

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

Diego Marlon de Castro

Simulação direta de Monte Carlo de escoamento de
Couette e transferência de calor combinados

Dissertação apresentada como requisito parcial a obtenção de grau de Mestre. Área de concentração: Engenharia e Ciência dos Materiais, Programa de Pós Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais-PIPE. Setor de tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Felix Sharipov.

Coorientador: Prof. Dr. Jose Lauro Strapasson.

Curitiba

Setembro de 2016



ATA DE SESSÃO PÚBLICA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

No dia onze de Outubro de dois mil e dezesseis às 14:00 horas, na sala Anfiteatro B, Centro Politécnico, do Setor de TECNOLOGIA da Universidade Federal do Paraná, foram instalados os trabalhos de arguição do mestrando **DIEGO MARLON DE CASTRO** para a Defesa Pública de sua Dissertação intitulada: "**SIMULAÇÃO DIRETA DE MONTE CARLO DE ESCOAMENTO DE COUETTE E TRANSFERÊNCIA DE CALOR COMBINADOS**". A Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em ENGENHARIA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS da Universidade Federal do Paraná, foi constituída pelos seguintes Membros: **FELIX SHARIPOV (UFPR)**, **CÉSAR AUGUSTO DARTORA (UFPR)**, **FABIANO MANOEL DE ANDRADE (UEPG)**. Dando início à sessão, a presidência passou a palavra ao discente, para que o mesmo expusesse seu trabalho aos presentes. Em seguida, a presidência passou a palavra a cada um dos Examinadores, para suas respectivas arguições. O aluno respondeu a cada um dos arguidores. A presidência retomou a palavra para suas considerações finais e, depois, solicitou que os presentes e o mestrando deixassem a sala. A Banca Examinadora, então, reuniu-se sigilosamente e, após a discussão de suas avaliações, decidiu-se pela aprovação do aluno. O mestrando foi convidado a ingressar novamente na sala, bem como os demais assistentes, após o que a presidência fez a leitura do Parecer da Banca Examinadora. Nada mais havendo a tratar a presidência deu por encerrada a sessão, da qual eu, **FELIX SHARIPOV**, lavrei a presente ata, que vai assinada por mim e pelos membros da Comissão Examinadora.

CURITIBA, 11 de Outubro de 2016.

FELIX SHARIPOV

Presidente da Banca Examinadora (UFPR)

CÉSAR AUGUSTO DARTORA

Avaliador Interno (UFPR)

FABIANO MANOEL DE ANDRADE

Avaliador Externo (UEPG)

Resumo

Foi desenvolvido um programa de simulação computacional de monte Carlo que foi utilizado para resolver o problema de escoamento de Couette combinado com o de transferência de calor, para mistura gasosa rarefeita de Hélio e Argônio, utilizando o modelo de esferas rígidas. Nesse problema foram calculadas a tensão de cisalhamento e o fluxo de calor no amplo intervalo do parâmetro de rarefação. Testes foram realizados para os problemas de Couette e transferência de calor separados, assegurando a eficácia do programa.

Palavras-chave: Simulação direta de Monte Carlo, parâmetro de rarefação, tensor de cisalhamento, fluxo de calor, Couette.

Abstract

It was developed a computer Monte Carlo simulation program which was used to solve the problem of Couette flow combined with the heat transfer, for a rarefied gas mixture of helium and argon, using the model of rigid spheres. In this problem we have calculated the shear stress and the heat flow in the broad range of the rarefaction parameter. Tests were performed for the Couette and and heat transfer separated, ensuring the effectiveness of the program.

Keywords: Direct Simulation Monte Carlo, rarefaction parameter, shear stress, heat transfer, Couette.

Agradecimentos

Agradeço a CAPES pela bolsa de pesquisa.

Ao LCPAD por disponibilizar suas máquinas para uso.

Ao Prof: Dr. Felix Sharipov.

Ao meu coorientador Prof: Dr. Jose Lauro Strapasson.

A coordenadora do PIPE, Prof: Dr. Ana Sofia Clímaco Monteiro de Oliveira.

A todos que de alguma forma estiveram envolvidos nesse trabalho.

Lista de Tabelas

2.1	Cisalhamento adimensional Π para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$	8
2.2	Fluxo de Calor adimensional q para potencial de esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e razão entre a diferença de temperatura ΔT e a temperatura de equilíbrio T_0	9
4.1	Parâmetros para o potencial (AI) usado na equação 4.12.	33
6.1	Cisalhamento adimensional Π para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$, para Couette e transferência de calor combinados.	53
6.2	Fluxo de Calor adimensional q para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e razão entre a diferença de temperatura ΔT e a temperatura de equilíbrio T_0 , para Couette e transferência de calor combinados.	54

- 6.3 Cisalhamento adimensional Π para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ , velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$ e diferença da temperatura entre as placas ΔT , para Couette e transferência de calor combinados. 56
- 6.4 Fluxo de calor adimensional q para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ , velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$ e diferença da temperatura entre as placas ΔT , para Couette e transferência de calor combinados. 58
- 6.5 Desvio relativo entre o cisalhamento dado nas tabelas (6.1) e (2.1), para potencial de esferas rígidas e em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$ 72
- 6.6 Desvio relativo entre o fluxo de calor dado nas tabelas (6.2) e (2.2), para potencial de esferas rígidas e em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$ 73

Lista de Figuras

3.1	Esquema para o Cisalhamento P_{ij}	19
4.1	Esquema das coordenadas cartesianas r_1 e r_2 do fluxo planar de Couette.	25
4.2	trajetória da partícula após a colisão.	26
4.3	Esquema para transferência de calor entre duas placas.	29
5.1	Circunferência inscrita em um quadrado de lado $2L$	36
5.2	Circunferência inscrita em um quadrado de lado $2L$	38
5.3	Organograma da DSMC	43
6.1	Transferência de calor e fluxo plano de Couette combinados.	51
6.2	Gás unico de Hélio ($C_0=0$) e com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0, 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0, 2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1, 5$	60

6.3 Gás unico de Hélio (C0=0) e com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$ 61

6.4 Mistura gasosa de Argonio (C0=0,25) e Helio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$ 62

6.5 Mixtura de Argônio (C0=0,25) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$ 63

6.6 Mixtura de Argônio (C0=0,5) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$ 63

6.7 Mixtura de Argônio (C0=0,5) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$ 64

- 6.8 Mistura de Argônio ($C_0=0,75$) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$ 64
- 6.9 Mistura de Argônio ($C_0=0,75$) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$ 65
- 6.10 Gás único de Argônio ($C_0=1$) com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$. 65
- 6.11 Gás único de Argônio ($C_0=1$) com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$. 66
- 6.12 Gás único de Hélio ($C_0=0$) com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 66

6.13 Gás único de Hélio (C0=0) com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 67

6.14 Mistura gasosa de Argônio (C0=0,25) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 67

6.15 Mistura gasosa de Argônio (C0=0,25) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 68

6.16 Mistura gasosa de Argônio (C0=0,5) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 68

6.17 Mistura gasosa de Argônio (C0=0,5) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 69

- 6.18 Mistura gasosa de Argônio ($C_0=0,75$) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 69
- 6.19 Mistura gasosa de Argônio ($C_0=0,75$) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 70
- 6.20 Gás único de Argônio ($C_0=1$) com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 70
- 6.21 Gás único de Argônio ($C_0=1$) com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$ 71

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Revisão Bibliográfica	4
2.1	Fluxo plano de Couette	5
2.2	Fluxo de calor	7
3	Conceitos básicos	10
3.1	Livre Caminho Médio	10
3.2	Livre Caminho equivalente	10
3.3	Número de Knudsen	11
3.4	Parâmetro de rarefação	12
3.5	Função distribuição de velocidade	13
3.5.1	Definição	13
3.5.2	Função Maxwelliana	15
3.5.3	Momentos da função de distribuição	17
3.5.4	Velocidade hidrodinâmica	18
3.5.5	Cisalhamento	19
3.5.6	Temperatura	20

3.5.7	Fluxo de calor	20
3.6	Equação de Boltzmann	22
4	Metodologia	24
4.1	Fluxo Plano de Couette	24
4.2	fluxo de calor entre duas placas paralelas	28
4.3	Potencial de interação intermolecular	30
4.3.1	Definição	30
4.3.2	Potencial de esferas rígidas	31
4.3.3	Potencial <i>Ab initio</i>	32
5	O método da Simulação Direta de Monte Carlo	34
5.1	Breve contexto histórico sobre o método de Monte Carlo	34
5.2	Exemplo de uma aplicação do método de Monte Carlo	36
5.3	Ideias principais da DSMC	38
5.4	Algoritmo	41
5.4.1	Partículas modelo	41
5.4.2	Organograma da DSMC	42
5.4.3	Movimento das partículas	42
5.4.4	Interação gás superfície	42
5.4.5	Indexação das partículas	44
5.4.6	Colisões	45
5.4.7	Quantidades macroscópicas	47
5.4.8	Erros na DSMC	49
6	Proposta deste trabalho	50

<i>CONTEÚDO</i>	13
6.1 Abordagem do problema	50
6.2 Testes realizados com o programa desenvolvido	52
6.3 Resultados	55
7 Conclusão	74
Bibliografia.....	76
A Regime de molécula livre	80
A.1 Número de densidade n	80
A.2 Cisalhamento	83
A.3 Velocidade Hidrodinâmica u	86
A.4 Fluxo de Calor	89

Capítulo 1

Introdução

O problema de Couette bem como o de transferência de calor são caracterizados por um fluxo gasoso entre duas placas paralelas. Em Couette as placas apresentam a mesma temperatura e se movimentam com velocidades iguais em sentidos diferentes conforme a figura 4.1, e no problema de transferência de calor as placas apresentam uma diferença de temperatura ΔT e encontram-se em repouso, conforme ilustra a figura 4.3. Para resolver o problema de Couette, basta determinar o cisalhamento 3.20 e para solucionar o de transferência de calor é necessário obter a temperatura do gás entre as placas 3.21. Neste trabalho, será combinado o problema de Couette com o de transferência de calor 6.1 e o cisalhamento e o fluxo de calor serão apresentados.

Algumas aplicações da equação de Boltzmann (EB) em que não se pode desprezar a natureza molecular da matéria deram origem à linha de pesquisa em Dinâmica de Gases Rarefeitos. Mesmo em condições de ultra vácuo há um número significativo de partículas, cerca de $2,4 \times 10^{10}$ por m^3 , por isso o

problema de gases rarefeitos não pode ser desprezado em muitas aplicações na Engenharia Aerotermodinâmica, no desenvolvimento de nano e micro dispositivos, no sistema de desenvolvimento de vácuo, entre outros. É necessário conhecer o comportamento de um fluxo de gás rarefeito para que se possa quantificar grandezas microscópicas e macroscópicas.

Na área de nanotecnologia e de tecnologia de vácuo os principais problemas relacionados com a dinâmica de gases rarefeitos são: cálculo da taxa de fluxo de massa através de nano-tubos, cálculo da força de amortecimento de peças móveis e a troca de calor através do ar entre peças com temperaturas diferentes. Nessas situações o tamanho característico de escoamento é menor do que microns, ou seja, o número de Knudsen é grande, de modo que, nesse caso, os problemas devem ser resolvidos com base na função de distribuição das velocidades moleculares. Na área de pesquisa espacial, o tamanho característico de escoamentos é de alguns centímetros ou metros mas, o Livre Caminho Médio (LCM) em órbitas elevadas é maior do que um metro. Devido a este fato, torna-se necessário utilizar os métodos de dinâmica de gases rarefeitos para modelar os escoamentos de gases nestas condições [13].

A mais importante questão desse método é a simulação de colisões intermoleculares que requer o conhecimento do potencial de interação intermolecular. Existem alguns modelos de interação intermolecular tais como: esferas rígidas, Leonard-Jones, esferas rígidas variáveis, esferas moles variáveis [26]. O mais simples deles é o potencial de esferas rígidas que fornece resultados satisfatórios para várias espécies de fluxo de um único gás. Contudo, esse modelo não leva em conta a força de atração intermolecular que pode ser importante em algumas aplicações que envolvem fluxos não isotérmicos de

misturas gasosas e os demais dependem da necessidade de ajustar um ou mais parâmetros de modo a reproduzir os coeficientes de transporte. Somado a isso, a literatura dispõe de poucos dados de referência para escoamentos de misturas binárias de gases rarefeitos.

Recentemente, Sharipov e Strapasson [23] mostraram que é possível implementar qualquer potencial de interação intermolecular na SDMC. Até então, apenas alguns modelos de interação eram utilizados na técnica SDMC, tais como: esferas moles variáveis [12], esferas moles generalizadas [6] e esferas variáveis [16]. Mesmo conhecendo outros modelos de potenciais, implementá-los na (SDMC), não era uma tarefa fácil, pois o esforço computacional era muito grande e tornava o uso desses potenciais na (SDMC) impraticável.

Com a possibilidade de implementar outros potenciais na (SDMC), foi implementado um potencial de interação intermolecular na (SDMC) que independe de ajuste de parâmetros por meio de experiência. Ou seja, o cálculo do potencial *ab initio* [22] não utiliza dados experimentais. Nesses trabalhos foram calculados a composição química, perfil da velocidade, fluxo de calor, cisalhamento e temperatura do gás confinado entre as placas utilizando o potencial *ab initio* e o potencial de esferas rígidas e com as placas em repouso. As grandezas calculadas para ambos os potenciais foram comparadas e a discrepância entre os dados pode atingir até 15%, dependendo da grandeza analisada.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

A Simulação Direta de Monte Carlo (SDMC) é uma importante ferramenta no estudo de dinâmica de gases rarefeitos. Isto porque, com ela é possível reproduzir sistemas físicos compostos por um elevado número de variáveis e com isso obter dados numéricos que se relacionam com aquelas variáveis. Este trabalho utiliza a (SDMC) para reproduzir um sistema físico e assim calcular os coeficientes de transporte. Recentemente (2012), Sharipov e Strapasson [23], demonstraram a possibilidade de implementar um potencial arbitrário na (SDMC).

Para simular um fluxo gasoso no amplo intervalo do parâmetro de rarefação (δ) é necessário escolher um potencial de interação intermolecular a fim de modelar a interação entre as partículas que compõem o gás. Embora existam vários potenciais de interação intermolecular distintos, escolher um deles não é uma tarefa fácil. Muitos potenciais requerem o uso de parâmetros de ajuste que são obtidos empiricamente, outros não fornecem resultados satisfatórios em fluxo não isotérmico ou ainda, não leva em conta a atratividade

entre as partículas e isso dificulta a escolha do potencial. Somado a isso, os potenciais utilizados na DSMC eram restritos devido ao alto esforço computacional. Comumente, o potencial utilizado com maior frequência era o potencial de esferas rígidas (HS) que possui um baixo esforço computacional e relativa facilidade para programação, contudo esse potencial não leva em conta forças atrativas entre os constituintes do gás.

A solução a esse impasse foi, primeiramente, a possibilidade da implementação de um potencial arbitrário na (SDMC).

2.1 Fluxo plano de Couette

O fluxo plano de Couette foi idealizado primeiramente por Maurice Marie Alfred Couette (1858-1943), professor de Física da Universidade de Angers na França. Anos mais tarde, em 1962, Roger Willis [30] publicou uma análise entre a teoria cinética e o fluxo de Couette linearizado.

Em 1965, Cercignani e Pagani publicaram um artigo [4] abordando três diferentes problemas, dentre eles o fluxo plano de Couette. O método utilizado por eles para obterem o tensor de cisalhamento foi o princípio variacional que é válido também nos modelos cinéticos linearizados propostos por Gross e Jackson [8] e Sirovich [25]. Quatro anos depois, Bhatnagar e Srivastava [2] publicaram dados envolvendo a transferência de calor no fluxo plano de Couette com base no método Bhatnagar-Gross-Krook linearizado.

Décadas depois, em 1995, Ueno [28] também propôs um método para resolver o problema de Couette linearizado. Diferente de seus predecessores, Ueno utilizou a equação linearizada de Boltzmann em um método proba-

bilístico. Quatro anos após a publicação do Ueno, Lemos e Velasco [14] restringiram seus estudos ao salto de temperatura do gás que ocorre próximo a superfície da parede e o deslizamento da velocidade na fronteira entre o gás e as placas no problema de Couette adotando a equação de Boltzmann como método. No ano seguinte, Marques, Kremer e Sharipov [15] publicaram o mesmo problema descrito por Lemos e Velasco, mas com um método diferente. Eles utilizaram as equações de campo do meio contínuo.

Em 2004, Sharipov, Cumin e Kalempa [19] descreveram o comportamento de uma mistura gasosa no fluxo plano de Couette. Nesse problema, foram calculados o cisalhamento e o perfil da velocidade da mistura gasosa.

Em 2013, Sharipov e Strapasson [24], publicaram dados numéricos referente ao cisalhamento de uma mistura gasosa no fluxo plano de Couette com base nos potenciais *Ab initio* e de esferas rígidas. Os dados desse artigo de esferas rígidas, serão utilizados como dados de referência neste trabalho e por isso estão esboçados na tabela 2.1.

2.2 Fluxo de calor

Bassanini, Cercignani e Pagani [1], em 1967, publicaram um artigo relacionando a transferência de calor entre placas paralelas supondo uma acomodação completa do gás, ou seja, quando a interação do gás com a superfície é suposta como sendo uma reflexão difusa. No ano seguinte, Huang [9] publicou a transferência de calor no fluxo de Couette para o caso não linear, isto é quando ΔT é elevado para gás único. Anos mais tarde, em 2007, Sharipov, Cumin e Kalempe [20] publicaram um artigo relacionando o fluxo de calor e o perfil da temperatura no amplo intervalo do número de Knudsen. O problema foi resolvido por meio do modelo S [18, 21] com o método das velocidades discretas.

Em 1985, Valougeorgis e Thomas [29] descrevem o fluxo de calor entre placas paralelas para uma mistura gasosa por meio da equação cinética. Em 2004, Garcia e Siewert resolveram o problema do fluxo de calor entre placas paralelas e, em mistura gasosa, com base no modelo de McCormack. Em 2014, Sharipov e Strapasson [27], obtiveram o fluxo de calor para mistura gasosa e gás único no amplo intervalo do parâmetro de rarefação δ . O método utilizado por eles foi a simulação direta de Monte Carlo.

Os dados de referência para o fluxo de calor aplicado ao problema de Couette, no amplo intervalo do parâmetro de rarefação δ estão publicados em [27] e são dados pela tabela 2.2.

Tabela 2.1: Cisalhamento adimensional Π para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$.

δ	Π															
	$C_0 = 0$				0,25				0,5				0,75			
	2		0,2		2		0,2		2		0,2		2		0,2	
	$\frac{u_w}{v_0} = 0,2$															
0,01	0,5587	0,5623	0,5266	0,5292	0,4960	0,4983	0,4775	0,4794	0,5587	0,5622	0,5266	0,5292	0,4960	0,4983	0,4775	0,4794
0,1	0,5209	0,5325	0,4911	0,5010	0,4639	0,4711	0,4477	0,4520	0,5210	0,5326	0,4911	0,5010	0,4639	0,4711	0,4477	0,4520
1	0,3402	0,3556	0,3263	0,3394	0,3132	0,3230	0,3053	0,3125	0,3402	0,3554	0,3263	0,3394	0,3132	0,3230	0,3053	0,3125
10	0,0834	0,0921	0,0824	0,0895	0,0815	0,0875	0,0810	0,0865	0,0834	0,0921	0,0824	0,0895	0,0815	0,0875	0,0810	0,0865
20	0,0455	0,0501	0,0452	0,0489	0,0449	0,0481	0,0446	0,0479	0,0455	0,0501	0,0452	0,0489	0,0449	0,0481	0,0446	0,0479
40	0,0238	0,0261	0,0237	0,0255	0,0236	0,0252	0,0236	0,0252	0,0238	0,0261	0,0237	0,0255	0,0236	0,0252	0,0236	0,0252

Capítulo 3

Conceitos básicos

Nesse capítulo serão abordados os conceitos básicos da Dinâmica dos Gases Rarefeitos(DGR).

3.1 Livre Caminho Médio

O livre Caminho Médio (λ) é definido como a distância média percorrida por uma partícula entre duas colisões sucessivas.

3.2 Livre Caminho equivalente

Com o objetivo de descrever analiticamente a interação entre duas partículas (atração e repulsão) separadas por uma distância, medida de centro a centro, surge o conceito de potencial de interação intermolecular. Esse potencial, pode ser classificado como potencial de curto ou longo alcance.

No potencial de curto alcance assume-se que a interação irá ocorrer apenas a uma distância inferior ao parâmetro de impacto b_M . No potencial de longo

alcance, todas as partículas interagem umas com as outras independente da distância que as separam.

O livre caminho médio é bem definido para potenciais de curto alcance, contudo para potenciais de longo alcance sua expressão analítica fornece como resultado um livre caminho nulo. Uma solução para esse impasse, é o livre caminho equivalente (LCE), que é definido por:

$$l = \frac{ap_0}{\mu v_0}. \quad (3.1)$$

Em que a é um comprimento característico do escoamento, p_0 , v_0 e μ são, respectivamente, a pressão, velocidade mais provável e viscosidade do gás no estado de equilíbrio. Outra vantagem do (LCE) é estar relacionado com grandezas que podem ser obtidas facilmente via experimento.

A pressão é dada pela equação de estado para gases diluídos por:

$$p_0 = nk_B T_0, \quad (3.2)$$

e a viscosidade do gás é obtida por:

$$\mu = \frac{1}{3}nm\lambda v_0. \quad (3.3)$$

3.3 Número de Knudsen

Em qualquer fluxo gasoso é necessário conhecer a rarefação do gás para escolher um ferramental matemático apropriado a fim de resolver o problema em questão. O procedimento adotado para resolver um problema de fluxo

gasoso sobre a superfície de uma aeronave em baixa altitude não é o mesmo em um escoamento gasoso em torno de um satélite em órbita. Isso ocorre porque as rarefações são diferentes. O primeiro cientista que percebeu esse comportamento anômalo entre dois fluxos gasosos com diferentes rarefações foi Martin Hans Christian Knudsen (1871-1949), por isso, em sua homenagem, o número que define a rarefação de um determinado fluxo gasoso é conhecido por número de Knudsen (Kn) e é definido por:

$$Kn = \frac{\lambda}{a} \quad (3.4)$$

em que λ é o livre caminho médio e a é um comprimento característico do escoamento gasoso.

3.4 Parâmetro de rarefação

Outra maneira bastante recorrente para definir a rarefação de um gás é usar o parâmetro de rarefação (δ), que é definido por:

$$\delta = \frac{a}{l} \quad (3.5)$$

em que a é o comprimento característico e l é o (LCE) dado por (3.1). Por convenção, o parâmetro de rarefação será adotado nesse trabalho para denotar a rarefação de um gás.

Dado um fluxo gasoso, ele pode ser classificado em três diferentes regimes: O regime de moléculas livres ($\delta \ll 1$), regime hidrodinâmico ($\delta \gg 1$) e o regime de transição ($\delta \approx 1$).

O regime de moléculas livres é caracterizado pela ausência de interação entre as partículas que compõem o gás. Isso ocorre, pois, o livre caminho médio é maior que o comprimento característico do escoamento. Por outro lado, tem-se o regime hidrodinâmico (ou do meio contínuo) em que o livre caminho médio entre as partículas é consideravelmente menor que o comprimento característico a . Nesse regime, as interações entre as partículas não podem ser desprezadas e há as equações do meio contínuo que modelam matematicamente o fluxo gasoso. Um regime intermediário é o regime de transição, que apresenta um livre caminho médio da ordem do comprimento característico a , assim, o LCM não é tão grande para que se possa desprezar as interações entre as partículas e nem tão pequeno para usar as equações do meio contínuo.

3.5 Função distribuição de velocidade

Nesta seção será apresentada a função de distribuição de velocidades (FDV) para um gás em equilíbrio bem como os momentos decorrentes da (FDV).

3.5.1 Definição

Em aplicações do meio contínuo ($\delta \gg 1$), o fluxo gasoso (entre outros fluidos) comportam-se como se fossem um único corpo, desta forma, cada partícula que compõe esse fluxo apresenta a mesma velocidade. O mesmo não ocorre em outras aplicações em que o gás está submetido a baixas pressões, com isso surge a necessidade em elaborar uma abordagem em que é levado

em consideração a velocidade de cada partícula do fluxo gasoso.

Mesmo em condições de ultra vácuo, há um número significativo de partículas de modo que é impraticável uma abordagem analítica devido ao elevado número de variáveis. Uma solução a esse impasse é abordar a velocidade, bem como a posição das partículas, de modo estatístico. Desta maneira, surge a função de distribuição de velocidades.

Considere um ponto qualquer $\mathbf{r} = (r_1, r_2, r_3)$ no espaço físico tri-dimensional por onde flui o gás. Pode-se definir um elemento de volume $d^3\mathbf{r} = dr_1 dr_2 dr_3$, centrado em \mathbf{r} , de modo que a maioria das partículas próximas a \mathbf{r} , e internas ao elemento de volume, apresentam velocidade $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)$, em um dado instante de tempo. São necessárias seis dimensões, três da posição e outras três da velocidade, para descrever o estado de uma partícula em um dado instante t . As diferentes velocidades das partículas contidas no elemento de volume $d^3\mathbf{v}$ geram o espaço das velocidades que, embora não seja um espaço físico, é tri-dimensional. Desse modo, define-se $d^6N (= f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v})$ como sendo o número esperado de partículas no interior do elemento de volume dV . A função distribuição de velocidade $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ é então definida por:

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{d^6N}{d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v}}. \quad (3.6)$$

Levando-se em consideração o elevado número de partículas, é necessário impor uma nova condição: que as partículas se movimentam sem interagir uma com as outras, ou seja, elas se movimentam livremente ainda que houvesse uma colisão binária entre partículas, ela ocorreria por um curto intervalo de tempo e, portanto, poderia ser assumido como desprezível seu

tempo de interação.

3.5.2 Função Maxwelliana

Suponha um gás no interior de um recipiente hermeticamente fechado. Se não houver transferência de calor entre as partículas que compõe o gás, então pode se dizer que o gás está em equilíbrio. Qualquer gás nessa situação obedece a função de distribuição de velocidades de Maxwell, ou simplesmente função maxwelliana, dada por:

$$f^M(\mathbf{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right), \quad (3.7)$$

em que o número de densidade (n) e a temperatura (T) são considerados constantes em todo o interior do recipiente.

A função distribuição da velocidade (FDV) apresenta extrema relevância em (DGR), uma vez que ela contém todas as informações referentes ao fluxo gasoso. Assim, a fim de simplificar os cálculos futuros, será adotada a seguinte notação neste trabalho:

$$\int \int \int [*] d^3\mathbf{v} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} [*] dv_1 dv_2 dv_3 = \int [*] d^3\mathbf{v} \quad (3.8)$$

Em linguagem coloquial é comum referir-se a equação acima como a integral de [*] sobre todo o espaço da velocidade.

Ao substituir [*] por (3.6) na equação acima (3.8), obtém-se o número de

densidade (n), que pode ser denotado por:

$$n(t, \mathbf{r}) = \int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3v \quad (3.9)$$

Ao efetuar uma mudança de base, das coordenadas cartesianas para coordenadas esféricas, pode-se expressar o vetor \mathbf{v} da seguinte maneira:

$$v_1 = v \operatorname{sen}(\varphi) \cos(\theta), \quad v_2 = v \operatorname{sen}(\varphi) \operatorname{sen}(\theta), \quad e \quad v_3 = v \cos(\varphi). \quad (3.10)$$

Em que $\theta \in [0, 2\pi]$ e $\varphi \in [0, \pi]$ são os ângulos determinados pela direção da velocidade molecular e v pode variar de zero ao infinito. Dessa forma, o elemento de volume é dado por:

$$d^3\mathbf{v} = v^2 dv \operatorname{sen}(\varphi) d\varphi d\theta \quad (3.11)$$

A integral da (FDV) com respeito aos ângulos θ e φ fornece a função distribuição de velocidades (FDV), e no equilíbrio é dada por:

$$f_v^M(v) = v^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi f^M(\mathbf{v}) \operatorname{sen}\theta d\theta d\varphi = 4\pi n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right), \quad (3.12)$$

de modo que a equação (3.9) combinada com a equação acima forneça a seguinte igualdade:

$$\int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v} = \int_0^{+\infty} f_v(t, \mathbf{r}, v) dv = n(\mathbf{r}, t) \quad (3.13)$$

Assim, a função $f_v(t, \mathbf{r}, v) d^3\mathbf{r} dv$ representa o número de partículas esperado

no elemento de volume $d^3\mathbf{r}$ do espaço físico e com velocidade v pertencente ao intervalo $[v, v + dv]$.

Ao derivar a equação (3.12), em relação a v , e igualar a zero, obtém-se o valor máximo de $f_v(v)$ que é denotado por:

$$v_m = \sqrt{\frac{2k_B T_0}{m}}. \quad (3.14)$$

Aqui, v_m é a velocidade mais provável (VMP) de encontramos no gás e T_0 é a temperatura de equilíbrio.

3.5.3 Momentos da função de distribuição

Nesta seção aparecerão três diferentes velocidades associadas com as partículas que compõem o fluxo gasoso, são elas: a velocidade molecular (\mathbf{v}), a velocidade hidrodinâmica (\mathbf{u}) e a velocidade peculiar \mathbf{V} . A fim de facilitar a compreensão é possível realizar uma alusão entre o fluxo gasoso com um enxame.

Considere um enxame se deslocando no espaço tri-dimensional. Um indivíduo, em repouso, localizado na superfície terrestre e próximo ao enxame, perceberá o enxame se movimentando com uma velocidade ao longo do espaço tridimensional. Por razões óbvias, embora o enxame desloque com uma velocidade definida em relação ao observador, a velocidade de cada abelha não é a mesma daquela do enxame, ou seja, se o observador convergir sua atenção para apenas uma determinada abelha, irá perceber claramente uma velocidade relativa entre a velocidade do enxame e a velocidade da abelha. A velocidade da abelha em relação ao observador é a velocidade molecular (\mathbf{v});

a velocidade do enxame, também em relação ao observador, é a velocidade hidrodinâmica (\mathbf{u}) e a velocidade relativa entre elas é a velocidade peculiar \mathbf{V} definida por:

$$\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}. \quad (3.15)$$

Saindo do enxame, e retomando o fluxo gasoso das partículas, pode-se definir \mathbf{v} como a velocidade molecular da partícula v e \mathbf{u} é a velocidade hidrodinâmica do fluxo gasoso, ambas com referencial em repouso na superfície terrestre. E \mathbf{V} é a velocidade peculiar, que é definida por (3.15).

Entende-se por $\langle \psi \rangle$ como sendo o valor médio de uma grandeza qualquer ψ por unidade de volume, e é definido por:

$$\langle \psi \rangle = \int \psi(\mathbf{v}) f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v} \quad (3.16)$$

Em que $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ é a função de distribuição de velocidades definida em (3.6). O conceito de valor médio de uma função $\langle \psi \rangle$ será de grande relevância para obter os momentos da função distribuição de velocidades.

3.5.4 Velocidade hidrodinâmica

Utilizando a definição (3.16), pode-se definir analiticamente a velocidade hidrodinâmica \mathbf{u} por:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{n} \langle v \rangle, \quad (3.17)$$

em que n é dado por 3.9.

3.5.5 Cisalhamento

Analogamente, é possível definir o tensor de cisalhamento (do inglês Shear Stress) em termos da média (3.16). Para isso, considere a definição de tensor de pressão $\mathbf{P}(t, \mathbf{r})$ denotada por:

$$\mathbf{P}(t, \mathbf{r}) = \langle m \mathbf{V} \mathbf{V} \rangle, \quad (3.18)$$

onde $\mathbf{V} \mathbf{V}$ é um tensor de categoria 2, definido por:

$$\mathbf{V} \mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_1^2 & V_1 V_2 & V_1 V_3 \\ V_2 V_1 & V_2^2 & V_2 V_3 \\ V_3 V_1 & V_3 V_2 & V_3^2 \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

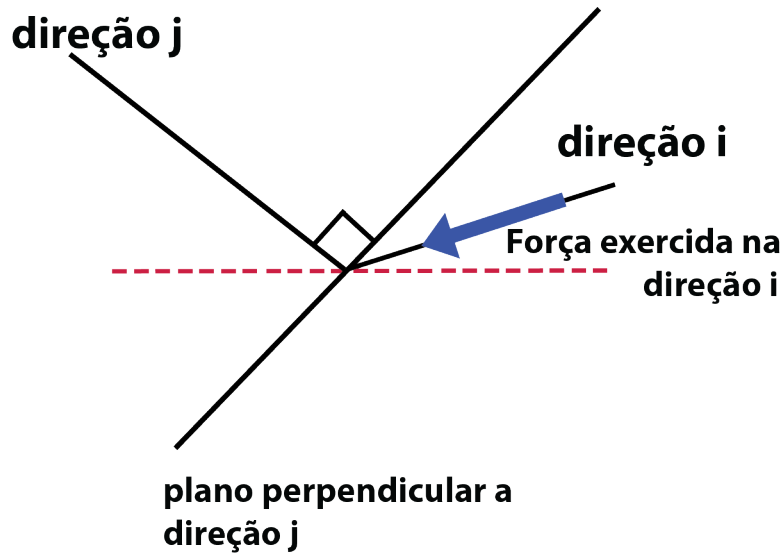


Figura 3.1: Esquema para o Cisalhamento P_{ij} .

P_{ii} significa a força, por unidade de área, exercida na direção i e sobre uma superfície plana do gás perpendicular a direção i . Nesse caso, em que

os índices são iguais, obtém-se a pressão hidrostática dividindo o traço da matriz (3.19) por 3. Por outro lado, se i for diferente de j , P_{ij} é a força, por unidade de área, exercida na direção i sobre uma superfície plana do gás perpendicular a direção j , como ilustra a figura (3.1). Nesse caso, em que os índices são diferentes, tem-se o Cisalhamento P_{12} :

$$P_{12} = P = \int mV_1V_2f(\mathbf{v})d^3\mathbf{v}. \quad (3.20)$$

3.5.6 Temperatura

A temperatura da mistura gasosa $T(t, \mathbf{r})$ é dado por:

$$T(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{3nk_B} \langle V^2 \rangle. \quad (3.21)$$

3.5.7 Fluxo de calor

O fluxo de calor \mathbf{q} é definido via a velocidade peculiar por:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \left\langle \frac{mV^2}{2} \mathbf{V} \right\rangle. \quad (3.22)$$

Para misturas gasosas binárias, composto apenas pelas espécies 1 e 2, tem-se o número de densidade (n) definido por:

$$n = n_1 + n_2, \quad (3.23)$$

em que n_1 e n_2 são dados por (3.9).

Aqui, surge a necessidade de dois novos conceitos. O primeiro deles, é a

composição de cada espécie, dadas por:

$$C_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2}, \quad C_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2}, \quad (3.24)$$

em que C_1 é a composição da espécie 1, e C_2 é a composição da espécie 2.

O outro conceito é a massa molecular média m da mistura que é definida por:

$$m = C_0 m_1 + (1 - C_0) m_2, \quad (3.25)$$

em que m_1 e m_2 são, respectivamente, as massas moleculares das espécies 1 e 2. C_0 representa a composição da espécie 1 no momento em que se estabelece o equilíbrio entre os constituintes do gás.

Analogamente ao caso da densidade numérica para mistura, dado em (3.23), a média de uma função bem como o Cisalhamento são dados, respectivamente, por:

$$\langle \psi \rangle = \langle \psi \rangle_1 + \langle \psi \rangle_2, \quad (3.26)$$

e

$$P = P_1 + P_2, \quad (3.27)$$

onde $\langle \psi \rangle_1$ e P_1 são obtidos, respectivamente, por (3.16) e (3.20).

Assim como nos casos anteriores, o fluxo de calor \mathbf{q} de uma mistura gasosa é a soma do fluxo de calor da espécie 1 com o da espécie 2. Matematicamente, pode ser denotado por:

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \quad (3.28)$$

onde \mathbf{q}_1 e \mathbf{q}_2 podem ser obtidos por (3.22).

3.6 Equação de Boltzmann

Embora a equação de Boltzmann tenha uma ampla aplicabilidade em (DGR), não será o foco deste trabalho e, por isso, será abordada de maneira pouco aprofundada.

Como mencionado em parágrafos anteriores, com a função (FDV) é possível obter algumas grandezas relacionadas ao gás. Para situações em que as partículas que compõem o gás estão em um estado de equilíbrio a função de distribuição de Maxwell, dada por (3.7), é bem definida. Contudo, no caso do gás estar fora do equilíbrio, é necessário um ferramental matemático para descrever a evolução temporal da (FDV). A esse ferramental é dado o nome, em homenagem a Ludwig Eduard Boltzmann, de equação de Boltzmann (EB).

Antes de enunciar a (EB) é necessário estabelecer algumas considerações iniciais. A primeira delas é que existam apenas colisões binárias entre as partículas. Outra condição é considerar o caos absoluto, ou seja, supõe a existência de uma distribuição estatística das velocidades, assim como ocorre com a (FDV). Algumas aplicações requerem o uso de uma força externa a fim de modelar mais precisamente um fluxo gasoso, contudo a existência de força externa será descartada nesse trabalho e, com isso, é possível enunciar a (EB) da seguinte maneira:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f = Q(f, \mathbf{v}). \quad (3.29)$$

Aqui, $Q(f, \mathbf{v})$ é a integral de colisões [7] e está relacionada as colisões inter-

moleculares das partículas. O operador nabla (∇_r) é definido por:

$$\nabla_r = e_i \frac{\partial}{\partial r_i}, \quad (3.30)$$

e a notação ($\mathbf{v} \cdot \nabla_r$) é definida por:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_r = v_i \frac{\partial}{\partial r_i}. \quad (3.31)$$

Capítulo 4

Metodologia

Neste capítulo será definido o fluxo plano de Couette e a transferência de calor bem como as grandezas associadas nesses clássicos problemas da mecânica dos fluidos.

4.1 Fluxo Plano de Couette

Considere duas placas paralelas e separadas por uma distância a , conforme ilustra a figura (4.1). A placa à esquerda, fixada em $r_1 = -a/2$, apresenta movimento descendente com velocidade constante e igual a $u_w/2$. A outra placa está fixada em $r_1 = +a/2$ e apresenta movimento ascendente e, também, com módulo da velocidade igual a $u_w/2$ de modo que a velocidade relativa entre as placas seja u_w e com r_1 e r_2 denotando os eixos cartesianos. Ambas as placas possuem a mesma temperatura, e por essa razão não será abordado o fluxo de calor entre as placas nessa seção.

As grandezas a serem determinadas nesse problema são o Cisalhamento

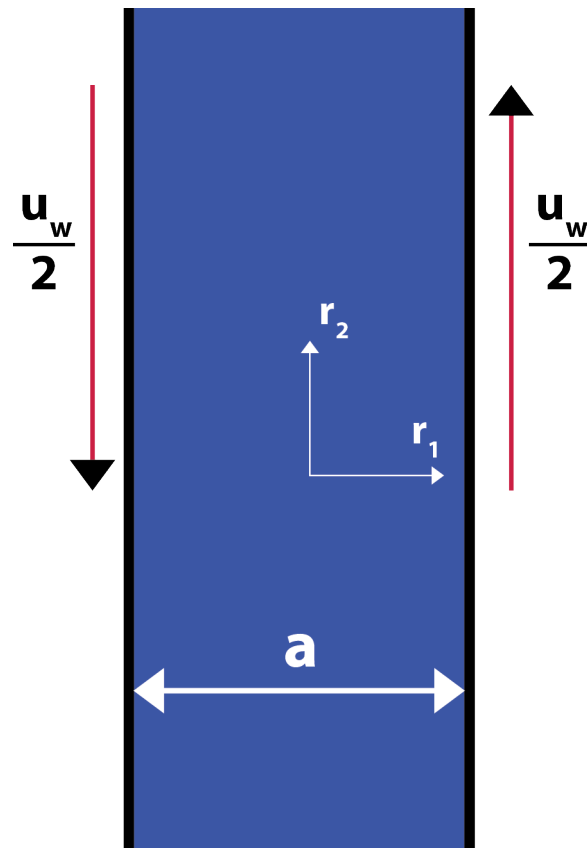


Figura 4.1: Esquema das coordenadas cartesianas r_1 e r_2 do fluxo planar de Couette.

(P_{12}), o perfil da velocidade hidrodinâmica (u) e a temperatura do gás T . Ao considerar que o gás confinado entre as placas está no regime de moléculas livres, o termo colisional da equação de Boltzmann (3.29) desaparece e se reduz a:

$$v_1 \frac{\partial f_1}{\partial x} = 0. \quad (4.1)$$

Desse modo, a (FDV) depende apenas da velocidade e por isso $f = (v)$. Aqui, é adotado o espalhamento difuso na colisão das partículas com a placa. Ou seja, independente do ângulo formado entre a direção da partícula e a placa antes da colisão, independente da velocidade da partícula na iminência

de atingir a placa, a sua trajetória de reflexão é equiprovável em um universo de direções possíveis, ou seja a trajetória de reflexão é aleatória. Isso ocorre devido a imperfeições na superfície, conforme ilustra a figura 4.2.

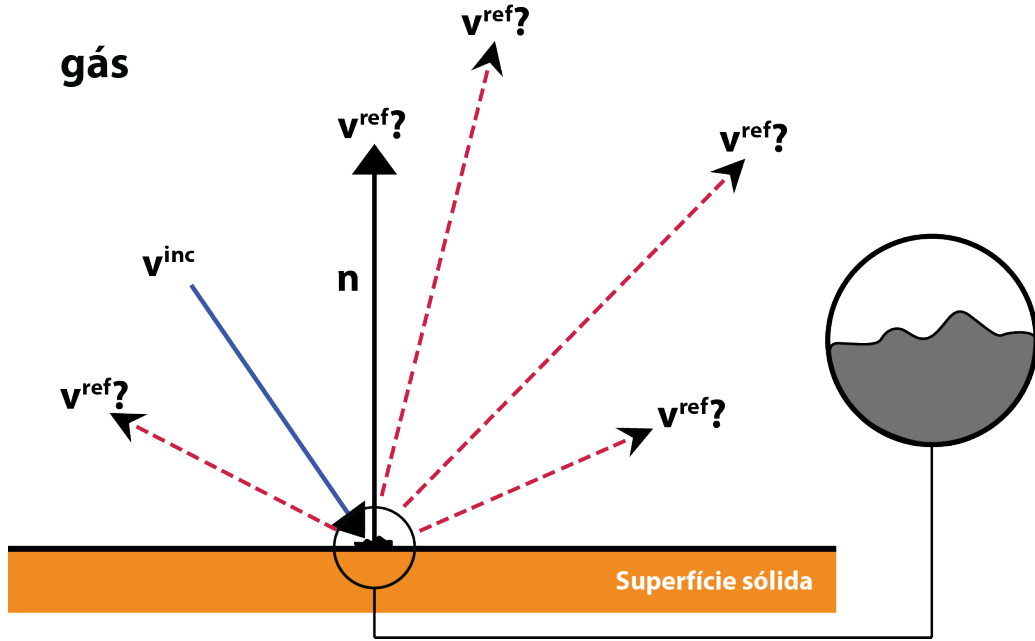


Figura 4.2: trajetória da partícula após a colisão.

As partículas que se movem da placa à esquerda para a placa à direita são caracterizadas por $f_+(\mathbf{v})$ que é definido na metade no espaço da velocidade \mathbf{v} , ou seja: $v_1 > 0$. Analogamente, as partículas que saem da placa esquerda para a placa direita são determinadas por $f_-(\mathbf{v})$ na outra metade do espaço da velocidade, ou seja: $v_1 < 0$. Desse modo, a (FDV) de Maxwell pode ser escrita como:

$$f_{\pm}(\mathbf{v}) = n_{\pm} \left(\frac{m}{2\pi k_B T_{\pm}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{m (v_1^2 + (v_2 \mp u_w/2)^2 + v_3^2)}{2k_B T_{\pm}} \right), \forall v_1 \geq 0 \quad (4.2)$$

Substituindo a expressão acima em (3.9), obtém-se o número de densidade

(n_0) que é o mesmo quando o sistema está em equilíbrio, ou seja, as placas estão em repouso. Procedendo de forma similar, ao substituir (4.2) em (3.17) obtém-se com relativa facilidade que a segunda componente da velocidade hidrodinâmica é nula ($u_2 = 0$). Assim, substituindo (4.2) no Cisalhamento (3.20) e na temperatura (3.21) obtém-se o tensor de cisalhamento e a temperatura que são dados, respectivamente, por:

$$P_{12} = \frac{u_w P_0}{\sqrt{\pi} v_0}, \quad (4.3)$$

e

$$T = T_0 \left[1 + \frac{1}{6} \left(\frac{u_w}{v_0} \right)^2 \right]. \quad (4.4)$$

Os cálculos analíticos do cisalhamento estão detalhados no Apêndice.

No regime hidrodinâmico, em que $\delta \gg 1$, pode ser usado as equações do meio contínuo para modelar analiticamente um escoamento gasoso. Contudo, no regime de transição ($\delta \approx 1$) as equações do meio contínuo são inapropriadas para descrever matematicamente o comportamento do gás. Dessa forma, pode-se usar a equação de Boltzmann (3.29) que possui alta complexidade de resolução devido ao termo colisional que é não nulo, ou um método numérico capaz de reproduzir o cisalhamento e a temperatura com erro relativamente baixo. O método numérico utilizado nesse trabalho a fim de reproduzir o cisalhamento e a temperatura (T) no amplo intervalo da rarefação (δ) é o método (SDMC), do inglês: “Direct Simulation Monte Carlo”.

4.2 fluxo de calor entre duas placas paralelas

Similar ao problema de Couette, visto na seção anterior, considere duas placas paralelas e situadas em $x = \pm a/2$. A placa esquerda, situada em $x = -a/2$, está a uma temperatura T_+ e a placa direita, situada em $x = +a/2$, está a uma temperatura T_- , de modo que a diferença de temperatura entre as placas é ΔT . A temperatura de cada placa é dada por:

$$T_+ = T_0 + \Delta T/2 \quad e \quad T_- = T_0 - \Delta T/2. \quad (4.5)$$

Como as placas estão com diferentes temperaturas, existe naturalmente um fluxo de calor (q_1) orientado da placa mais quente para a placa mais fria, conforme ilustra a figura (4.3).

Nesse caso, diferente do fluxo plano de Couette, as placas e o gás em seu interior estão em repouso, ou seja, não há movimento de uma porção do gás em comparação com outra. Com isso, as grandezas a serem determinadas nesse caso são o fluxo de calor (q_1) e a temperatura (T) do gás.

No regime de molécula livre, o número de densidade n_+ e n_- definido no semi-espço da velocidade molecular pode ser obtido através de duas condições: a primeira é a imobilidade do gás e a segunda expressa o fato do número de densidade ser o mesmo que na situação de equilíbrio. Com isso, obtém-se n_+ e n_- dados por:

$$n_- = 2 \frac{n T_+^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}}, \quad (4.6)$$

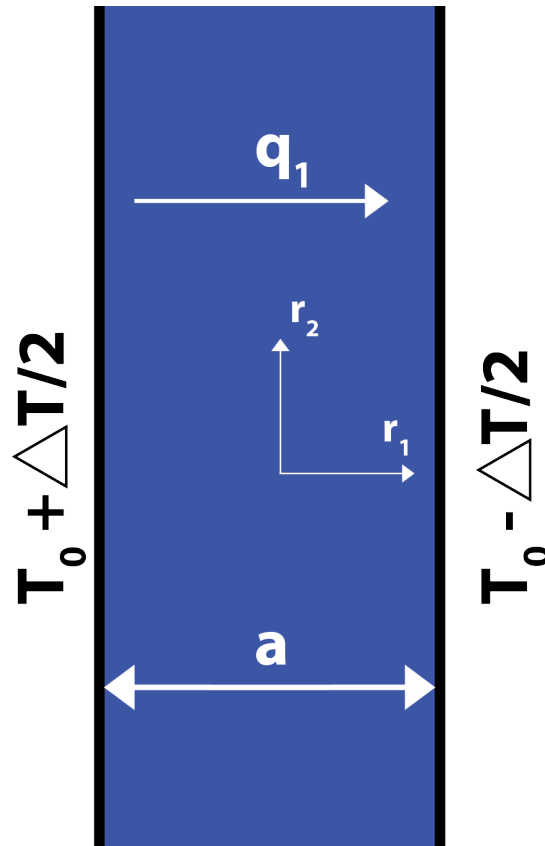


Figura 4.3: Esquema para transferência de calor entre duas placas.

e

$$n_+ = 2 \frac{nT_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}}. \quad (4.7)$$

Substituindo a equação (3.16) na definição de temperatura (3.21) e realizando alguns cálculos obtém-se a temperatura da mistura gasosa que é dado por:

$$T = (T_+ T_-)^{1/2}. \quad (4.8)$$

Agora, substituindo (3.16) em (3.22) obtém-se o fluxo de calor (q_1) entre as

placas que é denotado por:

$$q_1 = \frac{nm}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_0}{m} \right)^{3/2} \frac{\Delta T}{T_0}. \quad (4.9)$$

Os cálculos realizados para obter o número de densidade, temperatura e fluxo de calor no regime de moléculas livres estão no Apêndice. Embora exista a expressão do fluxo de calor [27], não é comum encontrarmos o cálculo detalhado dessa grandeza e por isso eu realizei os cálculos e deixei para quem precisar.

Semelhante ao fluxo plano de Couette, nos regimes de transição e hidrodinâmico a transferência de calor é abordado numericamente devido a complexidade de efetuar o cálculo analítico.

Os valores das grandezas envolvidas no problema de Couette bem como no problema de transferência de calor no amplo intervalo do parâmetro de rarefação estão detalhados no capítulo de levantamento bibliográfico.

4.3 Potencial de interação intermolecular

4.3.1 Definição

O potencial de interação intermolecular entre duas partículas tem um papel fundamental em (DGR). A sua importância é justificada pela necessidade de modelar as forças de atração/repulsão entre as partículas em uma colisão. $U(r)$ denota a energia potencial associada entre duas partículas separadas por uma distância r . Uma vez determinada a energia potencial $U(r)$

é possível obter a força F de atração/repulsão entre as partículas por:

$$\mathbf{F} = -\frac{dU(r)}{dr}. \quad (4.10)$$

4.3.2 Potencial de esferas rígidas

O potencial de esferas rígidas (HS), do inglês Hard Sphere, é o mais simples modelo de interação intermolecular e é definido por:

$$U(r) = \begin{cases} \infty & \text{em } r < d \\ 0 & \text{em } r > d, \end{cases} \quad (4.11)$$

onde r é a distância entre os centros das partículas e d é o diâmetro molecular das partículas que compõem o gás único. O diâmetro molecular dessas partículas são determinados experimentalmente por meio dos coeficientes de transporte como a viscosidade ou a condutividade térmica. Contudo, o diâmetro sofre alterações em função da temperatura e por isso é comum citar a temperatura para um dado diâmetro molecular. Fisicamente, o potencial de esferas rígidas (ER) significa que não há forças atuando entre as partículas quando a distância entre elas for maior que o diâmetro e, por outro lado, a força de repulsão entre as partículas é infinita quando a distância que as separam for inferior ao diâmetro d . Se as espécies forem diferentes e com diâmetro d_1 e d_2 , então $d = (d_1 + d_2)/2$.

4.3.3 Potencial *Ab initio*

Embora existam vários potenciais de interação intermolecular distintos, no geral, eles apresentam uma dependência de valores experimentais. O potencial *Ab initio*, denotado aqui por (AI), possui a vantagem de não depender de novos dados experimentais, contudo a sua expressão analítica é relativamente extensa.

O potencial (AI) foi desenvolvido com base em alguns conhecimentos da Mecânica Quântica e da Lei de Coulomb e algumas constantes, como número atômico, massa atômica, são necessárias para diferir as espécies gasosas. A expressão analítica para o potencial (AI) [11] é dado por:

$$U(r) = E_h \left[A e^{-a_1 R - a_2 R^2} - \sum_{n=3}^8 \frac{C_{2n}}{R^{2n}} \left(1 - e^{-bR} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(bR)^k}{k!} \right) \right], \quad R = \frac{r}{a_0} \quad (4.12)$$

As constantes contidas na expressão acima estão na Ref. [5], conforme a tabela 4.1.

Tabela 4.1: Parâmetros para o potencial (AI) usado na equação 4.12.

Parâmetros	He	Ar	He - Ar
A	6, 62002	82, 9493	23, 1693
a_1	1, 88553	1, 45485	1, 63329
a_2	0, 0639819	0, 0379929	0, 0462008
b	1, 85822	1, 62365	1, 63719
C_6	1, 46098	63, 7520	9, 38701
C_8	14, 1179	1556, 46	165, 522
C_{10}	183, 691	49437, 9	3797, 16
C_{12}	$3, 26527 \times 10^3$	$1, 16518 \times 10^5$	$1, 16518 \times 10^5$
C_{14}	$7, 64399 \times 10^4$	$4, 66258 \times 10^6$	$4, 66258 \times 10^6$
C_{16}	$2, 27472 \times 10^6$	$7, 24772 \times 10^9$	$2, 36861 \times 10^8$
r_0/a_0	5, 007	6, 375	5, 8921
$\epsilon/k_B (K)$	10, 631	139, 53	29, 7296

fonte: Referência [5].

Capítulo 5

O método da Simulação Direta de Monte Carlo

Não é difícil encontrar trabalhos, entre livros [3], [7] e artigos [24], que abordaram minuciosamente a Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC, do inglês: Direct Simulation Monte Carlo). Mesmo assim, devido a importância desse método para essa dissertação, será abordado detalhadamente o método e a (DSMC).

5.1 Breve contexto histórico sobre o método de Monte Carlo

Durante a Segunda Guerra Mundial (1939 – 1945) a interceptação de mensagens secretas se intensificaram e a dificuldade para descriptografar essas mensagens também, de modo que uma frase criptografada poderia levar anos para uma pessoa descriptografar devido ao elevado número de

5.1. BREVE CONTEXTO HISTÓRICO SOBRE O MÉTODO DE MONTE CARLO³⁵

possíveis combinações. Diante disso, foi desenvolvido, sobre as lideranças de John Mauchly and J. Presper Eckert (1943 – 1945)¹, o “Electronic Numerical Integrator And Computer”(ENIAC), um computador primitivo para os dias de hoje mas extraordinário para sua época. Com mais de 20m de comprimento e realizando 5000 operações por segundo, o ENIAC chamou a atenção do exército norte americano que em 1946, anunciava ao mundo a sua mais nova arma de guerra.

Paralelo a isso, cientistas do laboratório nacional de Los Alamos estavam trabalhando no desenvolvimento da bomba de hidrogênio e viram no ENIAC uma máquina capaz de trazer sólidas contribuições para o desenvolvimento da bomba ao permitir efetuar simulações de “voo” dos nêutrons durante o processo de fusão nuclear. Um ano mais tarde, em 1947, John von Neumann propôs um método detalhado de como implementar essa simulação levando em consideração que o “vôo” dos neutrons seria em direções aleatórias. Com isso, Nicholas Metropolis [17], membro do grupo de pesquisa, denominou esse método de MONTE CARLO em referência ao distrito de Mônaco e seus cassinos que carregam implicitamente a ideia de aleatoriedade.

Pouco mais de uma década depois, no ano de 1960, o método DSMC foi proposto por Bird [3] e desde então há vários trabalhos, em diferentes áreas da ciência, que utilizam essa poderosa ferramenta para resolver numericamente problemas relacionados à dinâmica de gases rarefeitos.

¹visto em: <http://www.columbia.edu/cu/computinghistory/eniac.html>

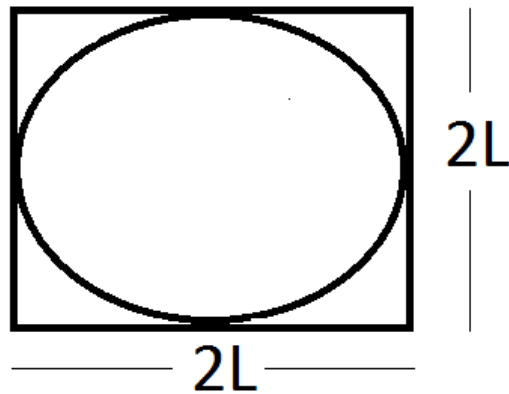


Figura 5.1: Circunferência inscrita em um quadrado de lado $2L$

5.2 Exemplo de uma aplicação do método de Monte Carlo

Para facilitar o entendimento do método de Monte Carlo será apresentado um exemplo trivial. Nesse exemplo, será calculado numericamente o número $\text{Pi}(\pi)$.

Antes de darmos início aos procedimentos computacionais que regem o método de Monte Carlo, é necessário determinar uma relação para π . Para isso, considere uma circunferência inscrita em um quadrado de lado $2L$, conforme mostra a figura 5.1.

A razão entre a área da circunferência (A_c), cujo raio vale L , e a área do quadrado (A_q), cujo lado mede $2L$, é dado por:

$$\frac{A_c}{A_q} = \frac{\pi L^2}{4L^2}, \quad (5.1)$$

simplificando os termos em comum, obtemos:

5.2. EXEMPLO DE UMA APLICAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO 37

$$\frac{A_c}{A_q} = \frac{\pi}{4}, \quad (5.2)$$

realizando algumas operações elementares, obtemos:

$$\pi = 4 \frac{A_c}{A_q}. \quad (5.3)$$

A relação 5.3 deixa evidente que o número π é quatro vezes a razão entre as áreas da circunferência e do quadrado, respectivamente. Dessa forma, conhecendo a razão entre as áreas é possível obter o número π ao multiplicá-la por 4.

A maneira computacional para obter a razão entre as áreas (5.3) é dividida em 5 diferentes passos:

- Fixar o vértice inferior esquerdo do quadrado, dado em (5.3), na origem do sistema cartesiano ortogonal.
- Gerar um número finito de pontos dentro do quadrado, conforme ilustra a figura 5.2, que está definido em $0 < x < 2L$ e $0 < y < 2L$.
- O número total de pontos gerados dentro do quadrado corresponde a área do quadrado (A_q).
- De todos os pontos gerados é de se esperar que a maioria deles estejam dentro da circunferência. O número de pontos contidos nela denota a área da circunferência (A_c).

Conhecendo a razão entre a área do quadrado A_q e da circunferência A_c , basta multiplicar por quatro para obtermos o valor numérico de π . Se a

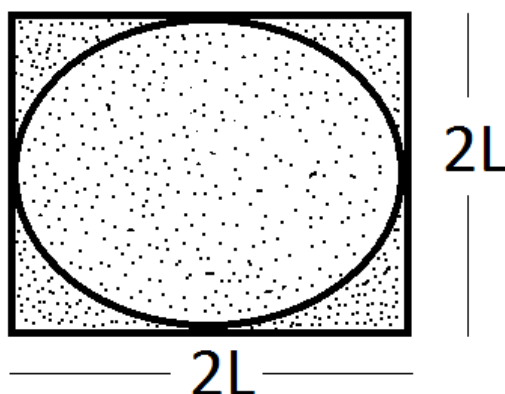


Figura 5.2: Circunferência inscrita em um quadrado de lado $2L$

aproximação obtida para π não for satisfatória, basta elevar o número de pontos gerados dentro do quadrado para diminuir o erro.

5.3 Ideias principais da DSMC

A (SDMC) é um método eficiente para simular as interações entre as partículas bem como entre as partículas e a superfície que confina o gás.

A interação entre partículas que compõem o fluxo está relacionada com a escolha do potencial de interação intermolecular. Se a escolha for por um potencial de longo alcance, então haverá interação mesmo sem ocorrer colisão entre os constituintes do gás.

O núcleo de espalhamento é responsável por determinar a trajetória da partícula imediatamente após a colisão. Assim, a interação entre a partícula e a superfície depende essencialmente das imperfeições da superfície, de modo que uma superfície plana, em nível molecular, livre de imperfeições e impurezas, requer o uso do núcleo de espalhamento especular. Nesse núcleo supõe-se que o ângulo de incidência, formado pela trajetória da partícula

e uma reta normal a placa, é igual ao ângulo de reflexão. Se a superfície apresentar imperfeições então é conveniente usar o núcleo de espalhamento difuso que reflete a partícula em uma trajetória aleatória, independente da trajetória incidente. Há ainda o caso em que a superfície apresenta um aspecto intermediário, nesse caso pode ser aplicado o núcleo de espalhamento difuso-especular que possui o coeficiente de acomodação para ajustar a predominância entre o núcleo especular e o difuso.

O cerne da (SDMC) são os números aleatórios. Embora não seja possível desenvolver um software que forneça números aleatórios, é comum a existência de programas que geram uma sequência de números distribuídos uniformemente e com período de repetição suficientemente grande para os propósitos da (SDMC). A sequência gerada possui infinitos termos e com isso, cada vez que os usuários desse software precisam de um número aleatório é necessário especificar o termo inicial cujo nome no jargão técnico é "semente".

É comum utilizar números aleatórios para resolver problemas numéricos, sobretudo na SDMC, e para isso é utilizada uma quantidade expressiva desses números, independente da complexidade do problema. Vamos supor que um usuário escolhe uma semente igual a 5, então ele irá obter um número aleatório correspondente a essa semente, no entanto, se esse usuário não mudar a semente para o próximo número aleatório, ele irá obter o mesmo número aleatório. Existem várias maneiras de inibir a duplicidade de números aleatórios iguais, a utilizada nesse trabalho atribui como semente a hora registrada no computador. Assim, como os números nunca são gerados simultaneamente, não haverá repetição.

A rigor, esses números são denominados números pseudo-aleatórios, contudo, muitas vezes sejam mencionados por números aleatórios e são aqui denotados por R_f , de modo que a cada vez que aparecer a notação R_f , será um número aleatório diferente dos anteriores.

Uma vez definido o núcleo de espalhamento e o potencial de interação intermolecular, o método (SDMC) pode ser dividido basicamente em três diferentes passos, a saber:

- O espaço entre as placas é dividido em células e nelas são inseridas um determinado número de partículas modelo com posição e velocidade armazenadas na memória do computador.
- O tempo é avançado em intervalos discretos de valor Δt . A cada incremento Δt é realizado o movimento e a colisão das partículas de maneira independente. Ou seja, o movimento e a colisão das partículas são calculados separadamente.
- É realizado o cálculo das grandezas macroscópicas associadas ao fluxo gasoso, tais como o cisalhamento, fluxo de calor e temperatura.

Após realizar diversas vezes esses passos, até o gás entrar em equilíbrio, finalmente calcula-se a média das grandezas macroscópicas sobre todas as interações realizadas.

Dessa forma, é possível obter valores numéricos de algumas grandezas macroscópicas e com alta precisão.

5.4 Algoritmo

Nesta seção, é apresentado o algoritmo para a elaboração de um programa de computador que simula um fluxo gasoso composto por gás único e mistura.

5.4.1 Partículas modelo

O número de partículas reais N_r em um fluxo gasoso, mesmo no regime de moléculas livres, é elevado. Armazenar todas essas partículas na memória do computador com o objetivo de simular o fluxo gasoso é inviável devido as limitações tecnológicas. Mesmo um computador desenvolvido com o mais alto nível tecnológico é incapaz de trabalhar com tantas variáveis. Devido a esse impasse, surge a necessidade da implementação das partículas modelo.

As N_r partículas reais serão representadas por N partículas modelo, de modo que a razão entre o número de partículas reais e modelo F_N é dado por:

$$F_N = \frac{N_r}{N}. \quad (5.4)$$

Suponha, a título de exemplo, a necessidade de efetuar a simulação de um fluxo gasoso composto por 100 partículas ($N=100$) em um computador que trabalha com no máximo, 20 partículas. Ao definir que cada partícula modelo representará cinco partículas reais ($F_N = 5$), tem-se 20 partículas modelos ($N = 20$). Por outro lado, se for definido que cada partícula modelo representará 25 partículas reais ($F_N = 25$) tem-se 4 partículas modelo ($N=4$).

5.4.2 Organograma da DSMC

O método DSMC pode ser resumido basicamente em uma série de passos ordenados. O organograma (5.3) exemplifica os passos bem como a sequência correta de cada um deles.

5.4.3 Movimento das partículas

O movimento das partículas ocorre em intervalos de tempo discretos. Nessa fase, em que a posição (\mathbf{r}) e a velocidade (\mathbf{v}) iniciais já foram definidas, a cada intervalo de tempo Δt todas as partículas percorrem uma distância $v\Delta t$ e a nova posição é calculada em função da posição anterior da seguinte maneira:

5.4.4 Interação gás superfície

Durante o movimento das partículas pode ocorrer de algumas delas colidirem com as placas e, nesse caso, como mencionado anteriormente, será admitido o núcleo de espalhamento difuso. A velocidade pós-colisional, entre a partícula e a superfície, é dividida em uma componente normal (v_n) e outra tangencial (v_t) à placa. A componente normal, segundo Bird, é dada por:

$$v_n = v_w \sqrt{-\ln R_f}, \quad (5.5)$$

em que v_w é a velocidade mais provável na temperatura da parede T_w . A componente tangencial às placas v_t , pode ser dividida em duas outras componentes, denotadas por v_{t1} e v_{t2} , que são perpendiculares entre si. Essas



Figura 5.3: Organograma da DSMC

componentes são dadas por:

$$v_{t1} = v_t \cos \theta, \quad (5.6)$$

e

$$v_{t2} = v_t \sin \theta. \quad (5.7)$$

A velocidade tangencial v_t bem como o ângulo θ são gerados aleatoriamente da seguinte maneira:

$$v_t = v_w \sqrt{-\ln R_f}, \quad \theta = 2\pi R_f, \quad (5.8)$$

com o ângulo θ gerado uniformemente entre o intervalo $[0, 2\pi]$. A velocidade mais provável na superfície da parede depende da temperatura T_w da parede e é dada por:

$$v_w = \sqrt{\frac{2k_B T_w}{m}}. \quad (5.9)$$

5.4.5 Indexação das partículas

Com o movimento das partículas é razoável supor que algumas saiam das células que estavam e se encaminhem a outra célula, é imprescindível atualizar as novas posições e velocidades delas para obter resultados fidedignos das grandezas macroscópicas. Assim, após cada colisão, a nova posição é utilizada para verificar se a partícula permaneceu na célula em que estava ou se ela saiu e, nesse caso, o número de partículas nas duas células é atualizado de maneira que a quantidade de partículas na nova célula é acrescido uma unidade ao passo que na primeira, onde estava a partícula antes da colisão,

é subtraído uma unidade.

5.4.6 Colisões

As colisões intermoleculares são calculadas em cada célula separadamente. Assim, após um intervalo de tempo Δt o número real de colisões (N_{col}) em cada célula de volume V_c e é dado por:

$$N_{col} = \frac{N^2}{2V_c} \sigma_t \bar{v} \Delta t, \quad (5.10)$$

em que \bar{v} é a velocidade relativa média entre as partículas e σ_t é a seção de choque.

Combinando a equação acima com a equação (5.4) é possível calcular o número de colisões das partículas modelo (N_{cm}) por:

$$N_{cm} = \frac{N_{col}}{F_N} = \frac{N^2 F_N}{2V_c} \sigma_t \bar{v} \Delta t, \quad (5.11)$$

assim, em cada célula com N partículas modelo há um número de colisões dado pela equação acima. Antes de realizar uma colisão é necessário saber se as partículas estão na mesma célula bem como se elas estão suficientemente próximas para colidir. O teste aceitação-rejeição, proposto por Bird, foi desolvido exatamente com esse propósito e sua expressão analítica é dado por:

$$\frac{\sigma_t v_r}{(\sigma_t v_r)_{max}} > R_f. \quad (5.12)$$

A seção de choque σ_t depende do potencial de interação intermolecular adotado, de modo que para o potencial de esferas rígidas tem-se uma expressão

constante para σ_t que leva em conta apenas o diâmetro molecular d da partícula e, dessa forma, o critério aceitação-rejeição se reduz a:

$$\frac{v_r}{(v_r)_{max}} > R_f. \quad (5.13)$$

Se o par de partículas pré-selecionado satisfizer o teste aceitação-rejeição esboçado acima, então a colisão entre as partículas é simulada. Do contrário, se o par não satisfizer o critério, é selecionado aleatoriamente um novo par de partículas e novamente são submetidas ao teste aceitação-rejeição. Esse ciclo terminará apenas quando o número de colisões for igual a N_{cm} .

Após a colisão binária é necessário conhecer a velocidade pós-colisional das partículas. Para isso, parte-se do princípio que a velocidade relativa v_r entre as partículas não varia durante a colisão e, com isso, é possível obter as componentes da velocidade relativa pós-colisional das partículas que são dadas por:

$$v'_{r1} = v_{r1} \cos \chi + (v_{r2}^2 + v_{r3}^2)^{1/2} \sin \epsilon \sin \chi, \quad (5.14)$$

$$v'_{r2} = v_{r2} \cos \chi + (v_r v_{r3} \cos \chi - v_{r1} v_{r2} \sin \epsilon)(v_{r2}^2 + v_{r3}^2)^{-1/2} \sin \chi, \quad (5.15)$$

$$v'_{r3} = v_{r3} \cos \chi - (v_r v_{r2} \cos \chi + v_{r1} v_{r3} \sin \epsilon)(v_{r2}^2 + v_{r3}^2)^{-1/2} \sin \chi. \quad (5.16)$$

O ângulo χ depende do potencial de interação intermolecular utilizado e o ângulo ϵ não. Para o potencial de esferas rígidas, esses ângulos são gerados aleatoriamente e são dados por:

$$\cos \chi = 2R_f - 1, \quad \epsilon = 2\pi R_f, \quad (5.17)$$

e as equações 5.14, 5.15 e 5.16 são reduzidas a:

$$v'_{r1} = v_r \cos\chi, \quad (5.18)$$

$$v'_{r2} = v_r \sen\chi \cos \epsilon, \quad (5.19)$$

$$v'_{r3} = v_r \sen\chi \sen \epsilon. \quad (5.20)$$

A velocidade relativa entre duas partículas 1 e 2 é obtida por:

$$\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2, \quad (5.21)$$

assim, finalmente é possível obter a velocidade pós-colisional das partículas 1 e 2 dadas por:

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_{cm} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{v}'_r, \quad (5.22)$$

$$\mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_{cm} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{v}'_r, \quad (5.23)$$

onde \mathbf{v}_{cm} é a velocidade do centro de massa que não é alterada pela colisão. Sua expressão analítica é dada por:

$$\mathbf{v}_{cm} = \frac{\mathbf{v}_1 m_1 + \mathbf{v}_2 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (5.24)$$

5.4.7 Quantidades macroscópicas

O cálculo das quantidades macroscópicas é realizado para gás único e, posteriormente, para misturas gasosas.

A velocidade hidrodinâmica do gás, definida em (3.17), é obtida da se-

guinte maneira:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i, \quad (5.25)$$

e o número de densidade, definido em (3.9), é dado por:

$$n = \frac{NF_N}{V_c}, \quad (5.26)$$

em que N é o número de partículas modelo e F_N é a representatividade (5.4).

A temperatura termodinâmica, definida em (3.21), está diretamente relacionada com a energia cinética de translação das partículas em relação a velocidade hidrodinâmica u e pode ser definida por:

$$T = \frac{2}{3k_B N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m (\mathbf{v}_i - \mathbf{u})^2, \quad (5.27)$$

e o fluxo de calor, definido em (3.22), é obtido por:

$$\mathbf{q} = \frac{1}{V_c} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} m \mathbf{V}_i^2 \right) \mathbf{V}_i, \quad \mathbf{V}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}. \quad (5.28)$$

O tensor pressão, definido em (3.18), é dado por:

$$\mathbf{P} = m \sum_{i=1}^N \mathbf{V}_i \mathbf{V}_i. \quad (5.29)$$

Para mistura gasosa composta pelas espécies i e j , as equações (5.25), (5.27), (5.28) e (5.29) são dadas, respectivamente, por:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{m} \sum_j \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^{N_j} \mathbf{v}_{i,j} m, \quad (5.30)$$

$$T = \frac{2}{3k_B} \sum_j N_j \sum_{i=1}^{N_j} \frac{1}{2} m_j (\mathbf{v}_{i,j} - \mathbf{u})^2, \quad (5.31)$$

$$\mathbf{q} = \sum_j \frac{1}{V_c} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} m_j \mathbf{V}_i^2 \right) \mathbf{V}_{i,j}, \quad \mathbf{V}_{i,j} = \mathbf{v}_{i,j} - \mathbf{u}, \quad (5.32)$$

e

$$\mathbf{P} = \sum_j m_j \sum_{i=1}^{N_j} \mathbf{V}_{i,j} \mathbf{V}_{i,j}. \quad (5.33)$$

Onde m é dado pela equação (3.25).

5.4.8 Erros na DSMC

São dois os tipos de erro relacionados a (SDMC) neste trabalho, são eles: o erro numérico e o do potencial de interação intermolecular. O primeiro deles decorre da dispersão estatística e no método de Monte Carlo esse erro é inversamente proporcional a raiz quadrada do número de amostras [13]. Isso significa que para reduzir o erro pela metade é necessário quadruplicar o número de amostras. Assim:

$$\text{erro} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (5.34)$$

O outro erro está relacionado com a escolha do potencial de interação intermolecular. Sabe-se que para métodos complementares a DSMC, esse erro não ultrapassa os 0,02% [10, 11] para o cálculo da viscosidade usando o potencial (AI) e, portanto, é desprezível para os propósitos deste trabalho. O tempo total de simulação é diretamente proporcional ao número de amostras.

Capítulo 6

Proposta deste trabalho

Neste capítulo descrevemos o problema proposto nesta dissertação bem como as especificações do método utilizado.

6.1 Abordagem do problema

Considere duas placas paralelas e situadas em $x = \pm a/2$. A placa esquerda, localizada em $x = -a/2$, está a uma temperatura T_+ e apresenta velocidade descendente igual a $u_w/2$. A placa direita, situada em $x = +a/2$, está a uma temperatura T_- , de modo que a diferença de temperatura entre as placas é ΔT e a velocidade relativa entre as placas seja u_w , conforme ilustra a figura (6.1).

Embora a transferência de calor e o fluxo plano de Couette sejam problemas clássicos em mecânica dos fluidos, a junção desses dois problemas não é tão comum assim.

Na literatura de dinâmica de gases rerefeitos, os trabalhos que relacionam

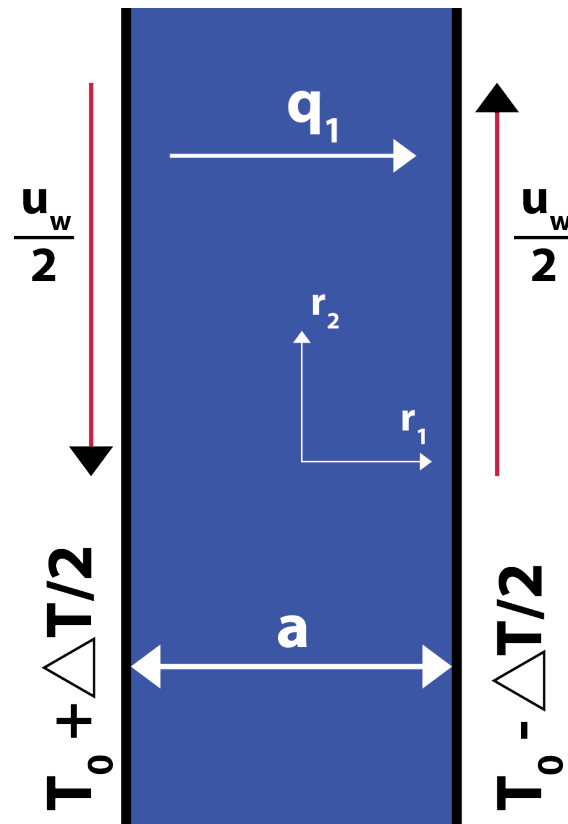


Figura 6.1: Transferência de calor e fluxo plano de Couette combinados.

a transferência de calor e o fluxo de Couette ocorrem de maneira isolada. Ou seja, não há um trabalho que combina o fluxo de calor com o fluxo planar de Couette. Como mencionado anteriormente, para resolver o problema de transferência de calor entre duas placas em repouso com diferentes temperaturas foi realizado inicialmente o cálculo analítico para o regime de moléculas livres, e em seguida, desenvolvido um programa de computador para simular as interações entre as partículas gasosas que compõem o sistema.

No fluxo planar de Couette, assim como na transferência de calor, as partículas que compõem o gás estão confinadas entre duas placas. Contudo, no fluxo plano de Couette, as placas apresentam a mesma temperatura e

uma velocidade relativa u_w . Como não há transferência de calor, pois as placas apresentam a mesma temperatura, se faz necessário calcular o tensor de pressão ou o cisalhamento entre as placas como foi feito na seção anterior.

Na literatura é possível encontrar trabalhos que quantificam as grandezas transferência de calor e tensor de pressão, mas não de maneira combinada. Por isso, foi desenvolvido um método numérico que permitiu calcular a transferência de calor e o tensor de pressão, conforme mostra a figura (6.1).

A simulação foi realizada com um programa de computador, desenvolvido ao longo do meu curso de mestrado, com 40 000 partículas modelo, inseridas em 400 células, e movimentando-se em intervalos de tempo discretos iguais a 0,002. A velocidade das placas foi obtida em função da velocidade mais provável do gás na temperatura de equilíbrio, de modo que foram consideradas duas possibilidades. Na primeira, a velocidade das placas é o dobro da velocidade mais provável e, na segunda, é dois décimos. Analogamente, foram considerados dois valores distintos para a diferença de temperatura entre as placas. No primeiro caso, a diferença de temperatura entre as placas é 1,5 e no outro, 0,2.

6.2 Testes realizados com o programa desenvolvido

Testes foram realizados, para o potencial de esferas rígidas, nas mesmas condições expostas nos artigos [24, 27], e os resultados obtidos para o cisalhamento no fluxo plano de Couette e a transferência de calor entre as placas

6.2. TESTES REALIZADOS COM O PROGRAMA DESENVOLVIDO 53

com o programa são apresentados, respectivamente, nas tabelas 6.1 e 6.2.

Tabela 6.1: Cisalhamento adimensional Π para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$, para Couette e transferência de calor combinados.

δ	Π																			
	$C_0 = 0$				0,25				0,5				0,75							
	2		0,2		2		0,2		2		0,2		2		0,2		2			
0,01	0,5589	0,5621	0,5266	0,5291	0,4954	0,4983	0,4775	0,4792	0,5589	0,5622	0,5210	0,5234	0,4474	0,4519	0,4474	0,4519	0,3052	0,3122	0,3410	0,3555
0,1	0,5200	0,5324	0,4917	0,4987	0,4642	0,4711	0,4474	0,4519	0,5210	0,5324	0,4917	0,4987	0,4642	0,4711	0,4474	0,4519	0,3052	0,3122	0,3410	0,3555
1	0,3403	0,3555	0,3263	0,3392	0,3125	0,3231	0,3052	0,3122	0,3410	0,3555	0,3263	0,3392	0,3125	0,3231	0,3052	0,3122	0,2808	0,2866	0,2833	0,2921
10	0,0834	0,0921	0,0826	0,0895	0,0816	0,0875	0,0808	0,0866	0,0833	0,0921	0,0826	0,0895	0,0816	0,0875	0,0808	0,0866	0,0746	0,0748	0,0745	0,0750
20	0,0456	0,0501	0,0450	0,0489	0,0448	0,0481	0,0446	0,0478	0,0457	0,0502	0,0450	0,0489	0,0448	0,0481	0,0446	0,0478	0,0423	0,0425	0,0423	0,0426
40	0,0238	0,0261	0,0237	0,0255	0,0235	0,0252	0,0235	0,0252	0,0239	0,0261	0,0237	0,0255	0,0235	0,0252	0,0235	0,0252	0,0213	0,0215	0,0213	0,0216

O desvio relativo do cisalhamento e do fluxo de calor serão abordados no

Tabela 6.2: Fluxo de Calor adimensional q para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e razão entre a diferença de temperatura ΔT e a temperatura de equilíbrio T_0 , para Couette e transferência de calor combinados.

δ	q														
	$C_0 = 0$			0,25			0,5			0,75			1		
	$\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$	1,5	0,2	0,2	1,5	0,2	0,2	1,5	0,2	1,5	0,2	1,5	0,2	1,5	
0	0,5617	0,4095	0,7625	0,5549	0,8663	0,6312	0,8394	0,6113	0,5617	0,4095					
0,01	0,5593	0,4088	0,7573	0,5537	0,8629	0,6300	0,8349	0,6102	0,5588	0,4087					
0,1	0,5346	0,3968	0,5346	0,5362	0,8268	0,6106	0,8020	0,5926	0,5339	0,3967					
1	0,4053	0,3145	0,5465	0,4215	0,6264	0,4836	0,6142	0,4745	0,4056	0,3146					
10	0,1369	0,1244	0,1770	0,1655	0,2041	0,1935	0,2065	0,1955	0,1371	0,1245					
20	0,0792	0,0748	0,1017	0,0993	0,1172	0,1168	0,1195	0,1193	0,0793	0,0748					
40	0,0432	0,0414	0,0551	0,0549	0,0637	0,0648	0,0649	0,0665	0,0433	0,0414					

próximo capítulo.

6.3 Resultados

Os dados obtidos para o cisalhamento e fluxo de calor para o problema de Couette e transferência de calor combinados foram calculados com o mesmo programa que forneceram os dados de referência das tabelas 6.1 e 6.2 e estão esboçados, respectivamente, nas tabelas 6.3 e 6.3 .

Os gráficos 6.2, 6.3, 6.4, 6.5, 6.6, 6.7, 6.8, 6.9, 6.10 e 6.11 mostram a influência da diferença de temperatura entre as placas no problema de Couette no amplo intervalo do parâmetro de rarefação. No regime de molécula livre e transição, o cisalhamento é fortemente afetado quando a diferença de temperatura entre as placas é alta. No regime hidrodinâmico, o cisalhamento não varia com a diferença de temperatura entre as placas.

Os gráficos 6.12, 6.13, 6.14, 6.15, 6.16, 6.17, 6.18, 6.19, 6.20 e 6.21 mostram a influência da velocidade relativa entre as placas no problema de transferência de calor no amplo intervalo do parâmetro de rarefação. Mesmo variando a velocidade relativa entre as placas, o fluxo de calor permanece praticamente inalterado para quase todos os valores da composição química. A exceção aparece apenas para gás único de Argônio. Nesse caso, variações do módulo da velocidade relativa entre as placas produzem diferentes valores para o fluxo de calor.

Tabela 6.3: Cisalhamento adimensional Π para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ , velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$ e diferença da temperatura entre as placas ΔT , para Couette e transferência de calor combinados.

δ	Π									
	$C_0 = 0$ e $\Delta T = 0, 2$		$C_0 = 0$ e $\Delta T = 1, 5$		$C_0 = 0, 25$ e $\Delta T = 0, 2$		$C_0 = 0, 25$ e $\Delta T = 1, 5$		$C_0 = 0, 5$ e $\Delta T = 0, 2$	
	$\frac{u_w}{v_0}$	0, 2	$\frac{u_w}{v_0}$	0, 2	$\frac{u_w}{v_0}$	0, 2	$\frac{u_w}{v_0}$	0, 2	$\frac{u_w}{v_0}$	0, 2
0	0,5620	0,5621	0,4096	0,4096	0,5333	0,5294	0,3857	0,3857	0,4986	0,4988
0,01	0,5574	0,5609	0,4070	0,5620	0,5247	0,5274	0,3843	0,3862	0,4942	0,4965
0,1	0,5589	0,5621	0,5266	0,5291	0,5589	0,5621	0,5266	0,5291	0,5589	0,5621
1	0,3391	0,3545	0,2630	0,2811	0,3255	0,3382	0,2503	0,2667	0,3120	0,6451
10	0,0834	0,0920	0,0759	0,0855	0,0824	0,0894	0,1452	0,0839	0,0815	0,1754
20	0,0659	0,0501	0,0429	0,0478	0,0451	0,0489	0,0434	0,0900	0,0853	0,0481
40	0,0257	0,0261	0,0433	0,0253	0,0237	0,0255	0,0232	0,0251	0,0237	0,0480

O desvio relativo entre o fluxo de calor obtido nesta dissertação (qd), dado na tabela (6.2), e o fluxo de calor de referência (qr), dado na tabela (2.2),

δ	II									
	$\frac{u_{av}}{v_0} = 0,2$	$\frac{C_0 = 0,5 \text{ e } \Delta T = 1,5}{2}$	$\frac{C_0 = 0,75 \text{ e } \Delta T = 0,2}{0,2}$	$\frac{C_0 = 0,75 \text{ e } \Delta T = 1,5}{0,2}$	$\frac{C_0 = 1 \text{ e } \Delta T = 0,2}{0,2}$	$\frac{C_0 = 1 \text{ e } \Delta T = 1,5}{0,2}$	$\frac{C_0 = 1 \text{ e } \Delta T = 0,2}{0,2}$	$\frac{C_0 = 1 \text{ e } \Delta T = 1,5}{0,2}$		
0	0,4444	0,3643	0,4810	0,4805	0,3500	0,3501	0,5622	0,5620	0,4093	0,4096
0,01	0,4692	0,3638	0,4759	0,4775	0,3484	0,3501	0,5569	0,5601	0,4070	0,4100
0,1	0,3426	0,3494	0,4460	0,4503	0,3302	0,3348	0,5192	0,5306	0,3854	0,3956
1	0,2380	0,2527	0,3041	0,3112	0,2322	0,2431	0,3392	0,3535	0,2630	0,2811
10	0,0760	0,0824	0,0809	0,0865	0,0753	0,0813	0,0833	0,0920	0,1444	0,0855
20	0,0437	0,0468	0,0447	0,0478	0,0434	0,0434	0,0454	0,0501	0,0429	0,0478
40	0,0276	0,0250	0,0236	0,0251	0,0233	0,0249	0,0238	0,0261	0,0229	0,0253

está esboçado na tabela (6.6). Novamente, os índices d e r inseridos no fluxo de calor, foram usados para diferenciar os dados obtidos nesta dissertação daqueles de referência já publicados.

A análise dessa tabela evidencia que o fluxo de calor está dentro da mar-

Tabela 6.4: Fluxo de calor adimensional q para potencial esferas rígidas em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ , velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$ e diferença da temperatura entre as placas ΔT , para Couette e transferência de calor combinados.

δ	$\frac{u_w}{v_0}$	q									
		$C_0 = 0$ e $\Delta T = 0,2$		$C_0 = 0$ e $\Delta T = 1,5$		$C_0 = 0,25$ e $\Delta T = 0,2$		$C_0 = 0,25$ e $\Delta T = 1,5$		$C_0 = 0,5$ e $\Delta T = 0,2$	
		0,2	2	0,2	2	0,2	2	0,2	2	0,2	2
0	0,5621	0,5619	0,4097	0,4097	0,7619	0,7616	0,5551	0,5552	0,8668	0,8666	
0,01	0,5583	0,5613	0,4088	0,5619	0,7581	0,7613	0,5537	0,5560	0,8626	0,8645	
0,1	0,5266	0,5483	0,3970	0,4098	0,7257	0,7365	0,5363	0,5464	0,8271	0,7250	
1	0,4054	0,4328	0,3150	0,3459	0,5470	0,5701	0,4219	0,4484	0,6270	0,3221	
10	0,1371	0,1546	0,1246	0,1438	0,1770	0,1797	0,1657	0,1788	0,2044	0,1260	
20	0,0591	0,0891	0,0749	0,0852	0,1016	0,1081	0,0994	0,1059	0,1174	0,0998	
40	0,0413	0,0479	0,0415	0,0464	0,0548	0,0581	0,0549	0,0579	0,0635	0,0656	

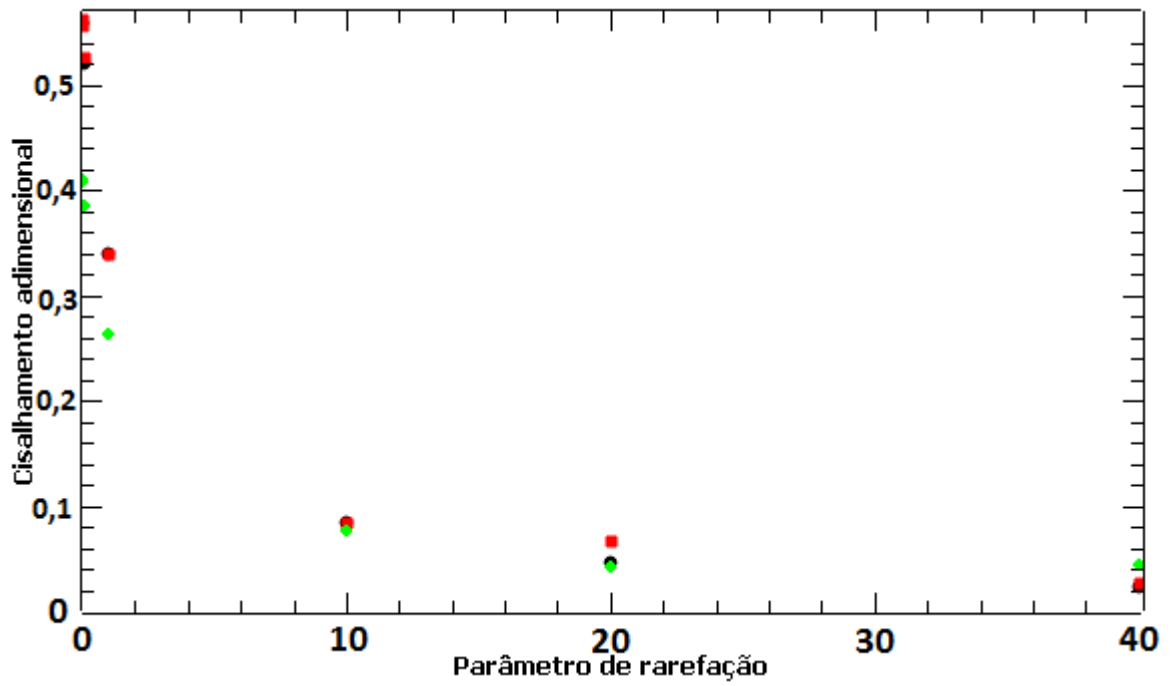


Figura 6.2: Gás único de Hélio ($C_0=0$) e com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

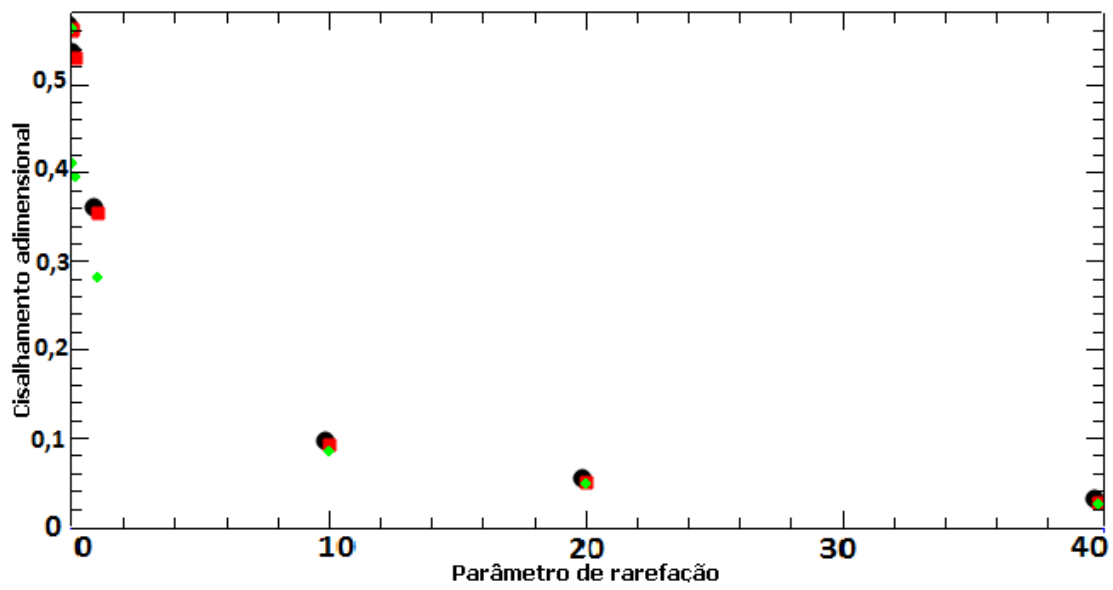


Figura 6.3: Gás unico de Hélio ($C_0=0$) e com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

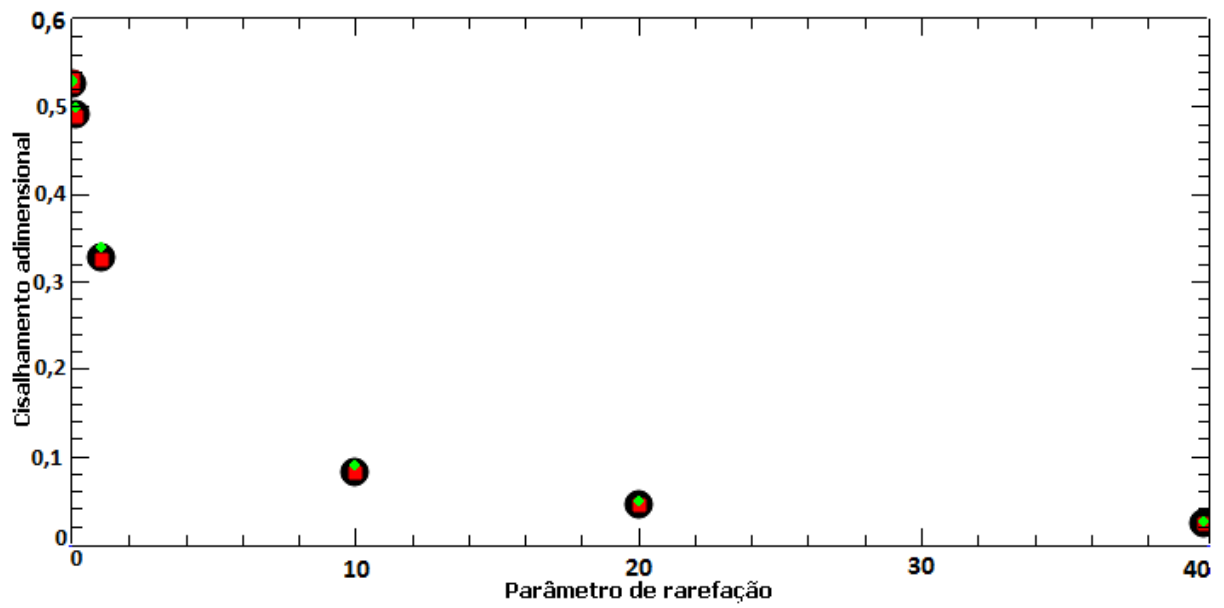


Figura 6.4: Mistura gasosa de Argônio ($C_0=0,25$) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

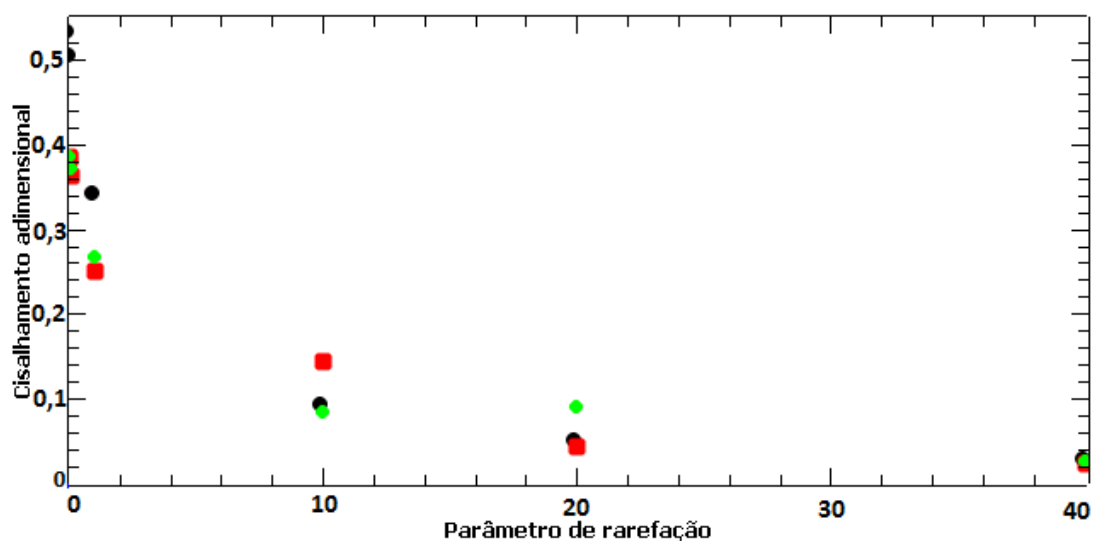


Figura 6.5: Mistura de Argônio ($C_0=0,25$) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

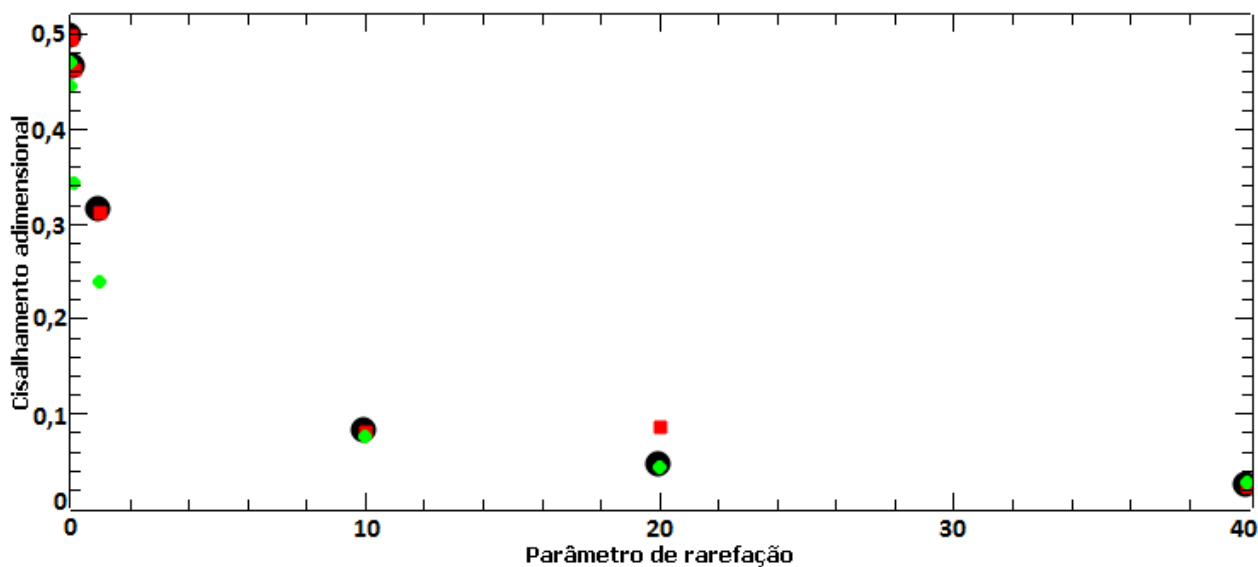


Figura 6.6: Mistura de Argônio ($C_0=0,5$) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

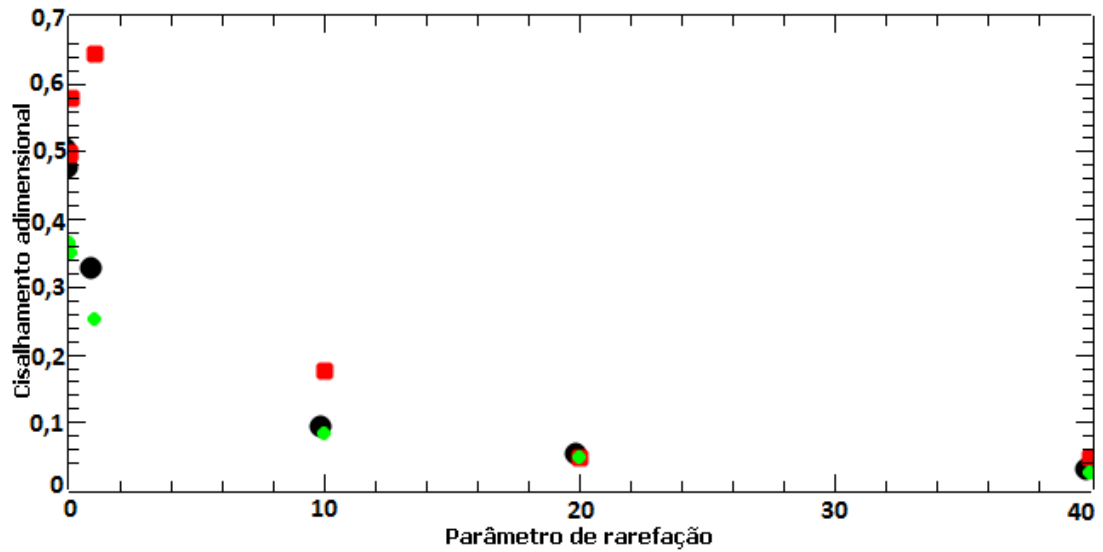


Figura 6.7: Mistura de Argônio ($C_0=0,5$) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

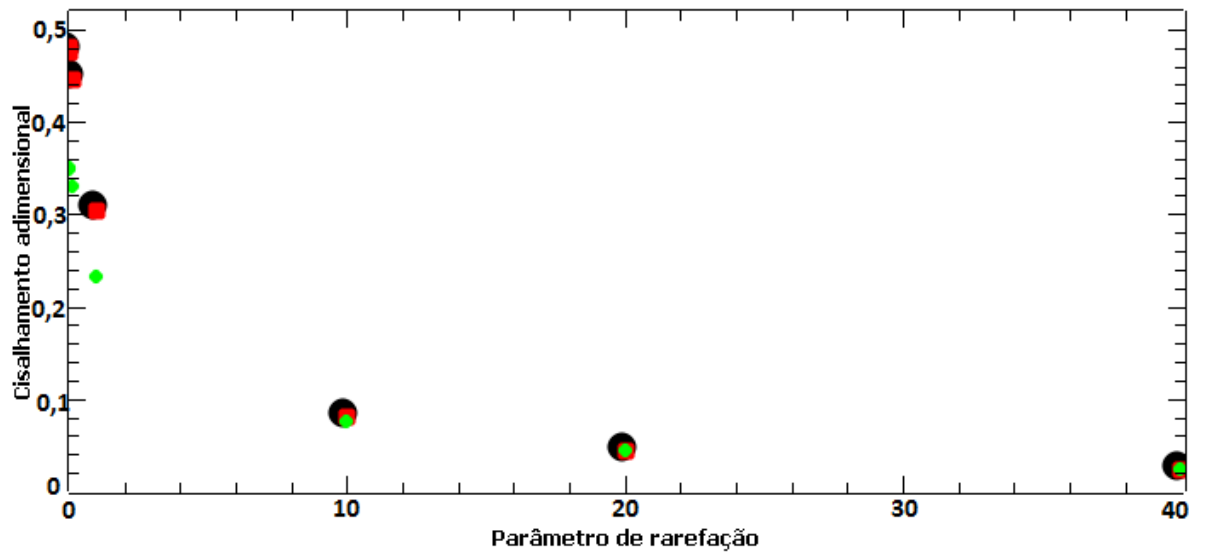


Figura 6.8: Mistura de Argônio ($C_0=0,75$) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

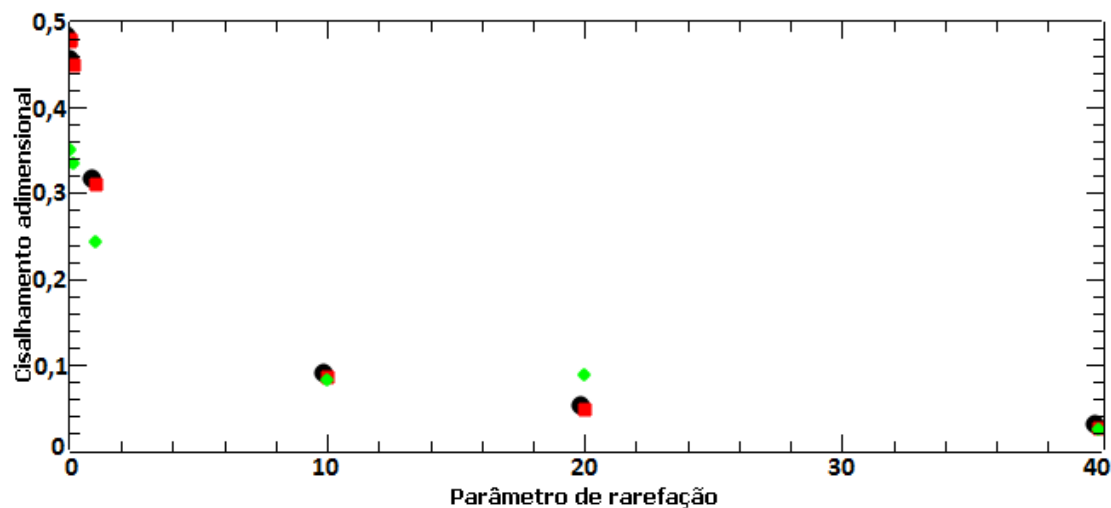


Figura 6.9: Mistura de Argônio ($C_0=0,75$) e Hélio com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

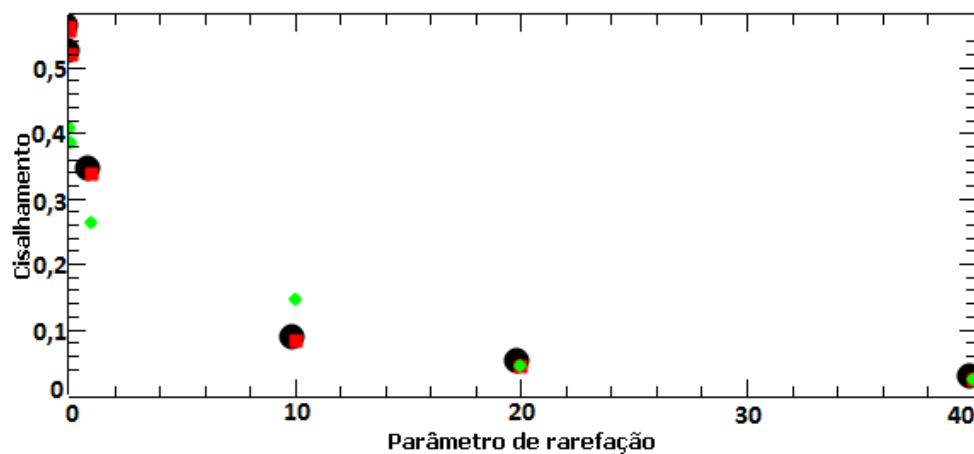


Figura 6.10: Gás único de Argônio ($C_0=1$) com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

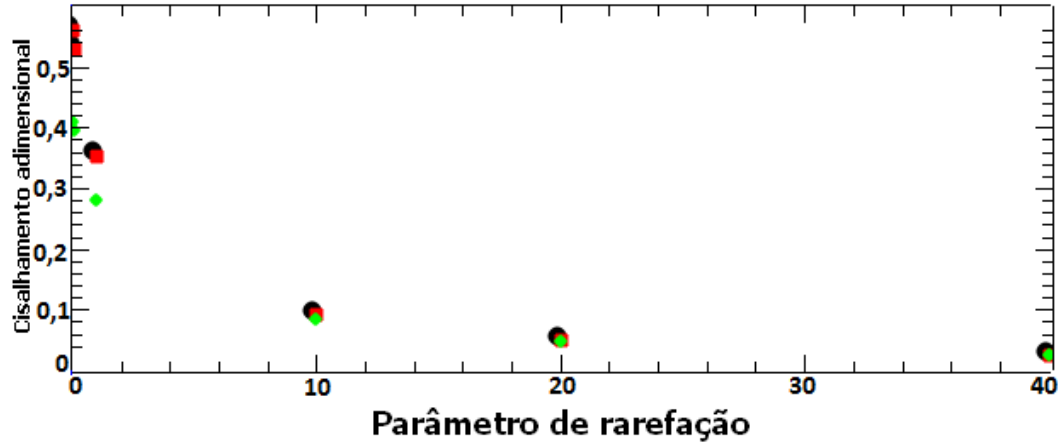


Figura 6.11: Gás único de Argônio ($C_0=1$) com velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$: em preto dados da referência [24], em vermelho a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$ e em verde a diferença de temperatura adimensional $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$.

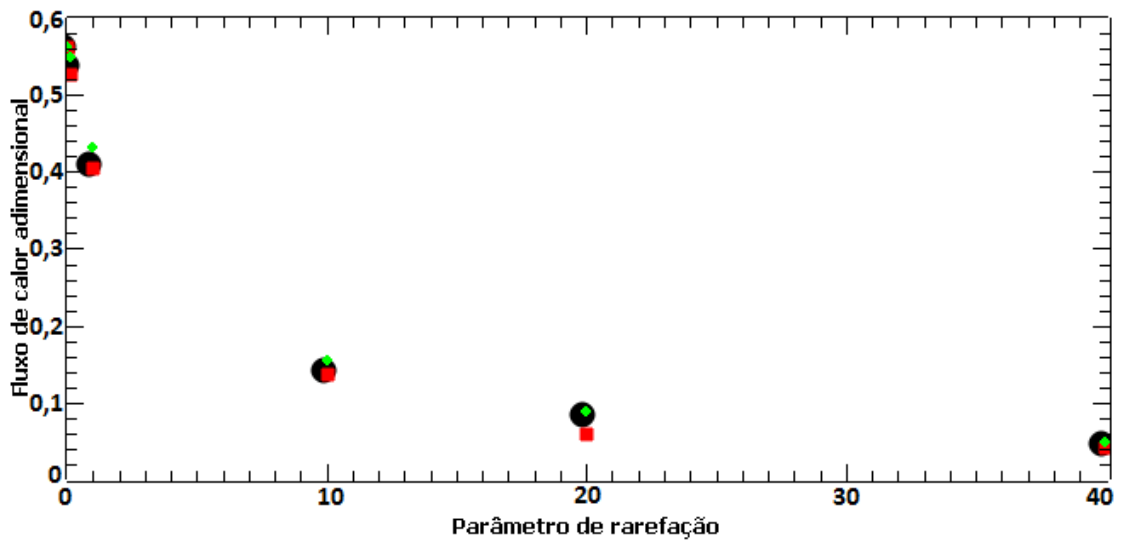


Figura 6.12: Gás único de Hélio ($C_0=0$) com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

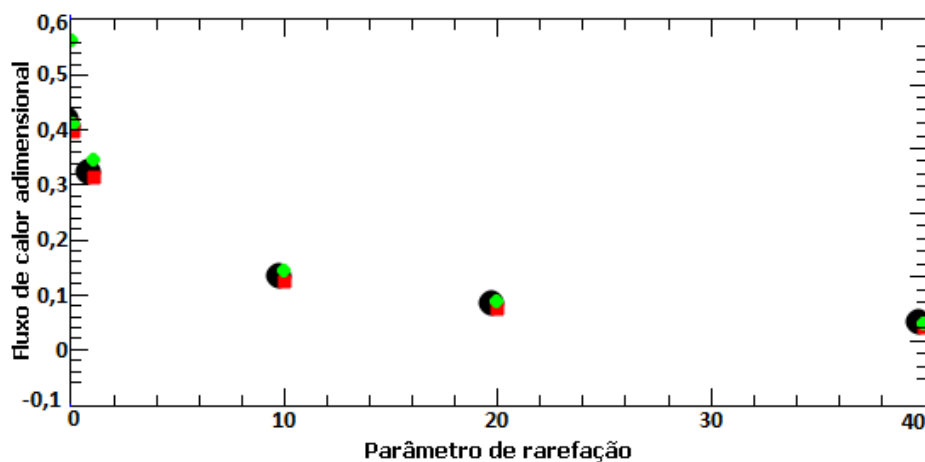


Figura 6.13: Gás único de Hélio ($C_0=0$) com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

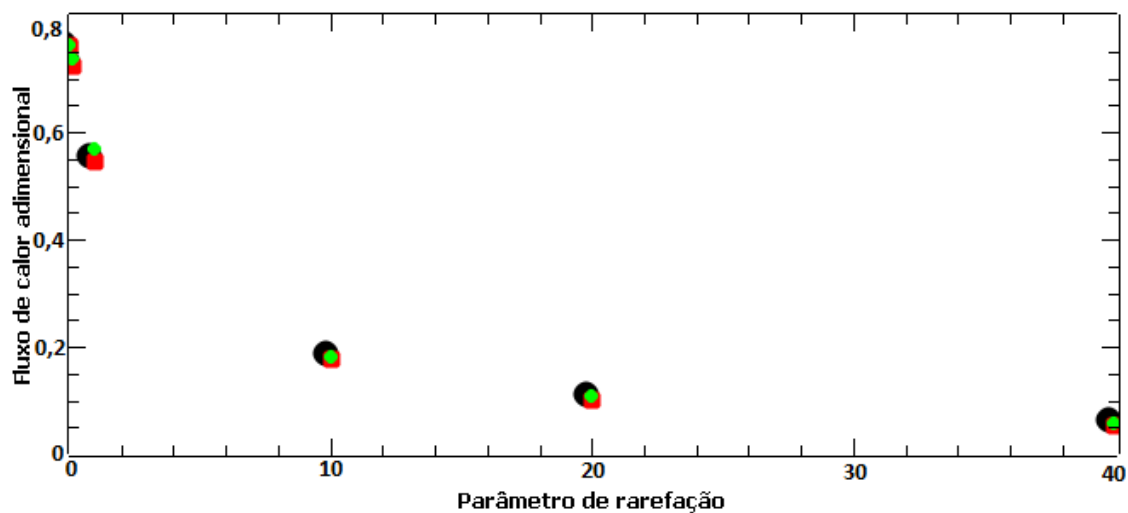


Figura 6.14: Mistura gasosa de Argônio ($C_0=0,25$) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

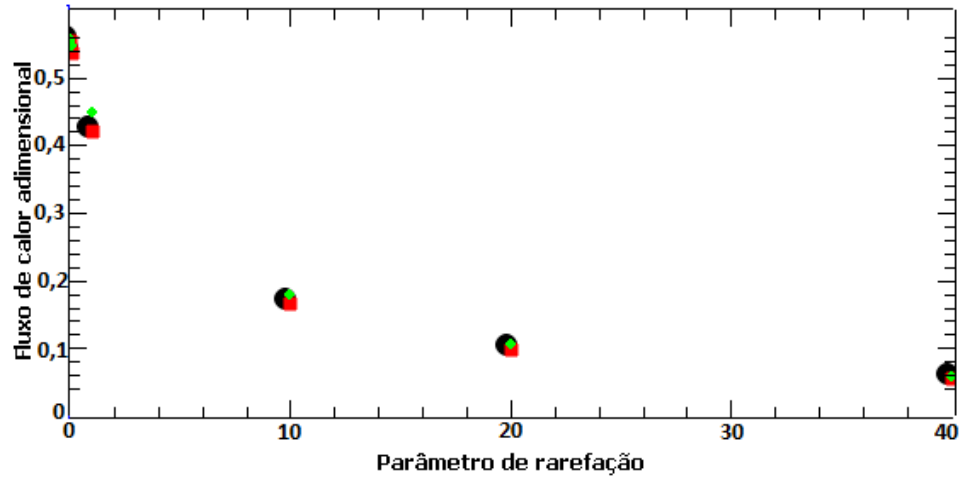


Figura 6.15: Mistura gasosa de Argônio ($C_0=0,25$) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

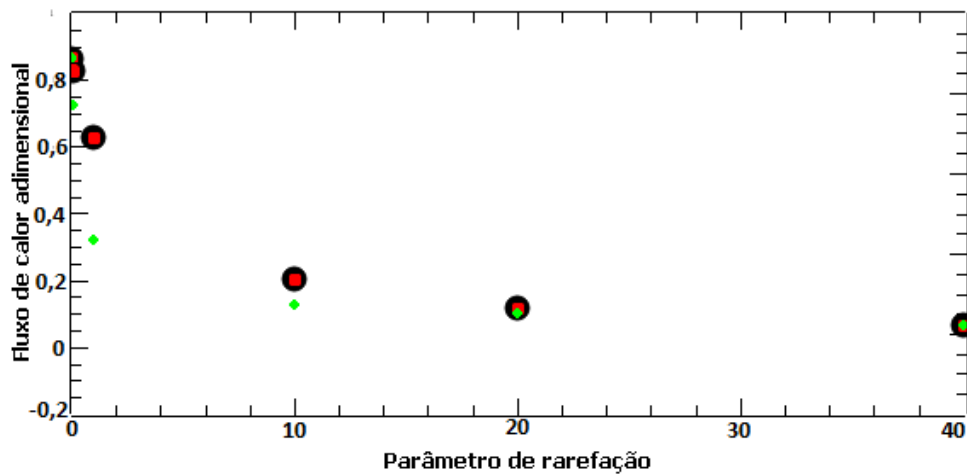


Figura 6.16: Mistura gasosa de Argônio ($C_0=0,5$) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

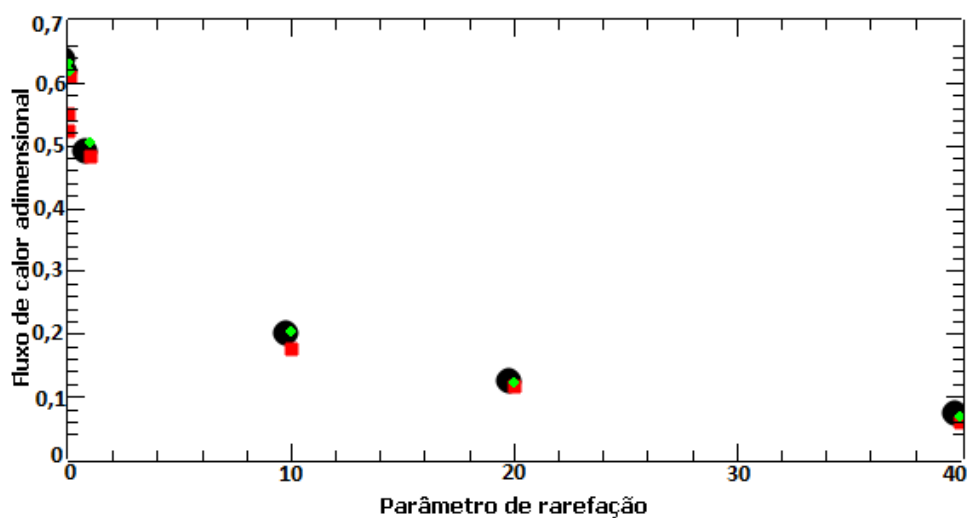


Figura 6.17: Mistura gasosa de Argônio ($C_0=0,5$) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

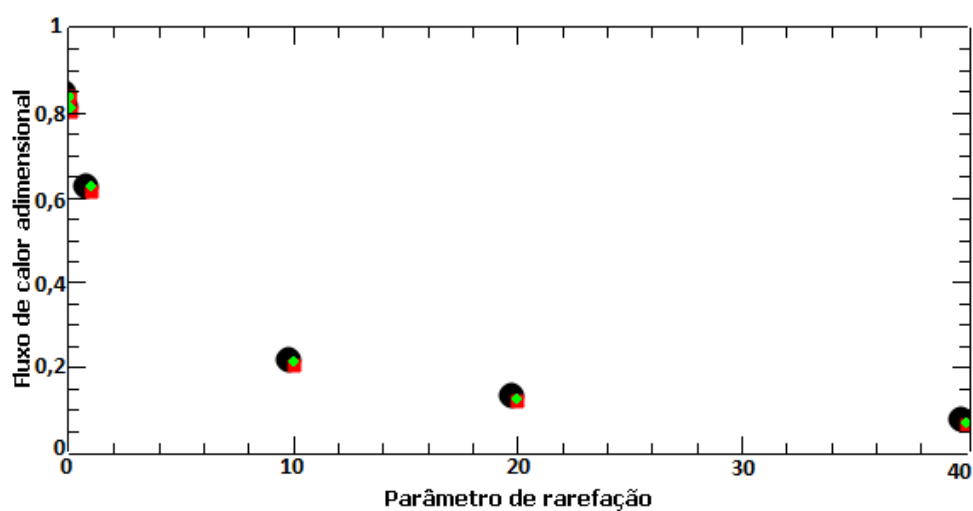


Figura 6.18: Mistura gasosa de Argônio ($C_0=0,75$) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

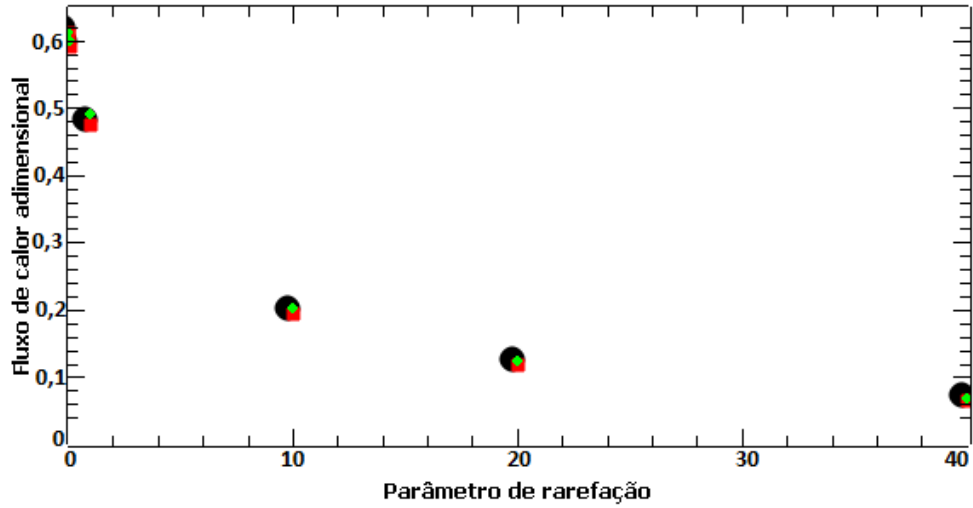


Figura 6.19: Mistura gasosa de Argônio ($C_0=0,75$) e Hélio com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

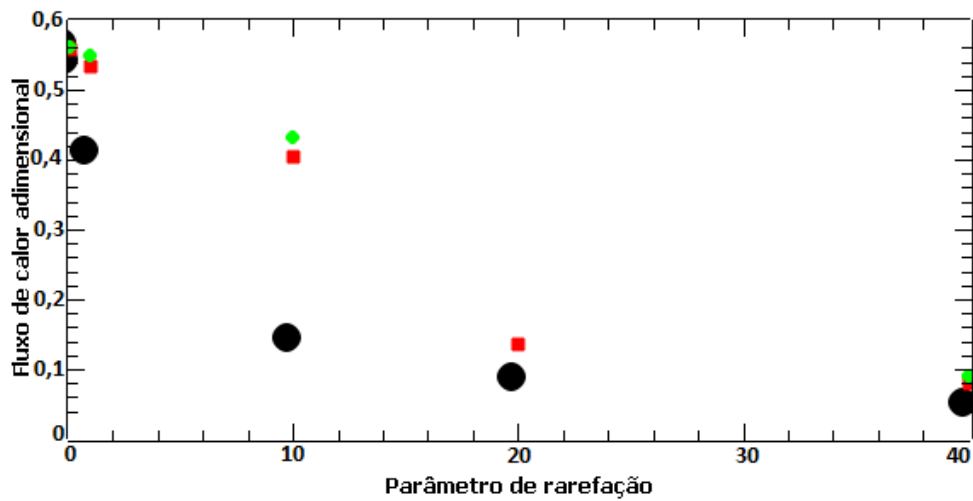


Figura 6.20: Gás único de Argônio ($C_0=1$) com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

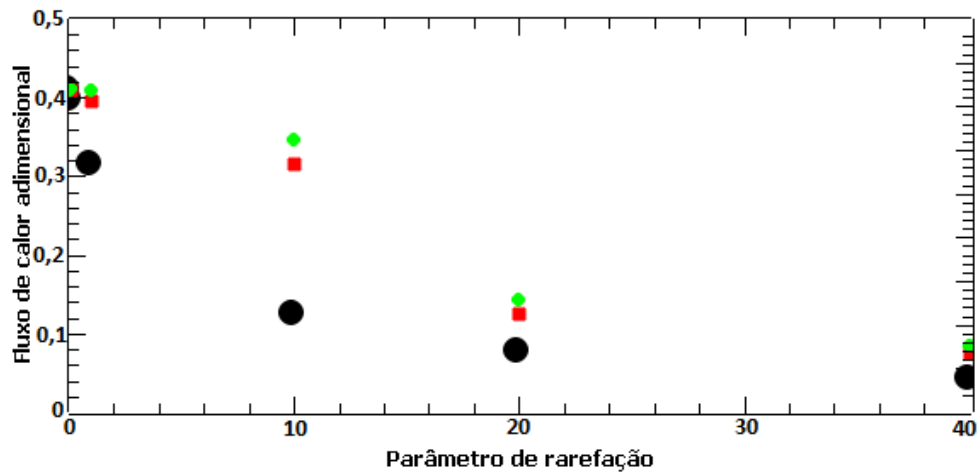


Figura 6.21: Gás único de Argônio ($C_0=1$) com diferença de temperatura adimensional das placas $\frac{\Delta T}{T_0} = 1,5$: em preto dados da referência [27], em vermelho a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 0,2$ e em verde a velocidade adimensional das placas $\frac{u_w}{v_0} = 2$.

Tabela 6.5: Desvio relativo entre o cisalhamento dado nas tabelas (6.1) e (2.1), para potencial de esferas rígidas e em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e velocidade adimensional da parede $\frac{u_w}{v_0}$.

		$(\Pi d - \Pi r)/\Pi d(\%)$											
δ	$C_0 = 0$	0,25		0,5		0,75		1		2		2	
		0,2	2	0,2	2	0,2	2	0,2	2	0,2	2	0,2	2
	$\frac{u_w}{v_0} = 0,2$												
0,01	-0,0002	-0,0004	-0,0001	-0,0003	-0,0010	-0,0002	-0,0002	-0,0006	0,0002	-0,0001	-0,0001	0,0002	-0,0001
0,1	-0,0019	-0,0004	0,0010	-0,0046	0,0005	-0,0001	-0,0007	-0,0003	-0,0001	-0,0001	-0,0003	-0,0001	-0,0004
1	0,0002	-0,0005	-0,0003	-0,0005	-0,0020	0,0002	-0,0003	-0,0011	0,0020	0,0005	-0,0011	0,0020	0,0005
10	-0,0001	-0,0002	0,0014	-0,0001	0,0021	0,0003	-0,0021	0,0011	-0,0020	0,0005	-0,0021	-0,0020	-0,0020
20	0,0022	0,0010	-0,0035	-0,0001	-0,0010	0,0001	-0,0004	-0,0005	0,0048	0,0005	-0,0004	0,0048	0,0048
40	0,0029	-0,0010	0,0008	-0,0006	-0,0040	0,0009	-0,0047	-0,0004	0,0070	0,0004	-0,0004	0,0070	0,0070

Tabela 6.6: Desvio relativo entre o fluxo de calor dado nas tabelas (6.2) e (2.2), para potencial de esferas rígidas e em função da fração molar de equilíbrio C_0 , parâmetro de rarefação δ e velocidade adimensional da parede

$$\frac{u_w}{v_0} .$$

δ	$(qd - qr)/qd(\%)$											
	$C_0 = 0$		0,25		0,5		0,75		1		2	
	$\frac{u_w}{v_0}$	2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	2
0,01	0,0007	0,0001	-0,0006	-0,0001	0,0003	-0,0001	-0,0005	-0,0003	-0,0001	-0,0001	-0,0002	-0,0002
0,1	0,0006	0,0001	-0,3571	0,0001	-0,0003	0,0001	0,0001	-0,0001	0,0001	-0,0007	-0,0002	-0,0002
1	-0,0003	-0,0004	-0,0004	-0,0001	-0,0007	0,0001	0,0009	-0,0004	0,0007	0,0007	0,0007	-0,0001
10	-0,0006	-0,0003	-0,0005	0,0001	-0,0006	0,0003	0,0022	-0,0005	0,0008	0,0008	0,0007	0,0007
20	-0,0017	0,0003	0,0018	-0,0007	-0,0010	-0,0002	0,0016	0,0012	-0,0001	-0,0001	0,0008	0,0008
40	0,0027	-0,0010	0,0034	0,0001	0,0008	-0,0004	0,0005	-0,0016	0,0033	0,0033	-0,0004	-0,0004

Capítulo 7

Conclusão

Aplicar o método SDMC para modelar problemas de escoamento gasoso não é uma tarefa trivial. Simular a colisão entre as partículas, o tipo de interação entre elas, modelar o espalhamento das partículas após a colisão com as placas que confinam o gás são apenas alguns dos obstáculos vencidos.

Para testar a eficácia do programa de computador desenvolvido foram realizados testes para comparar com dados já publicados para o cisalhamento e o fluxo de calor. Esses testes demoraram algumas semanas para serem realizados devido ao elevado número de variáveis a serem simuladas computacionalmente.

Uma vez realizados os testes com o programa e tendo a percepção de que eles estavam em concordância com os dados na literatura, foi possível finalmente calcular o cisalhamento e o fluxo de calor no problema de Couette combinado com o de transferência de calor.

A tensão de cisalhamento obtido nesta dissertação, dado na tabela (6.1), será denotado por (Πd) e foi comparado com o cisalhamento de referência,

denotado por (Πr) , dado na tabela (2.1). O desvio relativo entre ambas as grandezas estão esboçados na tabela (6.5). Os índices d e r inseridos no cisalhamento têm por objetivo distinguir os dados obtidos nesta dissertação daqueles de referência já publicados. A análise da tabela (6.5) evidencia que a margem de erro está dentro daquela proposta nesta dissertação que é de 1% e, portanto, o programa gera dados fidedignos.

Uma vez que os testes para Couette e transferência de calor foram satisfatórios, foi simulado o problema de Couette combinado com o fluxo de calor, para o potencial de esferas rígidas, e o cisalhamento e o fluxo de calor estão esboçados, respectivamente, nas tabelas (6.3) e (6.3). Essas duas últimas tabelas contém os principais dados desenvolvidos e publicados nesta dissertação e eles não foram submetidos a comparações pelo simples fato de não existir dados de referência na literatura, de modo que, agora, esses dados servirão como referência para trabalhos futuros.

No próximo trabalho, será pesquisado o tensor de cisalhamento e o fluxo de calor no problema de Couette combinado com transferência de calor para o potencial *Ab initio*.

Bibliografia

- [1] P. Bassanini, C. Cercignani, and C. Pagani. Comparison of kinetic theory analysis of linearized heat transfer between parallel plates. *Int. J. Heat Mass Transfer.*, 10:447–460, 1967.
- [2] P. L. Bhatnagar and M. P. Srivasta. Heat transfer in plane Couette flow of a rarefied gas using bhatnagar-gross-krook model. *Phys. Fluids.*, 12(4):938, 1969.
- [3] G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [4] C. Cercignani and C. D. Pagani. Variational approach to boundary value problems in kinetic theory. *Phys. Fluids*, 9(6):1167–1173, 1966.
- [5] S. M. Cybulski and R. R. Toczyłowski. Ground state potential energy curves for He₂, Ne₂, Ar₂, He-Ne, He-Ar, and Ne-Ar: A coupled-cluster study. *J. Chem. Phys.*, 111(23):10520–10528, 1999.
- [6] J. Fan. A generalized soft-sphere model for Monte Carlo simulation. *Phys. Fluids*, 14(12):4399–4405, 2002.

- [7] J. H. Ferziger and H. G. Kaper. *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [8] E. P. Gross and E. A. Jackson. Kinetic models and the linearized Boltzmann equation. *Phys. Fluids*, 2(4):432–441, 1959.
- [9] A. B. Huang and D. L. Hartley. Nonlinear rarefied couette flow with heat transfer. *Phys. Fluids*, 11(6):1321–1326, 1968.
- [10] J. Kestin, K. Knierim, E. A. Mason, B. Najafi, S. T. Ro, and M. Waldman. Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixture at low densities. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 13(1):229–303, 1984.
- [11] T. Korona, H. L. Williams, R. Bukowski, B. Jeziorski, and K. Szalewicz. Helium dimer potential from symmetry-adapted perturbation theory calculations using large Gaussian geminal and orbital basis sets. *J. Chem. Phys.*, 106:5109–5122, 1997.
- [12] K. Koura, H. Matsumoto, and T. Shimada. A test of equivalence of the variable-hard-sphere and inverse-power-law models in the direct-simulation Monte-Carlo method. *Phys. Fluids*, 3(7):1835–1837, 1991.
- [13] D. V. Kozak. *Simulação Direta de Monte Carlo de Escoamentos Internos e Externos de Gases no Amplo Intervalo de Rarefação com Aplicação a Problemas da Engenharia Aeroespacial*. PhD thesis, Universidade Federal do Paraná, Programa de Pós-graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais, 2010.

- [14] J. Lopez-Lemus and R. Velasco. Slip boundary conditions in Couette flow. *Physica A*, 274(3):454–465, 1999.
- [15] W. Marques Jr, G. M. Kremer, and F. M. Sharipov. Couette flow with slip and jump boundary conditions. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 12(6):379–386, 2000.
- [16] H. Matsumotoa. Variable sphere molecular model for inverse power law and Lennard-Jones potentials in Monte Carlo simulations. *Phys. Fluids*, 14(12):4256–4265, 2002.
- [17] N. Metropolis and S. Ulam. The monte carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247):335–341, 1949.
- [18] E. M. Shakhov. Generalization of the Krook kinetic relaxation equation. *Fluid Dynamics*, 3(5):95–96, 1968.
- [19] F. Sharipov, L. M. G. Cumin, and D. Kalempa. Plane Couette flow of binary gaseous mixture in the whole range of the Knudsen number. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 23:899–906, 2004.
- [20] F. Sharipov, L. M. G. Cumin, and D. Kalempa. Heat flux through a binary gaseous mixture over the whole range of the knudsen number. *Physica A*, 378:183–193, 2007.
- [21] F. Sharipov and V. Seleznev. Data on internal rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 27(3):657–706, 1998.
- [22] F. Sharipov and J. L. Strapasson. *Ab initio* simulation of transport phenomena in rarefied gases. *Phys. Rev. E*, 86(3):031130, 2012.

- [23] F. Sharipov and J. L. Strapasson. Direct simulation Monte Carlo method for an arbitrary intermolecular potential. *Phys. Fluids*, 24(1):011703.1–6, 2012.
- [24] F. Sharipov and J. L. Strapasson. Benchmark problems for mixtures of rarefied gases. I. Couette flow. *Phys. Fluids*, 25:027101, 2013.
- [25] L. Sirovich. Kinetic modeling of gas mixture. *Phys. Fluids*, 5(8):908–918, 1962.
- [26] J. L. Strapasson. *Implementação de potenciais arbitrários na simulação direta de Monte Carlo*, SCHOOL = Universidade Federal do Paraná, Programa de Pós-graduação em Física, YEAR = 2015. PhD thesis.
- [27] J. L. Strapasson and F. Sharipov. *Ab initio* simulation of heat transfer through a mixture of rarefied gases. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 71:91–97, 2014.
- [28] S. Ueno. Probabilistic approach for rarefied-gas dynamics-linearized Couette flow. *Appl. Math. Comput.*, 69(1):61–73, 1995.
- [29] D. Valougeorgis and J. R. Thomas. The F_n -method in kinetic theory: II. Heat transfer between parallel plates. *Transport Theory Stat. Phys.*, 14:497–512, 1985.
- [30] R. R. Willis. Comparison of kinetic theory analyses of linearized couette flow. *Physics of Fluids*, 05(2):127–135, 1962.

Apêndice A

Regime de molécula livre

Nesse capítulo serão apresentados o desenvolvimento analítico do Cisalhamento, velocidade hidrodinâmica e transferência de calor no regime de moléculas livres.

A.1 Número de densidade n

Retomando a temperatura das placas (4.5), tem-se:

$$T_+ = T_0 + \Delta T/2 \quad e \quad T_- = T_0 - \Delta T/2. \quad (\text{A.1})$$

As quantidades n_- e n_+ são obtidas de duas condições. Primeira, a densidade total deve ser a mesma que no equilíbrio. Ou seja:

$$\int_{v_1 > 0} f_+(\mathbf{v}) d^3v + \int_{v_1 < 0} f_-(\mathbf{v}) d^3v = n. \quad (\text{A.2})$$

A segunda condição expressa o fato que o gás não se move, ou seja:

$$\int_{v_1>0} v_1 f_+(\mathbf{v}) d^3v + \int_{v_1<0} v_1 f_-(\mathbf{v}) d^3v = 0. \quad (\text{A.3})$$

Substituindo(4.2) em (A.2), obtém-se:

$$\int_{v_1>0} n_+ \left(\frac{m}{2\pi k_B T_+} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{m (v_1^2 + (v_2 - u_w/2)^2 + v_3^2)}{2k_B T_+} \right) d^3v +$$

$$\int_{v_1<0} n_- \left(\frac{m}{2\pi k_B T_-} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{m (v_1^2 + (v_2 + u_w/2)^2 + v_3^2)}{2k_B T_-} \right) d^3v = n, \quad (\text{A.4})$$

isolando as constantes,

$$n_+ \left(\frac{m}{2\pi k_B T_+} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_1>0} \exp \left(-\frac{m (v_1^2 + (v_2 - u_w/2)^2 + v_3^2)}{2k_B T_+} \right) d^3v +$$

$$n_- \left(\frac{m}{2\pi k_B T_-} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_1<0} \exp \left(-\frac{m (v_1^2 + (v_2 + u_w/2)^2 + v_3^2)}{2k_B T_-} \right) d^3v = n. \quad (\text{A.5})$$

Resolvendo as integrais na equação acima, têm-se:

$$n_+ \left(\frac{m}{2\pi k_B T_+} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{\pi^{3/2}}{2} \left(\frac{m}{2k_B T_+} \right)^{-3/2} \right] +$$

$$n_- \left(\frac{m}{2\pi k_B T_-} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{\pi^{3/2}}{2} \left(\frac{m}{2k_B T_-} \right)^{-3/2} \right] = n.$$

Finalmente, simplificando os termos acima, encontra-se:

$$n_+ + n_- = 2n. \quad (\text{A.6})$$

Agora, substituindo (4.2) em (A.3), obtém-se:

$$n_+ \left(\frac{m}{2\pi k_B T_+} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_1 > 0} v_1 \exp \left(-\frac{m (v_1^2 + (v_2 - u_w/2)^2 + v_3^2)}{2k_B T_+} \right) d^3 v +$$

$$n_- \left(\frac{m}{2\pi k_B T_-} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_1 < 0} v_1 \exp \left(-\frac{m (v_1^2 + (v_2 + u_w/2)^2 + v_3^2)}{2k_B T_-} \right) d^3 v = 0, \quad (\text{A.7})$$

que é o mesmo que:

$$n_+ \left(\frac{m}{2\pi k_B T_+} \right) \left(\frac{2\pi k_B^2 T_+^2}{m^2} \right) - n_- \left(\frac{m}{2\pi k_B T_-} \right) \left(\frac{2\pi k_B^2 T_-^2}{m^2} \right) = 0. \quad (\text{A.8})$$

Simplificando os fatores comum, obtém-se:

$$n_+ T_+^{\frac{1}{2}} = n_- T_-^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.9})$$

Resolvendo o sistema de equações formado por (A.6) e (A.9), finalmente obtemos o número de densidade que é denotado por:

$$n_- = 2 \frac{n T_+^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}}, \quad (\text{A.10})$$

e

$$n_+ = 2 \frac{n T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}}. \quad (\text{A.11})$$

A.2 Cisalhamento

Usando a definição de média (3.16) na equação (3.18), nós temos:

$$\mathbf{P}(t, \mathbf{r}) = \int m \mathbf{V} \mathbf{V} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}. \quad (\text{A.12})$$

O tensor $\mathbf{V} \mathbf{V}$ é definido por:

$$\mathbf{V} \mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_1^2 & V_1 V_2 & V_1 V_3 \\ V_2 V_1 & V_2^2 & V_2 V_3 \\ V_3 V_1 & V_3 V_2 & V_3^2 \end{pmatrix}.$$

Calculando o Cisalhamento P_{12}

$$P_{12} = \int m V_1 V_2 f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}. \quad (\text{A.13})$$

Usando a velocidade peculiar (3.15) e substituindo na equação acima, tem-se:

$$P_{12} = \int m (v_1 - u_1)(v_2 - u_2) f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}. \quad (\text{A.14})$$

Sabe-se que $u_1 = 0$, substituindo na equação acima, encontra-se:

$$P_{12} = \int m v_1 (v_2 - u_2) f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}, \quad (\text{A.15})$$

resolvendo os produtos:

$$P_{12} = \int_{v_1 > 0} (m v_1 v_2 - m v_1 u_2) f_+(\mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} + \int_{v_1 < 0} (m v_1 v_2 - m v_1 u_2) f_-(\mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}. \quad (\text{A.16})$$

Aqui, para facilitar os cálculos, será denotado:

$$a_+ = \frac{m}{2k_B T_+}, \quad (\text{A.17})$$

e

$$a_- = \frac{m}{2k_B T_-}. \quad (\text{A.18})$$

Resolvendo as integrais (A.16), encontra-se:

$$\int_{v_1 > 0} m v_1 v_2 f_+(\mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = m n_+ \left(\frac{m}{2\pi k T_+} \right)^{3/2} \frac{\pi u_w}{4a_+^2}, \quad (\text{A.19})$$

$$\int_{v_1 > 0} m v_1 u_2 f_+(\mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = m u_2 n_+ \left(\frac{m}{2\pi k T_+} \right)^{3/2} \frac{\pi}{2a_+^2}, \quad (\text{A.20})$$

$$\int_{v_1 < 0} m v_1 v_2 f_-(\mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = m n_- \left(\frac{m}{2\pi k T_-} \right)^{3/2} \frac{\pi u_w}{4a_-^2}, \quad (\text{A.21})$$

$$\int_{v_1 < 0} m v_1 u_2 f_-(\mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = m u_2 n_- \left(\frac{m}{2\pi k T_-} \right)^{3/2} \left(-\frac{\pi}{2a_-^2} \right). \quad (\text{A.22})$$

Substituindo (A.19), (A.20), (A.21) e (A.22) em (A.16), obtêm-se:

$$P_{12} = m n_+ \left(\frac{m}{2\pi k T_+} \right)^{3/2} \left(\frac{\pi u_w}{4a_+^2} - \frac{\pi u_2}{2a_+^2} \right) + m n_- \left(\frac{m}{2\pi k T_-} \right)^{3/2} \left(\frac{\pi u_w}{4a_-^2} + \frac{\pi u_2}{2a_-^2} \right). \quad (\text{A.23})$$

Substituindo (A.17) and (A.18) na equação acima, têm-se:

$$P_{12} = m n_+ \left(\frac{m}{2\pi k T_+} \right)^{3/2} \left[\frac{\pi u_w}{4} \left(\frac{m}{2k_B T_+} \right)^{-2} - \frac{\pi u_2}{2} \left(\frac{m}{2k_B T_+} \right)^{-2} \right] +$$

$$mn_- \left(\frac{m}{2\pi k T_-} \right)^{3/2} \left[\frac{\pi u_w}{4} \left(\frac{m}{2k_B T_-} \right)^{-2} + \frac{\pi u_2}{2} \left(\frac{m}{2k_B T_-} \right)^{-2} \right]. \quad (\text{A.24})$$

Substituindo (A.10) and (A.11) na equação acima e realizando algumas simplificações, obtém-se:

$$P_{12} = 2nu_w \left(\frac{mk_B}{2\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{T_-^{-1/2} + T_+^{-1/2}} \right), \quad (\text{A.25})$$

que, após simplificações, reduz à:

$$P_{12} = 2nu_w \left(\frac{mk_B}{2\pi} \right)^{1/2} \left[\frac{(T_- T_+)^{1/2}}{\sqrt{T_+} + \sqrt{T_-}} \right]. \quad (\text{A.26})$$

Substituindo (4.5) na equação acima, obtém-se:

$$P_{12} = 2nu_w \left(\frac{mk_B}{2\pi} \right)^{1/2} \left[\frac{(T_0 - \Delta T/2)^{1/2} (T_0 + \Delta T/2)^{1/2}}{(T_0 - \Delta T/2)^{1/2} + (T_0 + \Delta T/2)^{1/2}} \right], \quad (\text{A.27})$$

que é o mesmo que:

$$P_{12} = 2nu_w \left(\frac{mk_B T_0}{2\pi} \right)^{1/2} \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^2}}{\sqrt{1 - \frac{\Delta T}{2T_0}} + \sqrt{1 + \frac{\Delta T}{2T_0}}}, \quad (\text{A.28})$$

após realizar algumas simplificações, obtém-se:

$$P_{12} = \frac{2nu_w k_B T_0}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2k_B T_0} \right)^{1/2} \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^2}}{\sqrt{1 - \frac{\Delta T}{2T_0}} + \sqrt{1 + \frac{\Delta T}{2T_0}}}. \quad (\text{A.29})$$

Substituindo (3.14) into (A.29), obtém-se:

$$P_{12} = \frac{2nu_w k_B T_0}{\sqrt{\pi} v_0} \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{\Delta T}{2T_0}\right)^2}}{\sqrt{1 - \frac{\Delta T}{2T_0} + \sqrt{1 + \frac{\Delta T}{2T_0}}}}, \quad (\text{A.30})$$

em seguida, substitui-se (3.2) em (A.30) para obter:

$$P_{12} = \frac{2u_w P_0}{\sqrt{\pi} v_0} \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{\Delta T}{2T_0}\right)^2}}{\sqrt{1 - \frac{\Delta T}{2T_0} + \sqrt{1 + \frac{\Delta T}{2T_0}}}}. \quad (\text{A.31})$$

Fazendo uma expansão de Taylor em $\frac{\Delta T}{2T_0} = 0$, finalmente obtemos:

$$P_{12} = \frac{2u_w p_0}{\sqrt{\pi} v_0} \left[\frac{1}{2} - \frac{3}{16} \left(\frac{\Delta T}{2T_0}\right)^2 - \frac{17}{256} \left(\frac{\Delta T}{2T_0}\right)^4 + O(x^6) \right]. \quad (\text{A.32})$$

Dessa forma, se considerarmos o problema de Couette, em que $\Delta T = 0$, obtemos:

$$P_{12} = \frac{u_w p_0}{\sqrt{\pi} v_0}. \quad (\text{A.33})$$

A.3 Velocidade Hidrodinâmica \mathbf{u}

Substituindo (3.16) em (3.17) têm-se:

$$\mathbf{u} = \frac{n_+}{n} \left(\frac{m}{2\pi k_B T_+} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_1 > 0} \mathbf{v} \exp \left(-\frac{m(v_1^2 + (v_2 - u_w/2)^2 + v_3^2)}{2k_B T_+} \right) d^3 v_+ \\ + \frac{n_-}{n} \left(\frac{m}{2\pi k_B T_-} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_1 < 0} \mathbf{v} \exp \left(-\frac{m(v_1^2 + (v_2 + u_w/2)^2 + v_3^2)}{2k_B T_-} \right) d^3 v, \quad (\text{A.34})$$

que é o mesmo que:

$$\mathbf{u} = \frac{n_+}{n} \left(\frac{m}{2\pi k_B T_+} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{\pi}{2} \left(\frac{m}{2k_B T_+} \right)^{-2} \hat{i} + \frac{\pi^{3/2} u_w}{4} \left(\frac{m}{2k_B T_+} \right)^{-3/2} \hat{j} \right] + \frac{n_-}{n} \left(\frac{m}{2\pi k_B T_-} \right)^{\frac{3}{2}} \left[-\frac{\pi}{2} \left(\frac{m}{2k_B T_-} \right)^{-2} \hat{i} - \frac{\pi^{3/2} u_w}{4} \left(\frac{m}{2k_B T_-} \right)^{-3/2} \hat{j} \right], \quad (\text{A.35})$$

após ser efetuado novas simplificações, têm-se:

$$\mathbf{u} = \left(\frac{m}{2\pi k_B} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\pi}{2n} \left[\frac{n_+}{T_+^{3/2}} \left(\frac{m}{2k_B T_+} \right)^{-2} - \frac{n_-}{T_-^{3/2}} \left(\frac{m}{2k_B T_-} \right)^{-2} \right] \hat{i} + \frac{\pi^{3/2} u_w}{4n} \left(\frac{m}{2\pi k_B} \right)^{3/2} \left[\frac{n_+}{T_+^{3/2}} \left(\frac{m}{2k_B T_+} \right)^{-3/2} - \frac{n_-}{T_-^{3/2}} \left(\frac{m}{2k_B T_-} \right)^{-3/2} \right] \hat{j}, \quad (\text{A.36})$$

que resulta em:

$$\mathbf{u} = \left(\frac{m}{2k_B} \right)^{-1/2} \left[\frac{n_+}{2n\sqrt{\pi}T_+^{-\frac{1}{2}}} - \frac{n_-}{2n\sqrt{\pi}T_-^{-\frac{1}{2}}} \right] \hat{i} + \left[\frac{n_+ u_w}{4n} - \frac{n_- u_w}{4n} \right] \hat{j}.$$

Substituindo (A.9) na equação acima, têm-se:

$$\mathbf{u} = \left(\frac{m}{2k_B} \right)^{-1/2} \frac{1}{2n\sqrt{\pi}} \left[n_+ T_+^{1/2} - n_- T_-^{1/2} \right] \hat{i} + \frac{u_w}{4n} (n_+ - n_-) \hat{j}. \quad (\text{A.37})$$

Assim, há movimento apenas no eixo-2 e portanto:

$$u_2 = \frac{u_w}{4n} (n_+ - n_-). \quad (\text{A.38})$$

Substituindo (A.10) e (A.11) na equação acima, têm-se:

$$u_2 = \frac{u_w}{4n} \left(\frac{2nT_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} - \frac{2nT_+^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right), \quad (\text{A.39})$$

que, após algumas simplificações, reduz à:

$$u_2 = \frac{u_w}{2} \left(\frac{T_-^{1/2} - T_+^{1/2}}{T_-^{1/2} + T_+^{1/2}} \right). \quad (\text{A.40})$$

Substituindo (4.5) na equação acima, obtém-se:

$$u_2 = \frac{u_w}{2} \left(\frac{(T_0 - \frac{\Delta T}{2})^{1/2} - (T_0 + \frac{\Delta T}{2})^{1/2}}{(T_0 - \frac{\Delta T}{2})^{1/2} + (T_0 + \frac{\Delta T}{2})^{1/2}} \right), \quad (\text{A.41})$$

dividindo numerador e denominador por $T_0^{1/2}$, obtém-se:

$$u_2 = \frac{u_w}{2} \left(\frac{\left(1 - \frac{\Delta T}{2T_0}\right)^{1/2} - \left(1 + \frac{\Delta T}{2T_0}\right)^{1/2}}{\left(1 - \frac{\Delta T}{2T_0}\right)^{1/2} + \left(1 + \frac{\Delta T}{2T_0}\right)^{1/2}} \right). \quad (\text{A.42})$$

Fazendo uma expansão de Taylor em $\frac{\Delta T}{2T_0} = 0$, finalmente obtém-se a velocidade hidrodinâmica, denotada por:

$$u_2 = \frac{u_w}{2} \frac{\Delta T}{2T_0} \left[-\frac{1}{2} - \frac{1}{8} \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^2 - \frac{1}{16} \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^4 + O \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^5 \right]. \quad (\text{A.43})$$

Dessa forma, se considerarmos o problema de Couette, em que $\Delta T = 0$, é verificado que a velocidade hidrodinâmica é nula.

A.4 Fluxo de Calor

Ao substituir a definição de fluxo de calor (3.22) na definição de média (3.16), obtém-se:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \int \frac{mV^2}{2} \mathbf{V} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v}. \quad (\text{A.44})$$

Substituindo (3.15) na equação acima, obtém-se:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{2} \int (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 (\mathbf{v} - \mathbf{u}) f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v} \quad (\text{A.45})$$

desenvolvendo o produto acima,

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{2} \int (v^2 - 2u_2v_2 + u^2)(\mathbf{v} - \mathbf{u}) f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v}, \quad (\text{A.46})$$

novamente, efetuando a propriedade distributiva, obtém-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = & \frac{m}{2} \int_{v_1 < 0} (v^2\mathbf{v} - 2u_2v_2\mathbf{v} + u^2\mathbf{v} - v^2\mathbf{u} + 2u_2v_2\mathbf{u} - u^2\mathbf{u}) f_-(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v} + \\ & \frac{m}{2} \int_{v_1 > 0} (v^2\mathbf{v} - 2u_2v_2\mathbf{v} + u^2\mathbf{v} - v^2\mathbf{u} + 2u_2v_2\mathbf{u} - u^2\mathbf{u}) f_+(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Para facilitar os cálculos, a_- será denotado por:

$$a_- = \frac{m}{2k_B T_-}. \quad (\text{A.48})$$

Agora é necessário resolver integrais em (A.47). Considere a primeira delas:

$$\int_{v_1 < 0} v^2 \mathbf{v} f_-(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v}, \quad (\text{A.49})$$

que é o mesmo que:

$$\int_{v_1 < 0} (v_1^2 + v_2^2 + v_3^2) (v_1 \hat{i} + v_2 \hat{j} + v_3 \hat{k}) f_-(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) . d^3 \mathbf{v} \quad (\text{A.50})$$

Primeiro, será resolvido a componente horizontal (\hat{i}) da integral acima, e as integrais são dadas por:

$$\begin{aligned} & \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 < 0} v_1^3 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a(v_2 + u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ & \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 < 0} v_1 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2^2 \exp(-a(v_2 + u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ & \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 < 0} v_1 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a(v_2 + u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3^2 \exp(-av_3^2) dv_3. \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

Resolvendo as integrais acima, obtém-se:a

$$\frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \left[\left(-\frac{1}{2a^2} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) + \left(-\frac{1}{2a\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\pi(2 + au_w^2)}{4a^{3/2}} \right) + \left(-\frac{1}{2a} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2a^{3/2}} \right) \right] \quad (\text{A.52})$$

Substituindo (A.48) na equação acima, obtém-se:

$$-\frac{n_-}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_-}{m} \right)^{1/2} \left[\left(\frac{2k_B T_-}{m} \right) + \frac{u_w^2}{8} \right] \hat{i}. \quad (\text{A.53})$$

Agora, resolvendo a componente vertical (\hat{j}) da equação (A.50), obtém-se:

$$\begin{aligned} & \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 < 0} v_1^2 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2 \exp(-a(v_2 + u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ & \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 < 0} \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2^3 \exp(-a(v_2 + u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-av_3^2) dv_3 + \end{aligned}$$

$$\frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 < 0} \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2 \exp(-a(v_2 + u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3^2 \exp(-av_3^2) dv_3 \quad (\text{A.54})$$

resolvendo as integrais acima, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \left[\left(\frac{\sqrt{\pi}}{4a^{3/2}} \right) \left(\frac{-u_w \sqrt{\pi}}{2\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) + \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a}} \right) \left(\frac{-\sqrt{\pi}(6 + au_w^2)u_w}{8a^{3/2}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) \right] + \\ \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \left[\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a}} \right) \left(-\frac{u_w \sqrt{\pi}}{2\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2a^{3/2}} \right) \right]. \quad (\text{A.55}) \end{aligned}$$

Substituindo (A.48) na equação acima, obtém-se:

$$- n_- \left[\frac{5u_w k_B T_-}{4m} + \frac{u_w^3}{16} \right] \hat{j}. \quad (\text{A.56})$$

Agora, resolvendo a última componente (\hat{k}) da equação (A.50), obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 < 0} v_1^2 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a(v_2 + u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3 \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 < 0} \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2^2 \exp(-a(v_2 + u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3 \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ \frac{n_-}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 < 0} \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a(v_2 + u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3^3 \exp(-av_3^2) dv_3. \quad (\text{A.57}) \end{aligned}$$

sabe-se que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} v_3 \exp(-av_3^2) dv_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} v_3^3 \exp(-av_3^2) dv_3 = 0. \quad (\text{A.58})$$

Assim, a componente azimutal é nula. Portanto, a integral (A.49) é dada por:

$$\int_{v_1 < 0} v^2 \mathbf{v} f_-(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = -\frac{n_-}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_-}{m} \right)^{1/2} \left[\left(\frac{2k_B T_-}{m} \right) + \frac{u_w^2}{8} \right] \hat{i} - n_- \left[\frac{5u_w k_B T_-}{4m} + \frac{u_w^3}{16} \right] \hat{j}. \quad (\text{A.59})$$

Agora, resolvendo as demais integrais em (A.47), obtêm-se:

$$\int_{v_1 < 0} 2u_2 v_2 \mathbf{v} f_-(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = u_2 n_- \left[\frac{u_w}{2\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \hat{i} + \left(\frac{1}{2a} + \frac{u_w^2}{4} \right) \hat{j} \right], \quad (\text{A.60})$$

$$\int_{v_1 < 0} u_2^2 \mathbf{v} f_-(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = -n_- u_2^2 \left[\frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \hat{i} + \frac{u_w}{4} \hat{j} \right], \quad (\text{A.61})$$

$$\int_{v_1 < 0} u_2 v^2 f_-(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = u_2 n_- \left[\frac{3}{4a} + \frac{u_w^2}{8} \right] \hat{j}, \quad (\text{A.62})$$

$$\int_{v_1 < 0} 2u_2^2 v_2 f_-(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = -\frac{u_2^2 n_- u_w}{2} \hat{j}, \quad (\text{A.63})$$

$$\int_{v_1 < 0} u_2^3 f_-(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = \frac{n_- u_2^3}{2} \hat{j}. \quad (\text{A.64})$$

Para facilitar as contas, a será denotado por:

$$a = \frac{m}{2k_B T_+}. \quad (\text{A.65})$$

Novamente, retorna-se a equação (A.47), têm-se:

$$\int_{v_1 > 0} v^2 \mathbf{v} f_+(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}, \quad (\text{A.66})$$

que é o mesmo que:

$$\int_{v_1>0} (v_1^2 + v_2^2 + v_3^2) (v_1\hat{i} + v_2\hat{j} + v_3\hat{k}) f_+(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v}. \quad (\text{A.67})$$

Primeiramente, será resolvido a componente horizontal (\hat{i}) da integral acima

e as integrais são dadas por:

$$\begin{aligned} & \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1>0} v_1^3 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a(v_2 - u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ & \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1>0} v_1 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2^2 \exp(-a(v_2 - u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ & \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1>0} v_1 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a(v_2 - u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3^2 \exp(-av_3^2) dv_3. \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

Resolvendo as integrais acima, obtém-se:

$$\frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \left[\left(\frac{1}{2a^2} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) + \left(\frac{1}{2a\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\pi(2 + au_w^2)}{4a^{3/2}} \right) + \left(\frac{1}{2a} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2a^{3/2}} \right) \right], \quad (\text{A.69})$$

simplificando os termos acima, têm-se:

$$n_+ \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}} + \frac{u_w^2}{8\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \right] \hat{i}. \quad (\text{A.70})$$

Agora, resolvendo a componente vertical (\hat{j}) da equação (A.67), obtém-se:

$$\begin{aligned} & \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1>0} v_1^2 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2 \exp(-a(v_2 - u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ & \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1>0} \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2^3 \exp(-a(v_2 - u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-av_3^2) dv_3 + \end{aligned}$$

$$\frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 > 0} \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2 \exp(-a(v_2 - u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3^2 \exp(-av_3^2) dv_3, \quad (\text{A.71})$$

resolvendo as integrais acima, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \left[\left(\frac{\sqrt{\pi}}{4a^{3/2}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi} u_w}{2\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) + \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi} u_w (6 + au_w^2)}{8a^{3/2}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \right) \right] + \\ \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a}} \right) \left(\frac{u_w \sqrt{\pi}}{2\sqrt{a}} \right) \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2a^{3/2}} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.72})$$

Simplificando os termos acima, têm-se:

$$n_+ \left[\frac{u_w^3}{16} + \frac{5u_w}{8a} \right] \hat{j}. \quad (\text{A.73})$$

Agora, resolvendo a componente azimutal (\hat{k}) da equação (A.67), têm-se:

$$\begin{aligned} \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 > 0} v_1^2 \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a(v_2 - u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3 \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 > 0} \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v_2^2 \exp(-a(v_2 - u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3 \exp(-av_3^2) dv_3 + \\ \frac{n_+}{\pi^{3/2}} a^{3/2} \int_{v_1 > 0} \exp(-av_1^2) dv_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a(v_2 - u_w/2)^2) dv_2 \int_{-\infty}^{+\infty} v_3^3 \exp(-av_3^2) dv_3. \end{aligned} \quad (\text{A.74})$$

Contudo, sabe-se que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} v_3 \exp(-av_3^2) dv_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} v_3^3 \exp(-av_3^2) dv_3 = 0. \quad (\text{A.75})$$

Portanto, a componente azimutal é nula. Assim, a integral (A.49) é dado por:

$$\int_{v_1 < 0} v^2 \mathbf{v} f_+(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = n_+ \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}} + \frac{u_w^2}{8\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \right] \hat{i} + n_+ \left[\frac{u_w^3}{16} + \frac{5u_w}{8a} \right] \hat{j}. \quad (\text{A.76})$$

Agora, resolvendo as demais integrais em (A.47):

$$\int_{v_1 > 0} 2u_2 v_2 \mathbf{v} f_+(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = u_2 n_+ \left[\frac{u_w}{2\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \hat{i} + \left(\frac{1}{2a} + \frac{u_w^2}{4} \right) \hat{j} \right], \quad (\text{A.77})$$

$$\int_{v_1 > 0} u_2^2 \mathbf{v} f_+(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = n_+ u_2^2 \left[\frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \hat{i} + \frac{u_w}{4} \hat{j} \right], \quad (\text{A.78})$$

$$\int_{v_1 > 0} u_2 v^2 f_+(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = u_2 n_+ \left[\frac{3}{4a} + \frac{u_w^2}{8} \right] \hat{j}, \quad (\text{A.79})$$

$$\int_{v_1 > 0} 2u_2^2 v_2 f_+(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = \frac{u_2^2 n_+ u_w}{2} \hat{j}, \quad (\text{A.80})$$

$$\int_{v_1 > 0} u_2^3 f_+(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v} = \frac{n_+ u_2^3}{2} \hat{j}. \quad (\text{A.81})$$

Finalmente, obtemos uma expressão para o fluxo de calor, denotado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = & -\frac{n_- m}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}} + \frac{u_w^2}{8\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \right] \hat{i} - \frac{n_- m}{2} \left[\frac{5u_w}{8a} + \frac{u_w^3}{16} \right] \hat{j} + \\ & \frac{u_2 n_- m}{2} \left[\frac{u_w}{2\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \hat{i} + \left(\frac{1}{2a} + \frac{u_w^2}{4} \right) \hat{j} \right] - \frac{m n_- u_2^2}{2} \left[\frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \hat{i} + \frac{u_w}{4} \hat{j} \right] + \frac{u_2 n_- m}{2} \left[\frac{3}{4a} + \frac{u_w^2}{8} \right] \hat{j} + \\ & -\frac{u_2^2 n_- u_w m}{4} \hat{j} + \frac{n_- u_2^3 m}{4} \hat{j} + \frac{n_+ m}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}} + \frac{u_w^2}{8\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \right] \hat{i} + \frac{n_+ m}{2} \left[\frac{u_w^3}{16} + \frac{5u_w}{8a} \right] \hat{j} + \\ & \frac{u_2 n_+ m}{2} \left[\frac{u_w}{2\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \hat{i} + \left(\frac{1}{2a} + \frac{u_w^2}{4} \right) \hat{j} \right] + \frac{n_+ u_2^2 m}{2} \left[\frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{a}} \hat{i} + \frac{u_w}{4} \hat{j} \right] + \frac{u_2 n_+ m}{2} \left[\frac{3}{4a} + \frac{u_w^2}{8} \right] \hat{j} + \end{aligned}$$

$$\frac{u_w^2 n_+ u_w m}{4} \hat{j} + \frac{n_+ u_w^3 m}{4} \hat{j}. \quad (\text{A.82})$$

que é o mesmo que:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{mn}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B}{m} \right)^{3/2} (T_+ T_-)^{1/2} \left(\frac{T_+ - T_-}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right) \hat{i}_+$$

$$\frac{m}{2} \left[-\frac{nu_w^3}{2} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right) + \frac{3nu_w^2}{4} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^2 - \frac{nu_w^3}{8} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^3 \right] \hat{j}, \quad (\text{A.83})$$

multiplicando numerador e denominador por $T_0^{3/2}$, no eixo \hat{i} , têm-se:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \left(\frac{2k_B T_0}{m} \right)^{1/2} \frac{2nk_B T_0}{\sqrt{\pi}} \frac{(T_- T_+)^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \frac{\Delta T}{T_0^{3/2}} \hat{i}_+$$

$$\frac{m}{2} \left[-\frac{nu_w^3}{2} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right) + \frac{3nu_w^2}{4} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^2 - \frac{nu_w^3}{8} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^3 \right] \hat{j}. \quad (\text{A.84})$$

Substituindo (3.14) e (3.2) na componente \hat{i} da equação acima, têm-se:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{2P_0 v_0}{\sqrt{\pi}} \frac{(T_- T_+)^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \frac{\Delta T}{T_0^{3/2}} \hat{i}_+$$

$$\frac{m}{2} \left[-\frac{nu_w^3}{2} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right) + \frac{3nu_w^2}{4} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^2 - \frac{nu_w^3}{8} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^3 \right] \hat{j}. \quad (\text{A.85})$$

Há outra maneira de escrever o fluxo de calor $\mathbf{q}(t, \mathbf{r})$. Mas, para isso é necessário conhecer duas razões. Considere a primeira:

$$\frac{(T_- T_+)^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}}. \quad (\text{A.86})$$

Substituindo (4.5) na fração acima, obtém-se:

$$\frac{(T_- T_+)^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} = \frac{(T_0 - \Delta T/2)^{1/2} (T_0 + \Delta T/2)^{1/2}}{(T_0 - \Delta T/2)^{1/2} + (T_0 + \Delta T/2)^{1/2}}. \quad (\text{A.87})$$

Simplificando alguns termos, têm-se:

$$\frac{(T_- T_+)^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} = \frac{T_0^{1/2} \sqrt{1 - \left(\frac{\Delta T}{2T_0}\right)^2}}{\sqrt{1 - \frac{\Delta T}{2T_0}} + \sqrt{1 + \frac{\Delta T}{2T_0}}}, \quad (\text{A.88})$$

realizando uma aproximação pela serie de Taylor em $\Delta T/2T_0 = 0$, obtém-se:

$$\frac{(T_- T_+)^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} = T_0^{1/2} \left[\frac{1}{2} - \frac{3}{16} \left(\frac{\Delta T}{2T_0}\right)^2 - \frac{17}{256} \left(\frac{\Delta T}{2T_0}\right)^4 + O(x^6) \right], \quad (\text{A.89})$$

usando a potência de primeira ordem da equação acima e substituindo em (A.84), têm-se:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{2nk_B T_0}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_0}{m}\right)^{1/2} \frac{T_0^{1/2}}{2} \frac{\Delta T}{T_0^{3/2}} \hat{i} + \frac{m}{2} \left[-\frac{nu_w^3}{2} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}}\right) + \frac{3nu_w^2}{4} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}}\right)^2 - \frac{nu_w^3}{8} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}}\right)^3 \right] \hat{j}, \quad (\text{A.90})$$

multiplicando numerador e denominador da componente \hat{i} da equação acima, têm-se:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{nm}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_0}{m} \right)^{3/2} \frac{\Delta T}{T_0} \hat{i}_+ \\ \frac{m}{2} \left[-\frac{nu_w^3}{2} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right) + \frac{3nu_w^2}{4} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^2 - \frac{nu_w^3}{8} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^3 \right] \hat{j}. \quad (\text{A.91})$$

Assim, a equação (A.85), que é equivalente a (A.84), é dada por:

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{nm}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_0}{m} \right)^{3/2} \frac{\Delta T}{T_0} \hat{i}_+ \\ \frac{m}{2} \left[-\frac{nu_w^3}{2} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right) + \frac{3nu_w^2}{4} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^2 - \frac{nu_w^3}{8} \left(\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} \right)^3 \right] \hat{j}. \quad (\text{A.92})$$

Para simplificar a componente (\hat{j}) da equação acima, é necessário saber a segunda razão abaixo:

$$\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}}. \quad (\text{A.93})$$

Substituindo (4.5) na equação acima, obtém-se:

$$\frac{(T_0 + \frac{\Delta T}{2})^{1/2} - (T_0 - \frac{\Delta T}{2})^{1/2}}{(T_0 + \frac{\Delta T}{2})^{1/2} + (T_0 - \frac{\Delta T}{2})^{1/2}}, \quad (\text{A.94})$$

dividindo numerador e denominador por $T_0^{1/2}$, obtém-se:

$$\frac{\left(1 + \frac{\Delta T}{2T_0}\right)^{1/2} - \left(1 - \frac{\Delta T}{2T_0}\right)^{1/2}}{\left(1 + \frac{\Delta T}{2T_0}\right)^{1/2} + \left(1 - \frac{\Delta T}{2T_0}\right)^{1/2}}. \quad (\text{A.95})$$

Realizando uma aproximação pela série de Taylor em $\frac{\Delta T}{2T_0} = 0$, obtém-se:

$$\frac{T_+^{1/2} - T_-^{1/2}}{T_+^{1/2} + T_-^{1/2}} = \frac{\Delta T}{2T_0} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{8} \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^2 + \frac{1}{16} \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^4 + O \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^5 \right]. \quad (\text{A.96})$$

Assim, finalmente é possível obter o fluxo de calor ao substituir o resultado acima em (A.92):

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{nm}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_0}{m} \right)^{3/2} \frac{\Delta T}{T_0} \hat{i}_+ + nm \left[-\frac{u_w^3}{8} \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right) + \frac{3u_w^2}{32} \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^2 - \frac{u_w^3}{128} \left(\frac{\Delta T}{2T_0} \right)^3 \right] \hat{j}. \quad (\text{A.97})$$