
C          OM12(M,N)=3.D0*OM11(M,N)
C          OM13(M,N)=12.D0*OM11(M,N)
C          OM11(M,N)=OM11(M,N)*OMZ11(M,N)
C          OM22(M,N)=OM22(M,N)*OMZ22(M,N)
C          OM12(M,N)=OM12(M,N)*OMZ12(M,N)
C          OM13(M,N)=OM13(M,N)*OMZ13(M,N)
C        END DO
C      END DO
C
C      CALCULATION OF NI
C
C      DO M=1,2
C        DO N=1,2
C          UN1(M,N)=16./3.*AMZ(M,N)/AM(M)*T(N)*OM11(M,N)
C          UN2(M,N)=64./15.*(AMZ(M,N)/AM(M))**2*T(N)*(OM12(M,N)-2.5*
*          OM11(M,N))
C          UN3(M,N)=3.2*AMZ(M,N)**2/(AM(M)*AM(N))*T(N)*(10./3.*OM11(M,N)
*          +AM(N)/AM(M)*OM22(M,N))

```

```

      UN4 (M,N)=3.2*(AMZ (M,N)**2/(AM (M)*AM (N)))*T (N)*(10./3.*
*      OM11 (M,N)-OM22 (M,N))
      UN5 (M,N)=64./15.*(AMZ (M,N)/AM (M))**3*AM (M)/AM (N)*T (N)*(OM22 (M,
*      N)+(15./4.*AM (M)/AM (N)+25./8.*AM (N)/AM (M))*OM11 (M,N)-0.5*
*      AM (N)/AM (M)*(5.*OM12 (M,N)-OM13 (M,N)))
      UN6 (M,N)=64./15.*(AMZ (M,N)/AM (M))**3*(AM (M)/AM (N))** (3./2.)*
*      T (N)*(-OM22 (M,N)+55./8.*OM11 (M,N)-2.5*OM12 (M,N)+0.5*
*      OM13 (M,N))
      END DO
      END DO
C
C      CALCULATION OF DELTA2
C
      AMM=T (1)*AM (1)+T (2)*AM (2)
      RM1=SQRT (AM (1)/AMM)
      RM2=SQRT (AM (2)/AMM)
      PPSI1=UN3 (1,1)-UN4 (1,1)+UN3 (1,2)
      PPSI2=UN3 (2,2)-UN4 (2,2)+UN3 (2,1)
      GAM1=(PPSI1*PPSI2-UN4 (1,2)*UN4 (2,1))/(PPSI2+UN4 (1,2))
      GAM2=(PPSI1*PPSI2-UN4 (1,2)*UN4 (2,1))/(PPSI1+UN4 (1,2))
      AMU=(T (1)/GAM1+T (2)/GAM2)
      DEL1=AMU*GAM1*SQRT (AM (1)/AMM)*DEL
      DEL2=AMU*GAM2*SQRT (AM (2)/AMM)*DEL
C
C      Calculation of velocity by gaussian quadrature
C      Subroutine GAUSS
      CALL GAUSS (NC,0,f,g,C1,C,W)
C
C      First aproximation
C
      DO K=1,NY1
        U1 (K)=0.D0
        U2 (K)=0.D0
        PXY1 (K)=0.D0
        PXY2 (K)=0.D0
        QX1 (K)=0.D0
        QX2 (K)=0.D0
      END DO
C
C      Beginning of iterations
C
      IT=0
      FI12=UN1 (1,2)/GAM1
      FI13=0.5*UN2 (1,2)/GAM1
      FI14=1.+((UN4 (1,1)-UN3 (1,1)-UN3 (1,2))/GAM1)
      FI15=UN4 (1,2)/GAM1
      FI16=0.4*(1.+(-UN5 (1,1)-UN5 (1,2)+UN6 (1,1))/GAM1)
      FI17=0.4*UN6 (1,2)/GAM1
      FI22=UN1 (2,1)/GAM2
      FI23=0.5*UN2 (2,1)/GAM2
      FI24=1.+((+UN4 (2,2)-UN3 (2,2)-UN3 (2,1))/GAM2)
      FI25=UN4 (2,1)/GAM2
      FI26=0.4*(1.+(-UN5 (2,1)-UN5 (2,2)+UN6 (2,2))/GAM2)
      FI27=0.4*UN6 (2,1)/GAM2
      FII4=S3RM*FI13
      FII42=S3RMI*FI23
C
      PS13=FI13
      PS16=FI16
      PS17=FI17
      PS23=FI23
      PS26=FI26
      PS27=FI27

```

```

PSI4=SRM*PS13
PSI42=SRMI*PS23
uu=1.d0
6 CONTINUE
IT=IT+1
DO K=1,NY1
  U01(K)=0.D0
  U02(K)=0.D0
  Q01(K)=0.D0
  Q02(K)=0.D0
  PXY01(K)=0.D0
  PXY02(K)=0.D0
END DO
U01(1)=0.25D0*RM1
U02(1)=0.25D0*RM2
PXY01(1)=0.1410473959D0*RM1
PXY02(1)=0.1410473959D0*RM2
C
C Cycle with respect to the velocity
C
DO I=1,NC
  CY=C(I)
  WW=W(I)
  W1=WW
  W2=W1*(CY**2-0.5D0)
  FII155=CY**2-0.5D0
  PSI155=CY**2+0.5D0
  FII19=CY/DY
  DD11=DEL1+FII19
  DD12=DEL2+FII19
  FII1=FII12+FII155*FII13
  FII2=FII155*FII16
  FII3=FII155*FII17
  FII5=2.*CY*FII14
  FII6=2.*CY*FII15
  FII12=FI22+FII155*FI23
  FII22=FI155*FI26
  FII32=FI155*FI27
  FII52=2.*CY*FI24
  FII62=2.*CY*FI25
  FIA=(1.-FII1)*RM1
  FIB=(SRM*FII1)*RM2
  FIC=(FII2-FII13)*RM1
  FID=(FII3+FII4)*RM2
  FIA2=(1.-FII12)*RM2
  FIB2=(SRMI*FII12)*RM1
  FIC2=(FII22-FI23)*RM2
  FID2=(FII32+FII42)*RM1
C
  DD1=1./(DEL1+CY/DY)
  DD2=1./(DEL2+CY/DY)
  PSI21=8./5.*DEL1*DD1*RM1
  PSI22=8./5.*DEL2*DD2*RM2
C
  D1=1.D0/DD11
  D2=1.D0/DD12
C
C Cicle with respect to Y coordinate
C
C Plate 1 to 2
C
  FII1=0.5D0*RM1
  FII2=0.5D0*RM2

```



```

PS1P=0.D0
PS2P=0.D0
DO K=2,NY+1
  FII1=(DEL1*(U1(K)*FIA+U2(K)*FIB+QX1(K)*FIC+QX2(K)*FID+PXY1(K)
&      *FII5+PXY2(K)*FII6)+FI19*FI1)*D1
  FI2=(DEL2*(U2(K)*FIA2+U1(K)*FIB2+QX2(K)*FIC2+QX1(K)*FID2+
&      PXY2(K)*FII52+PXY1(K)*FII62)+FI19*FI2)*D2
  PS1P=(QX1(K)*PS16+QX2(K)*PS17
*      -5./8.*(U1(K)-SRM*U2(K))*PS13)*PSI21
*      +FI19*PS1P*DD1
  PS2P=(QX2(K)*PS26+QX1(K)*PS27
*      -5./8.*(U2(K)-SRMI*U1(K))*PS23)*PSI22
*      +FI19*PS2P*DD2
  U01(K)=U01(K)+FI1*W1
  U02(K)=U02(K)+FI2*W1
  PXY01(K)=PXY01(K)+W1*FI1*CY
  PXY02(K)=PXY02(K)+W1*FI2*CY
  Q01(K)=Q01(K)+FI1*W2+PS1P*W1
  Q02(K)=Q02(K)+FI2*W2+PS2P*W1
END DO
DO K=1,NY/2+1
  U1(K)=(U01(K)-U01(NY1+1-K))/RM1
  U1(NY1+1-K)=-U1(K)
  U2(K)=(U02(K)-U02(NY1+1-K))/RM2
  U2(NY1+1-K)=-U2(K)
  QX1(K)=(Q01(K)-Q01(NY1+1-K))/RM1
  QX1(NY1+1-K)=-QX1(K)
  QX2(K)=(Q02(K)-Q02(NY1+1-K))/RM2
  QX2(NY1+1-K)=-QX2(K)
  PXY1(K)=PXY01(K)+PXY01(NY1+1-K)
  PXY1(NY1+1-K)=PXY1(K)
  PXY2(K)=PXY02(K)+PXY02(NY1+1-K)
  PXY2(NY1+1-K)=PXY2(K)
END DO
C
C   Convergency of the mixture's velocity
C
DO K=1,NY1
  U0(K)=CONC*RM1**2*U1(K)+(1.D0-CONC)*RM2**2*U2(K)
END DO
ER=0.
DO K=1,NY1
  DV=ABS((U(K)-U0(K)))
  IF(DV.GT.ER) ER=DV
  U(K)=U0(K)
END DO
C
C   Convergency to Viscous Slip
C
PXYR1=T(1)*PXY1(1) +T(2)*PXY2(1)
PXYR2=T(1)*PXY1(NY/2)+T(2)*PXY2(NY/2)
PXYR3=T(1)*PXY1(NY+1) +T(2)*PXY2(NY+1)
print99001,it,pxyr1,pxyr2,pxyr3
99001 format(i4,3e14.7)
c   IF(IT/1.EQ.IT/1.) PRINT*, SIG,IT,ER
IF(ER.GT.E.AND.IT.LT.MAX) GO TO 6
C   do i=1,ny1
C     write(11,*) ,i,pxy1(i),pxy2(i)
C   end do
CC   print99002   ONDE TEM cc FAZ APARECER NA TELA
CC99002 FORMAT(3X,'Y',9X,'U1',8X,'U2',10X,'VI',7X,'PXY1',7X,'PXY2'
CC   *,7X,'PXYR')

```

```

WRITE (11, 991) CONC, DEL, DEL1, DEL2, NC, NY
991  FORMAT (3X, 'mixture He-Ar RigSph', 3X, 'CONC=', f4.2, 2X,
* 'DEL=', f7.4//
* 3X, 'DEL1=', f7.4, 3X, 'DEL2=', f7.4, 3X, 'NC=', I4, 6X, 'NY=', I7//
* 3X, 'Y', 9X, 'U1', 8X, 'U2', 10X, 'VI', 7X, 'PXY1', 7X, 'PXY2'
*, 7X, 'PXYR')
DO K=1, NY1, 500
YY=DY*(K-1)
PXYR=T(1)*PXY1(K) + T(2)*PXY2(K)
VI=(AM(1)*U1(K)+AM(2)*U2(K))/(AM(1)+AM(2))
WRITE (11, 99) YY, U1(K), U2(K), VI, PXY1(K), PXY2(K), PXYR
99  FORMAT (f7.2, 1X, 6e11.4)
CC  print99003, yy, u1(k), u2(k), vi, pxy1(k), pxy2(k), pxyr
CC99003 format (f7.2, 1X, 6e11.4)
C
C  printing results for gtafics
C
C  WRITE (11, 99) YY, U1(K)
C  WRITE (11, 99) YY, U2(K)
C  WRITE (11, 99) YY, VI
C  WRITE (11, 99) YY, PXY1(K)
C  WRITE (11, 99) YY, PXY2(K)
C  WRITE (11, 99) YY, PXYR
C
C  WRITE (11, 99) YY, U1, U2, VI, PXY1, PXY2
C99  FORMAT (f7.2, 5 (e11.4))
END DO
CC  print99004, conc, del, dell1, del2
CC99004 FORMAT (3X, 'mixture He-Ar RigSph', 3X, 'CONC=', f4.2, 2X,
CC  * 'DEL=', f7.4, 3X, 'DEL1=', f7.4, 3X, 'DEL2=', f7.4)
C
C99004 FORMAT (3X, 'mixture Ne-Ar RigSph', 3X, 'CONC=', f4.2, 2X,
C  * 'DEL=', f7.4, 3X, 'DEL1=', f7.4, 3X, 'DEL2=', f7.4)
C
C99004 FORMAT (3X, 'mixture He-Xe RigSph', 3X, 'CONC=', f4.2, 2X,
C  * 'DEL=', f7.4, 3X, 'DEL1=', f7.4, 3X, 'DEL2=', f7.4)
STOP
END
C
C
C
C  Last change:  MM  19 Mar 2003  4:10 pm
SUBROUTINE GAUSS (N, K, A, B, C, X, W)
C
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z)
DIMENSION A(N, N+1), C(N), X(N), B(N, N+1), W(N)
c  EXTERNAL REC, ELGAUSS, RAIZES
PI=ACOS(-1.d0)
C  Matriz dos coeficientes (dos coeficientes do polinomio)
DO I=1, N
M=I-1
DO J=1, N
A(I, J)=REC(K+M+N-J)
END DO
A(I, N+1)=-REC(K+M+N)
END DO
C  Subrotina para encontrar os coeficientes do polinomio
CALL ELGAUSS(N, A, C)
C  Subrotina para encontrar as raizes do polinomio
CALL RAIZES(N, C, X)
C  Matriz de coeficientes dos pesos
DO I=1, N
B(1, I)=1.d0

```

```

        B(I,N+1)=REC(K+I-1)
    END DO
    DO L=2,N
        DO J=1,N
            B(L,J)=X(J)**(L-1)
        END DO
    END DO
C     Subrotina para encontrar os pesos
    CALL ELGAUSS(N,B,W)
C
    RETURN
    END
C
C
                SUBROUTINE ELGAUSS(N,A,X)
C
C     Eliminacao de Gauss
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
    DIMENSION A(N,N+1),X(N)
C     Triangularizacao
    DO K=1,N-1
        L=K
C         Determinação do termo da coluna K, na diagonal principal ou
C         abaixo dela, que tenha o máximo valor absoluto.L e o numero
C         da linha do elemento de valor máximo.
        DO I=K+1,N
            IF(ABS(A(I,K)).GT.ABS(A(L,K))) L=I
        END DO
        IF(L.EQ.K) GO TO 20
C         Troca de linhas
        DO J=1,N+1
            TEMP=A(K,J)
            A(K,J)=A(L,J)
            A(L,J)=TEMP
        END DO
    20    CONTINUE
        DO I=K+1,N
            FATOR=A(I,K)/A(K,K)
            DO J=1,N+1
                A(I,J)=A(I,J)-FATOR*A(K,J)
            END DO
        END DO
    END DO
C     Retrosstituicao
    X(N)=A(N,N+1)/A(N,N)
    I=N-1
    710  I1=I+1
        SUM=0.d0
        DO J=I1,N
            SUM=SUM+A(I,J)*X(J)
        END DO
        X(I)=(A(I,N+1)-SUM)/A(I,I)
        I=I-1
        IF(I.GE.1) GO TO 710
    RETURN
    END
C
                SUBROUTINE RAIZES(N,C,R)
C
C     IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
    DIMENSION R(N),C(N)
    H=0.1d0
    M=1

```

```

ER=1.D-10
XL=1.d-10
5  YL=PN(XL,N,C)
10 XR=XL+H
   IF(XR.GT.100.) PRINT*,"ALGO ERRADO"
   YR=PN(XR,N,C)
C  TESTE SE XR E XL LIMITAM UMA RAIZ
   IF(YL*YR.LT.0) THEN
     GO TO 20
   ELSE
     IF(YL*YR.EQ.0) THEN
       GO TO 30
     ELSE
       GO TO 40
     END IF
   END IF
C  CONTINUA AQUI SE XR E XL NAO LIMITAREM UMA RAIZ
40  IF(M.GT.N) RETURN
   XL=XR
   YL=YR
   GO TO 10
C  CONTINUA AQUI SE XR OU XL FOR UMA RAIZ
30  IF(YL.EQ.0) GO TO 50
   R(M)=XR
   M=M+1
   IF(M.GT.N) RETURN
   XL=XR+H
   GO TO 5
50  R(M)=XL
   M=M+1
   IF(M.GT.N) RETURN
   GO TO 40
C  CONTINUA AQUI SE XR E XL LIMITAREM UMA RAIZ
20  XS=XR
25  X=(XR+XL)/2.
   Y=PN(X,N,C)
   IF(YL*Y.LT.0) THEN
     GO TO 60
   ELSE
     IF(YL*Y.EQ.0) THEN
       GO TO 70
     ELSE
       GO TO 80
     END IF
   END IF
C  CONTINUA AQUI SE XS FOR UMA RAIZ
70  R(M)=X
   M=M+1
   GO TO 110
C  CONTINUA AQUI SE A RAIZ ESTIVER ENTRE XL E XS
60  XR=X
   YR=Y
   GO TO 90
C  CONTINUA AQUI SE A RAIZ ESTIVER ENTRE XS E XR
80  XL=X
   YL=Y
C  TESTE SE A APROXIMACAO E SUFICIENTE
90  IF(ABS(XR-XL).GE.ER) GO TO 25
C  A APROXIMACAO E SUFICIENTE IMPRIMA A RAIZ
C  XL OU XR
100 R(M)=XL
   M=M+1
C  EXAMINE O PROXIMO INTERVALO

```

```

110 XL=XS
    IF(M.GT.N) return
    GO TO 5
    RETURN
    END

        DOUBLE PRECISION FUNCTION REC(M)
C   Relacao de Recorrenca para as integrais
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
    IF(M/2.EQ.M/2.) THEN
C       REC=1.
        rec=0.5d0
        I0=0
    ELSE
C       PI=ACOS(-1.d0)
        REC=1./SQRT(PI)
        rec=0.5/sqrt(pi)
        I0=1
    END IF
    IF(M.LT.2) RETURN
    DO I=I0,M-2,2
        REC=REC*(I+1)/2.
    END DO
    RETURN
    END

C
        DOUBLE PRECISION FUNCTION PN(X,N,C)
C   Calculo do polinomio de grau N num ponto X
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
    DIMENSION C(N)
    PN=X**N
    DO I=1,N
        PN=PN+C(I)*X**(N-I)
    END DO
    RETURN
    END

```