

UNIVERSIDADE REGIONAL DO NOROESTE DO ESTADO DO RIO GRANDE DO
SUL

DCEEng - DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS E ENGENHARIAS
MESTRADO EM MODELAGEM MATEMÁTICA

**ESCOAMENTO DE GASES RAREFEITOS EM DUTOS CILÍNDRICOS:
SOLUÇÕES DE CARÁTER ANALÍTICO A PARTIR DA FORMULAÇÃO
INTEGRAL DO MODELO S**

por

Daiane Pedó Socoloski

Dissertação de Mestrado

Ijuí, junho de 2012

**ESCOAMENTO DE GASES RAREFEITOS EM DUTOS CILÍNDRICOS:
SOLUÇÕES DE CARÁTER ANALÍTICO A PARTIR DA FORMULAÇÃO
INTEGRAL DO MODELO S**

por

Daiane Pedó Socoloski

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, do Departamento de Ciências Exatas e Engenharias - (DCEEEng) da Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul (UNIJUÍ), como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Modelagem Matemática

Área de Concentração: Modelagem Matemática dos Processos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Carmo Henrique Kamphorst

Comissão de Avaliação:

Prof^a. Dra. Mariza de Camargo (CESNORS/UFSM)

Prof. Dr. Antonio Carlos Valdiero (UNIJUÍ/IJUÍ)

Prof. Dr. Paulo Sauzen
Coordenador

Ijuí, 29 de junho de 2012

*Aos meus pais,
Miguel e Gessi,
pelo apoio em todos
os momentos...*

AGRADECIMENTOS

Muitas realizações em nossa vida não dependem unicamente do nosso empenho e dedicação, mas estão relacionadas a pessoas que estão ao nosso lado nos oferecendo todas as condições para alcançá-las.

Assim, agradeço a minha família. A presença de todos foi muito importante para mim. Somente com este apoio consegui vencer as dificuldades e concluir este trabalho. Em especial aos meus pais Miguel e Gessi e as minhas tias Lourdes, Verônica e Deoclides pelas palavras de incentivo de cada dia.

Agradeço ao Professor Dr. Carmo Henrique Kamphorst, pelo constante incentivo, pela orientação, sempre com muita paciência, compreensão e competência esteve sempre me orientando, me ajudou a completar com êxito essa difícil tarefa. Por tudo isso muito obrigado Professor.

Aos professores da pós-graduação, um carinhoso obrigado pelas importantes contribuições na minha formação. A secretária do mestrado Geni, pela dedicação, apoio e pela atenção em todos os momentos. A CAPES, pelo apoio financeiro. Aos colegas de aula e aos amigos, pela amizade, ajuda e companheirismo de todos os dias.

E a Deus por me amparar nos momentos difíceis, por mostrar os caminhos nas horas incertas e me suprir em todas as minhas necessidades. E em especial a todas as pessoas que contribuíram de várias formas, as quais não foram citadas aqui, mas que ajudaram muito para a conclusão de mais esta etapa de minha formação.

RESUMO

Neste trabalho são apresentadas soluções de caráter analítico para dois problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos, que descrevem os efeitos de um gradiente de pressão ou de um gradiente de temperatura, na direção axial de um duto cilíndrico, conhecidos como problema de Poiseuille ou problema *creep* térmico, respectivamente. As soluções são obtidas mediante o emprego de um método espectral, baseado na utilização de uma expansão truncada em termos de splines cúbicas de Hermite e de um esquema de pontos de colocação, na formulação integral do modelo cinético S, usada para modelar o escoamento do gás nos dois problemas estudados. A mesma metodologia já foi empregada anteriormente por Kamphorst [KAMPHORST, 2009] e, uma das maiores dificuldades encontradas para viabilização da aplicação do método, consistiu na avaliação numérica das integrais envolvidas, isso, devido à complexidade e à existência de inúmeras singularidades nos integrandos. Assim sendo, neste trabalho se optou por empregar o esquema de pontos de quadratura de Gauss-Kronrod, o que resultou em maior eficiência na avaliação das integrais que apresentam singularidades, se comparado com o esquema de quadratura de Gauss-Legendre, empregado anteriormente por Kamphorst. Também são apresentados resultados numéricos para quantidades de interesse físico dos problemas estudados, obtidos a partir de uma implementação em linguagem Fortran, bem como, é realizada a análise dos mesmos.

Palavras-chave: Dinâmica de Gases Rarefeitos, Modelo Cinético S, Problema de Poiseuille e *Creep* Térmico.

ABSTRACT

In this project it is presented analytical character solutions for two classical problems of the rarefied gases dynamic, which describe the effects of a pressure gradient or of a temperature gradient, in the axial direction of a cylindrical duct, known as Poiseuille or thermal creep problem, respectively. The solutions are obtained by the application of a spectral method, based on the use of a truncated expansion, in terms of Hermite cubic splines and a scheme of points collocation, in the full formulation of the "S" Kinetic model used for modeling the gas flow in both investigated problems. The same methodology has already been applied previously by Kamphorst and, one of the biggest difficulties found to the viability of the method application, consisted in a numerical evaluation of the integrals involved, this is due to the complexity and the existence of many singularities in the integrals. Thus, in this research it was chosen to implement Gauss-Kronrod quadrature points scheme, which resulted in a greater efficiency in the integral evaluation that presents special aspects, comparing to Gauss-Legendre quadrature scheme, previously used by Kamphorst. It was also presented numerical results for quantities of physical interest of the studied problems, obtained from an implementation in Fortran language, as well as, the analysis is performed.

Keywords: Rarefied Gases Dynamics, S Kinetic Model, Poiseuille and Thermal Creep Problems.

ÍNDICE

1	APRESENTAÇÃO DO TRABALHO DE DISSERTAÇÃO	1
1.1	Introdução	1
1.2	Objetivos	5
1.2.1	Objetivo Geral	5
1.2.2	Objetivos Específicos	5
1.3	Definição do Problema	5
1.4	Estrutura do Documento	6
2	MODELO MATEMÁTICO	8
2.1	Modelagem da Dinâmica dos Gases Rarefeitos	8
2.2	Equação de Boltzmann	12
2.3	Equação Linearizada de Boltzmann	14
2.4	Modelos Cinéticos	16
2.5	Formulação Integro-Diferencial do Modelo Cinético S	17
2.5.1	Formulação Integral do Modelo Cinético S.....	23
3	APLICAÇÃO DO MÉTODO ESPECTRAL	27
3.1	Definição das Splines Cúbicas de Hermite	28
3.2	Emprego da Expansão Truncada em Termos de Splines Cúbicas	30
3.2.1	Aspectos Observados na Avaliação do Núcleo da Equação.....	32
3.2.2	Aspectos Observados na Avaliação dos Termos U_α e V_α	34
3.2.3	Definição do Sistema de Equações	36
3.3	Avaliação Numérica das Integrais	37
3.3.1	Aplicação do Esquema de Quadratura de Gauss-Kronrod	39

4	RESULTADOS NUMÉRICOS	45
4.1	Aspectos Computacionais	45
4.1.1	Análise de Convergência	47
4.2	Quantidades de Interesse físico	53
4.2.1	Perfis de Velocidade	53
4.2.2	Perfil da Taxa de Calor	56
4.2.3	Taxas de Fluxo	58
4.3	Análise dos Perfis de Velocidade em Diferentes Estados de Rarefação	59
5	CONCLUSÕES	62
	REFERÊNCIAS	64

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

DGR	Dinâmica de Gases Rarefeitos
EB	Equação de Boltzmann
ELB	Equação Linearizada de Boltzmann
MEMS	Microeletromecânicos
NEMS	Nanoeletromecânicos
MMC	Mecânica dos Meios Contínuos

LISTA DE SÍMBOLOS

a_*	Comprimento característico [m]
\mathbf{c}	Vetor velocidade [m/s]
c	Magnitude do vetor velocidade [m/s]
c_z	Componente axial do vetor velocidade
$F(\xi, \mu)$	Condição de contorno
$F_n(t/u, r/u)$	Função usada para definir o núcleo da equação integral
$f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c})$	Função de distribuição de partículas
f_0	Distribuição Maxwelliana local
$g(r, \xi, \phi)$	Função de distribuição das partículas
$G(r, \xi, \mu)$	Função de distribuição das partículas do problema generalizado
$h(r, \mathbf{c})$	Função de perturbação das partículas
$I_n(x)$	Função de Bessel modificada de ordem n e primeira classe
$\hat{I}_0(x)$	Produto da função de Bessel modificada I_0 e uma exponencial
$J(f', f)$	Operador de colisão
$K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$	Núcleo de espalhamento
$k_n(c', c)$	Componentes da expansão usada para representar o núcleo de espalhamento
k_B	Constante de Boltzmann [$1.3805 \times 10^{-23} J/K$]
K_n	Número de Knudsen
$K_n(x)$	Função de Bessel modificada de ordem n e segunda classe
$\hat{K}_n(x)$	Produto da função de Bessel modificada K_0 e uma exponencial
$\mathbf{K}(t \rightarrow r)$	Núcleo da equação integral
l	Livre caminho médio [m]
Ma	Número de Mach
m_0	Massa da partícula de gás [Kg]

n_0	Densidade molecular [m^{-3}]
p_0	Pressão [Pa]
$q(r)$	Fluxo de calor (adimensional)
$Q(x)$	Taxa do fluxo de calor (adimensional)
r	Distância radial (adimensional)
R	Raio (adimensional)
R_*	Constante específica do gás [$J/(mol \cdot K)$]
Re	Número de Reynolds
\mathbf{s}	Vetor posição
T_0	Temperatura [K]
u	Velocidade macroscópica (adimensional)
U	Taxa de fluxo do gás (adimensional)
U_∞	Velocidade do fluido [m/s]
W	Frequência de espalhamento
x_i	Pontos de colocação
$Z(r)$	Função incógnita da equação integral
ϕ	Ângulo azimutal
γ	Razão dos calores específicos do gás
$\mathbf{\Gamma}$	Termo fonte
λ_*	Condutividade térmica [$W/(m \cdot K)$]
μ_*	Viscosidade do gás [m^2/s]
μ_k	Pontos de quadratura de Gauss-Kronrod
$\nu(v)$	Frequência de colisão das partículas [s^{-1}]
ω_k	Pesos da quadratura de Gauss-Kronrod
σ_0	Diâmetro molecular [m]
ξ	Componente da velocidade [m/s]
$\Psi(\xi, \mu)$	Função característica

ζ_n	Nós das funções splines
\mathfrak{S}_α	Splines cúbicas de Hermite

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1	Livre Caminho Médio e Comprimento Característico	9
2.2	Vetor Velocidade c de uma Partícula de Gás	17
4.1	Erro relativo ao avaliar $\mathcal{K}_0(0,00003 \rightarrow 0,00002)$	48
4.2	Convergência das Taxas de Fluxo do Gás no Problema de Poiseuille com $R = 5$	49
4.3	Convergência das Taxas de Fluxo do Gás no Problema <i>Creep</i> Térmico com $R = 5$	49
4.4	Convergência das Taxas de Fluxo de Calor no Problema de Poiseuille com $R = 5$	50
4.5	Convergência das Taxas de Fluxo de Calor no Problema <i>Creep</i> Térmico com $R = 5$	50
4.6	Convergência das Taxas de Fluxo do Gás do Problema de Poiseuille com $R = 0,5$ e $R = 5$	52
4.7	Convergência das Taxas de Fluxo de Calor do Problema de Poiseuille com $R = 0,5$ e $R = 5$	52
4.8	Perfis de Velocidade do problema de Poiseuille	60
4.9	Perfis de Velocidade do problema <i>Creep</i> Térmico	61

ÍNDICE DE TABELAS

3.1	Pontos e pesos Gauss-Legendre com $N = 7$	38
3.2	Pontos e pesos Gauss-Kronrod com $N = 15$	38
4.1	Velocidades para o Problema de Poiseuille	54
4.2	Velocidades para o Problema <i>Creep</i> Térmico	55
4.3	Fluxo de Calor para o Problema de Poiseuille	56
4.4	Fluxo de Calor para o Problema <i>Creep</i> Térmico	57
4.5	Taxas de Fluxo do Gás.....	58
4.6	Taxas de Fluxo do Calor	58

CAPÍTULO 1

APRESENTAÇÃO DO TRABALHO DE DISSERTAÇÃO

1.1 Introdução

A recente evolução da indústria eletrônica, das tecnologias de micro e nano-fabricação, da engenharia biomédica, entre outras, possibilitaram o surgimento de inúmeras aplicações envolvendo micro e nano-dispositivos que combinam componentes elétricos e mecânicos, conhecidos como sistemas microeletromecânicos (MEMS) e nano-eletromecânicos (NEMS). Tais dispositivos caracterizam-se por possuírem dimensões totais da ordem de centímetros, mas podem apresentar componentes específicos com dimensões inferiores ao micrômetro e, são capazes de exercer funções como medir (microsensores), analisar, decidir (comandos lógico-eletrônicos) e reagir a respostas do meio (microatuadores), conforme Gad-El-Hak [GAD-EL-HAK, 2005].

Atualmente é possível encontrar aplicações potenciais dos MEMS e NEMS nas mais diversas áreas, entre elas, acelerômetros de airbags, sensores de injeção de ar e sensores de pressão na indústria de automóveis, de acordo com Krueger [KRUEGER, 2007]; microbombas implantáveis responsáveis pelo transporte de microfluidos que são capazes de diagnosticar agentes patogênicos moleculares como vírus, realizar análises biológicas e administrar doses baixas de medicamentos, Liu [LIU et al., 2008]; sensores de silício capazes de medir a altitude e controlar sistemas hidráulicos, sensores para identificar locais de turbulência ou cisalhamento e atuadores capazes de modificar fluxos ao longo da asa de aviões; redes de sensores físicos para o controle do meio ambiente, Aubert [AUBERT, 1999]; e, microtrocaadores de calor para, por exemplo, a refrigeração de micros Chips, Weng e Chen [WENG e CHEN, 2008].

Contudo, o funcionamento dos MEMS e NEMS depende da operação conjunta de um grande número de componentes e, em alguns casos, o bom desempenho destes micro e nano-dispositivos está associado à análise e descrição do comportamento do escoamento de um gás em micro ou nanocanal, fato esse, que impulsionou a realização de pesquisas nesta área.

De acordo com Patsisa [PATSISA et al., 2011], pesquisas recentes revelaram que o comportamento do escoamento de um gás nesta escala pode apresentar muitas diferenças quando comparado com um escoamento do mesmo gás em escalas maiores. De um modo geral, a relação superfície/volume é significativamente maior em escoamentos de escala muito reduzida e, por isso, os efeitos de superfície são mais importantes do que os efeitos de campo em escoamentos desta escala. Isso resulta em um domínio das forças viscosas sobre as forças de inércia, afetando significativamente a transferência de massa, momento e energia. Logo, a modelagem de escoamentos de gases em micro ou nano canais não pode ser realizada mediante a utilização das equações de Navier-Stokes, utilizadas na mecânica dos meios contínuos, conforme Liu [LI, 2008].

A modelagem dos problemas da dinâmica de gases rarefeitos em micro e nanocanais deve levar em conta a composição microscópica ou molecular da matéria, o que remete à utilização da Teoria Cinética dos Gases, Ferziger e Kaper [FERZIGER e KAPER, 1972]. Nela, a descrição da dinâmica de gases rarefeitos pode ser determinada com a utilização da Equação de Boltzmann ou equações modelo dela derivadas, de acordo com Cercignani [CERCIGNANI, 1988].

A equação de Boltzmann estabelece um balanço entre os mecanismos de ganho e perda de partículas de um gás em um espaço de fase e, se baseia em uma função de distribuição de partículas que fornece a distribuição espacial e a distribuição da velocidade das partículas do gás em função do tempo. Consiste de uma equação integro-diferencial que envolve sete variáveis independentes (o tempo, as três componentes da posição e as três componentes da velocidade das partículas do gás), além de fazer uso de expressões muito complicadas para representar o processo de colisão das partículas gasosas.

A complexidade da Equação de Boltzmann faz com que seja usual a utilização de equações modelo dela derivadas (equações que fazem uso de expressões simplificadas para descrever o processo de colisão das partículas, denominadas de modelos cinéticos).

Entretanto, mesmo assim, a obtenção de soluções de caráter analítico está restrita a descrição do comportamento da dinâmica de gases em problemas fisicamente mais simples e, na maioria dos casos, formulados em geometria cartesiana.

Em geometria cilíndrica, uma possibilidade que viabiliza a aplicação de metodologias de caráter analítico consiste no emprego da forma integral de equações modelo. Siewert [SIEWERT, 2000] e Siewert e Valougeorgis [SIEWERT e VALOUGEORGIS, 2002] obtiveram resultados analíticos para dois problemas clássicos da DGR, denominados de Poiseuille e *creep* térmico (problemas em que o escoamento do gás deve-se, exclusivamente, à existência de um gradiente de pressão ou de um gradiente de temperatura, na direção axial do duto, respectivamente), mediante o emprego de uma transformação proposta por Mitsis e Ferziger e a posterior aplicação do método de ordenadas discretas, Barichello e Siewert [BARICHELLO e SIEWERT, 1999] nas formulações integrais dos modelos BGK [BHATNAGAR et al., 1954] e S [SHAKHOV, 1968], respectivamente. Entretanto, a aplicação desta metodologia não é possível em problemas fisicamente mais complexos.

Contudo, problemas da DGR em dutos cilíndricos de micro e nano-dimensões merecem uma atenção especial. Segundo Song e Chen [SONG e CHEN, 2008], a quantidade de interações de partículas de gás com a superfície é maior em nanoporos cilíndricos quando comparados com canais planos da mesma espessura. Tal fato justifica-se devido à existência de uma maior proporção superfície-volume, curvatura e possivelmente maior aspereza nos nanoporos cilíndricos. Como consequência, os nanoporos cilíndricos funcionam melhor para conduzir o calor viscoso para fora do canal, o que pode ser interessante para a refrigeração de microdispositivos, por exemplo.

Em 2009, Kamphorst [KAMPHORST, 2009], em seu trabalho de tese de doutorado também apresentou soluções de caráter analítico para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico a partir do emprego de um método espectral na formulação integral dos modelos BGK e S para os respectivos problemas. O método espectral aplicado consiste na utilização de uma expansão truncada em termos de spline cúbicas de Hermite, associada a utilização de um esquema de pontos de colocação e o emprego do esquema de quadratura de Gauss-Legendre para avaliação das integrais e, além de se mostrar eficiente na obtenção de soluções para os problemas estudados, também forneceu a perspectiva de aplicação do mesmo a uma classe mais ampla de problemas da área da dinâmica de gases rarefeitos, formulados em

geometria cilíndrica, se comparado com a metodologia anteriormente empregada mediante a utilização da transformação de Mitsis, .

A solução apresentada por Kamphorst é dita de caráter analítico, pois apesar de fazer uso de quadraturas para avaliar numericamente as integrais envolvidas, ela é fechada para todo valor da componente radial do duto cilíndrico.

Kamphorst ainda apresentou resultados numéricos obtidos com a implementação da solução de caráter analítico em linguagem Fortran. Nesse sentido, uma das principais dificuldades impostas consistiu na avaliação das integrais envolvidas, visto a sua complexidade e a presença de singularidades nos termos integrados.

Posteriormente, Russi [RUSSI, 2011], em seu trabalho de dissertação, propôs o emprego do esquema de Gauss-Kronrod [KRONROD, 1965] para a avaliação das integrais envolvidas mediante o emprego do método espectral proposto por Kamphorst [KAMPHORST, 2009] para a obtenção de soluções dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico, a partir da formulação integral do modelo BGK. Russi também realizou a análise dos resultados numéricos para quantidades de interesse físico dos dois problemas estudados, obtidos mediante a realização de implementação em Matlab. Assim sendo, constatou que, nas soluções implementadas, o esquema de quadratura de Gauss-Kronrod é mais eficiente do que o esquema de Gauss-Legendre utilizado anteriormente por Kamphorst.

Diante desse contexto, pensando em contribuir no sentido de viabilizar a aplicação do método espectral proposto por Kamphorst [KAMPHORST, 2009] a uma classe mais ampla de problemas da dinâmica de gases rarefeitos em dutos cilíndricos, é proposto neste trabalho, investigar a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod na implementação da solução de caráter analítico obtida mediante emprego da expansão truncada em termos de splines cúbicas de Hermite (associada ao uso de um esquema de pontos de colocação) na formulação integral do modelo S, usada para descrever o escoamento do gás nos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos retos.

Destaca-se ainda, que soluções de caráter analítico para os dois problemas considerados já foram obtidas por Kamphorst, também a partir da formulação integral do modelo S, sem, no entanto, considerar o uso do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod. E, que neste trabalho, propõe-se ainda, a realização da análise de resultados numéricos obtidos a partir da implementação em Fortran.

1.2 Objetivos

Os objetivos que nortearam o presente trabalho estão subdivididos em objetivo geral e objetivos específicos.

1.2.1 Objetivo Geral

O objetivo geral deste trabalho consiste na obtenção e na análise de resultados numéricos para as quantidades de interesse físico dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos retos, a partir da implementação em linguagem Fortran, da solução de caráter analítico obtida mediante aplicação de um método espectral na formulação integral do modelo S e, o emprego do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod.

1.2.2 Objetivos Específicos

Para alcançar o objetivo geral da pesquisa, têm-se os seguintes objetivos específicos:

- Realizar um estudo bibliográfico referente à aplicabilidade e aos conceitos fundamentais da dinâmica de gases rarefeitos;
- Encontrar soluções de caráter analítico para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, a partir do emprego de um método espectral na formulação integral do modelo cinético S;
- Empregar o esquema de quadratura de Gauss-Kronrod na avaliação numérica das integrais envolvidas;
- Implementar a solução obtida em linguagem Fortran;
- Obter soluções numéricas para as quantidades de interesse físico dos problemas estudados;
- Analisar os resultados numéricos obtidos.

1.3 Definição do Problema

O estudo de problemas clássicos têm se justificado, ao longo dos tempos, principalmente no sentido de viabilizar a investigação de novos métodos de resolução, sejam eles

analíticos ou numéricos.

Assim sendo, os dois problemas que são abordados neste estudo referem-se a dois problemas clássicos da área de fenômenos de transporte, o problema de Poiseuille e *creep* térmico, em dutos cilíndricos retos.

O problema de Poiseuille diz respeito à descrição de efeitos causados pela existência de um gradiente de pressão ao longo da direção axial do duto. Nele o escoamento do gás se deve unicamente à existência do gradiente de pressão, escoando no sentido da extremidade do duto que possui a maior pressão para a de menor pressão. Assim, a extremidade com a menor pressão sofre um aumento de pressão e, conseqüentemente, também um aumento da temperatura; enquanto na outra extremidade ocorre justamente o contrário. Logo, tem-se também, um fluxo de calor no sentido inverso ao escoamento do gás.

Já o problema *creep* térmico diz respeito à descrição de efeitos causados pela existência de um gradiente de temperatura ao longo da direção axial do duto. Nele há um fluxo de calor no sentido da extremidade de maior temperatura para a extremidade de menor temperatura. Conseqüentemente, ocorre um aumento na pressão do gás na extremidade de menor temperatura, fato esse que gera um escoamento em sentido oposto ao fluxo de calor.

E, o que se propõe neste trabalho é a análise de resultados numéricos obtidos para grandezas de interesse físico dos dois problemas estudados, tais como: o perfil de velocidade, o perfil do fluxo de calor, a taxa do fluxo do gás e a taxa do fluxo de calor; a partir da implementação da solução de caráter analítico obtida mediante o emprego de um método espectral na formulação vetorial do modelo S, usado para modelar os dois problemas estudados.

1.4 Estrutura do Documento

O presente trabalho está organizado em cinco capítulos, os quais destacam a importância e as ferramentas de análise necessárias a este estudo.

O capítulo 1 é composto por uma breve introdução relacionada com os problemas da dinâmica dos gases rarefeitos (DGR), ressaltando sua aplicabilidade em MEMS e NEMS, como fator motivacional para a realização deste estudo. Além dos objetivos e a definição dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico.

O capítulo 2 aborda aspectos relacionados à modelagem de escoamentos gasosos, destacando o emprego da equação de Boltzmann e as equações modelo dela derivadas. No

mesmo capítulo, também é apresentada a formulação integro-diferencial e vetorial do modelo cinético S , utilizado na descrição dos escoamentos estudados nesse trabalho.

O capítulo 3 destina-se à aplicação do método espectral, baseado na utilização de uma expansão truncada em termos das splines cúbicas de Hermite, afim de obter soluções de caráter analítico para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico. No mesmo capítulo ainda, são realizadas algumas considerações a respeito da utilização do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod na avaliação das integrais envolvidas na formulação.

No capítulo 4, são apresentados e discutidos os resultados numéricos para as quantidades de interesse físico dos problemas estudados, obtidos a partir da implementação em Fortran e são ressaltados alguns aspectos importantes para a futura implementação computacional das soluções. E, por fim, no capítulo 5 encontram-se as conclusões do trabalho.

CAPÍTULO 2

MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo são abordadas algumas particularidades envolvendo a modelagem de escoamentos de gases rarefeitos, com um viés voltado para as possibilidades de obtenção de resultados de caráter analítico. Além destas considerações, é apresentada a formulação integral associada ao emprego do modelo cinético S, usada neste trabalho, para descrever o escoamento de gases rarefeitos em dutos cilíndricos retos nos quais existem gradientes axiais de pressão ou de temperatura, denominados de problemas de Poiseuille ou creep térmico, respectivamente.

2.1 Modelagem da Dinâmica dos Gases Rarefeitos

É comum associar a modelagem do escoamento de gases ao seu estado de rarefação a partir da utilização de um parâmetro adimensional conhecido como número de Knudsen (K_n). O número de Knudsen pode ser definido pela razão entre o livre caminho médio l e um comprimento característico do escoamento a_* , conforme Williams [WILLIAMS, 2001],

$$K_n = \frac{l}{a_*}. \quad (2.1)$$

O comprimento característico normalmente é associado ao diâmetro do escoamento (caso o escoamento esteja delimitado por um duto cilíndrico). Ainda na Eq. (2.1), o livre caminho médio l corresponde à distância média percorrida por uma partícula do gás sem sofrer colisão com outra e, depende do tamanho e da velocidade das partículas gasosas consideradas. Na figura (2.1) é apresentado o duto cilíndrico em função do comprimento e do diâmetro. Entretanto, a literatura dispõe de expressões para avaliação do livre caminho

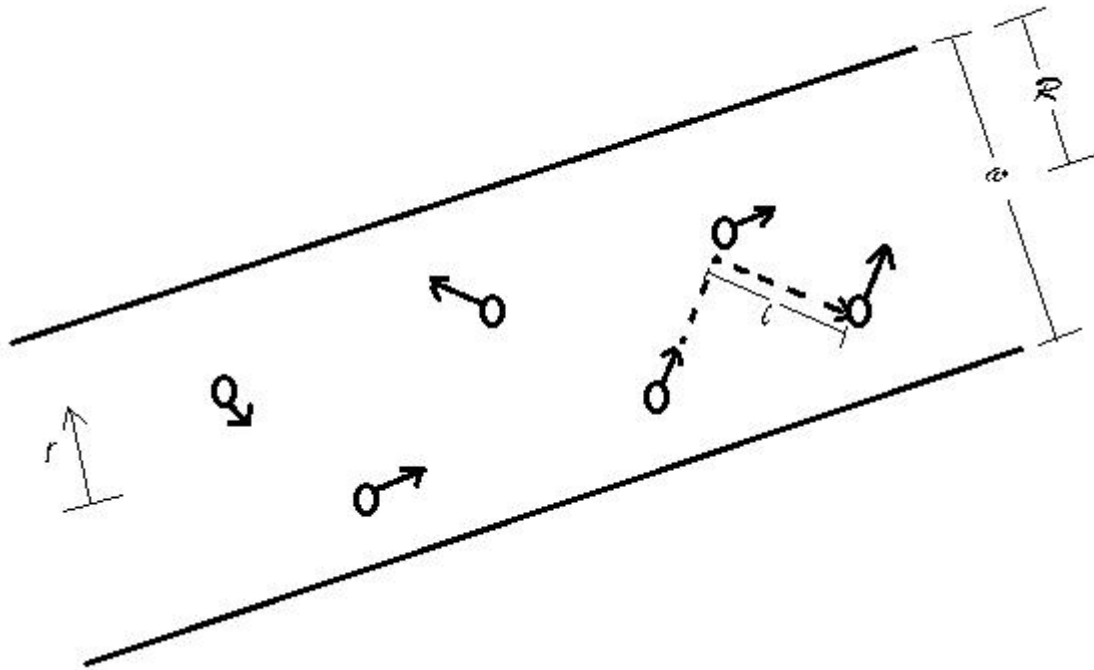


Figura 2.1 – Livre Caminho Médio e Comprimento Característico

médio de um gás mediante a sua viscosidade ou sua condutividade térmica. Segundo Loyalka e Hickey [LOYALKA e HICKEY, 1989], o livre caminho médio pode ser definido em termos da viscosidade μ_* , a partir da expressão

$$l = \frac{(\mu_*/p_0)}{(2k_B T_0/m_0)^{1/2}}, \quad (2.2)$$

em que, $k_B = 1,380658 \times 10^{-23}$ é a constante de Boltzmann, m_0 é a massa de uma partícula do gás e, p_0 e T_0 são, respectivamente, a pressão e a temperatura do gás. Loyalka e Ferziger [LOYALKA e FERZIGER, 1968], por sua vez, usaram

$$l = [4\lambda/(5n_0 k_B)][m_0/(2k_B T_0)]^{1/2}, \quad (2.3)$$

em que, λ e n_0 correspondem, respectivamente, a condutividade térmica e a densidade molecular (número de moléculas por unidade de volume).

Segundo Kakaç, Vasiliev, Bayazitoglu e Yener [KAKAÇ et al., 2005], considerando o caso em que se admite que as partículas do gás tenham o comportamento semelhante à esferas rígidas durante o processo de colisão, é possível associar o número de Knudsen ao

número de Reynolds

$$Re = \frac{n_0 U_\infty a_*}{\mu_*} \quad (2.4)$$

e ao número de Mach

$$Ma = \frac{U_\infty}{\sqrt{\gamma R^* T}}, \quad (2.5)$$

mediante a expressão

$$K_n = \left(\frac{\pi\gamma}{2}\right)^{1/2} \frac{Ma}{Re}. \quad (2.6)$$

Na Eq. (2.5), o termo U_∞ corresponde a velocidade do escoamento gasoso, γ representa a razão entre os calores específicos do gás e na Eq. (2.5) R^* é a constante específica do gás.

Também é comum associar o estado de rarefação de um gás ao seu parâmetro de rarefação, definido por

$$\delta = \frac{Pa_*}{\mu v_m}, \quad (2.7)$$

em que v_m é a velocidade média de escoamento e P correspondem à pressão do gás, respectivamente. Sharipov e Seleznev [SHARIPOV e SELEZNEV, 1998], ainda definem o número de Knudsen em função do parâmetro de rarefação, afirmando que

$$K_n = \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{1}{\delta}. \quad (2.8)$$

Assim sendo, Karniadakis e Beskok [KARNIADAKIS e BESKOK, 2002] definem quatro regimes para o estado de um gás em função do número de Knudsen:

- Contínuo: para $K_n < 0,01$;
- Slip-flow: para $0,01 < K_n < 0,1$;
- Transição: para $0,1 < K_n < 10$;
- Moléculas Livres: para $K_n > 10$.

No regime contínuo (ou hidrodinâmico) o livre caminho médio é muito menor do que o comprimento característico do escoamento e, neste caso, o meio gasoso se comporta como um meio contínuo, o que remete ao emprego das clássicas equações de Navier-Stokes, Roy et. al. [ROY et al., 2003] (conjunto de equações diferenciais parciais acopladas para o campo de velocidade do gás e de outras grandezas macroscópicas como, por exemplo, a temperatura e pressão), juntamente com condições de não deslizamento e não existência de salto de temperatura.

No regime slip-flow a modelagem dos problemas também pode considerar o emprego das Equações de Navier-Stokes. Porém, neste caso, faz-se necessário o uso de condições de contorno que incluam os efeitos de deslizamento e de salto de temperatura (efeitos de rarefação que se devem, respectivamente, às diferenças entre as velocidades e as temperaturas do gás em contato com a parede do canal e do gás que está próximo da parede).

No regime de transição o escoamento gasoso se caracteriza por apresentar efeitos de rarefação moderados e pelo fato de que as interações do gás com a superfície sólida que delimita o escoamento passam a ser importantes, em virtude da magnitude do livre caminho médio ser da mesma ordem do comprimento característico. Enquanto que um escoamento no regime de moléculas livres se caracteriza por ser altamente rarefeito e apresentar interações do gás com a superfície muito mais frequentes do que as colisões entre partículas, o que se deve ao fato, de que neste regime, a magnitude do livre caminho médio ser muito maior do que o comprimento característico. Nestes regimes (transição e moléculas livres) a hipótese do fluido ser considerado um meio contínuo deixa de existir, devendo ser considerado a composição microscópica ou molecular da matéria, na qual a descrição da dinâmica do gás se dá através de recursos estatísticos.

Assim sendo, sob a hipótese de que o gás seja suficientemente rarefeito para que apenas colisões moleculares binárias sejam importantes, o tratamento da teoria cinética infere que a dinâmica do gás pode ser descrita por apenas uma equação, a Equação de Boltzmann (EB).

A EB consiste de uma equação integro-diferencial bastante complexa que se baseia numa função de distribuição de velocidades das partículas gasosas, que é válida para todos os regimes/estados de rarefação, inclusive no regime contínuo onde habitualmente são utilizadas as Equações de Navier-Stokes.

Cabe salientar ainda, que os efeitos de rarefação tornam-se mais importantes em escoamentos que apresentam os maiores números de Knudsen, fato este que está relacionado com valores de livre caminhos médios grandes e/ou ao fato de que o escoamento esteja delimitado por um microcanal. Segundo Bahukudumbi, Park e Beskok [BAHUKUDUMBI et al., 2003], a maioria dos dispositivos MEMS funciona nos regimes de slip-flow e de transição, porém, com a crescente miniaturização dos componentes de dispositivos, em breve, se poderá ter a maioria dos escoamentos nos regimes de transição e de moléculas livres, o que, consequentemente, remete ao emprego da EB ou de formas simplificadas desta equação.

2.2 Equação de Boltzmann

A Equação de Boltzmann (EB) foi introduzida por Ludwig Boltzmann na teoria cinética dos gases em 1872. Ela estabelece um balanço entre os mecanismos de perda e ganho de partículas em um volume qualquer no espaço de fase, sendo constituída por uma função de distribuição $f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c})$, que contém informações sobre a distribuição espacial s e sobre a distribuição c da velocidade das partículas do gás em um determinado instante de tempo t .

Considerando a hipótese de moléculas serem monoatômicas, sem carga elétrica, sofrerem apenas colisões binárias e se comportam como esferas rígidas, a EB pode ser escrita na forma [WILLIAMS, 2001]

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}) + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial}{\partial t} f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}) = J(f', f) \quad (2.9)$$

em que $f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c})$ é a função de distribuição, f' indica distribuição antes da colisão e f a distribuição após a colisão, enquanto que o termo $J(f', f)$ corresponde ao operador de colisão (expressão usada para descrever o processo de colisão e suas consequências), dado por

$$J(f', f) = \int \int \int W(\mathbf{c} \rightarrow \mathbf{c}'; \mathbf{c}_1 \rightarrow \mathbf{c}'_1) \times [f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}')f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}'_1) - f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c})f(t, \mathbf{s}, \mathbf{c}_1)] d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}'_1 d\mathbf{c}', \quad (2.10)$$

sendo \mathbf{c} e \mathbf{c}_1 as velocidades pós-colisionais e $W(\mathbf{c} \rightarrow \mathbf{c}'; \mathbf{c}_1 \rightarrow \mathbf{c}'_1)$ a frequência de espalhamento

diferencial para a colisão entre dois corpos de velocidades pré-colisionais \mathbf{c}' e \mathbf{c}'_1 .

De acordo com Williams [WILLIAMS, 2001] A modelagem dos problemas da DGR exige, ainda, o emprego de condições de contorno apropriadas. Nesse sentido, uma alternativa consiste na utilização do modelo de Maxwell, que especifica a forma como as partículas do gás interagem com a superfície que delimita o escoamento, através da utilização de coeficientes de acomodação térmica e de momento tangencial que representam a fração de partículas que é refletida difusamente pela parede. Conforme Williams [WILLIAMS, 2001], de um modo geral, a condição de contorno para uma superfície localizada na posição \mathbf{s} é dada por

$$-\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} f(t, \mathbf{s}^*, \mathbf{c}) = \int_{\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} > 0} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{n} \Gamma(\mathbf{s}^*, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}) f(t, \mathbf{s}^*, \mathbf{c}') d\mathbf{c}', \quad \mathbf{c} \cdot \mathbf{n} > 0 \quad (2.11)$$

em que \mathbf{n} é um vetor unitário normal ao contorno, $\Gamma(\mathbf{s}^*, \mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c})$ é a probabilidade de uma partícula que colide na superfície \mathbf{s}^* com velocidade \mathbf{c}' ser refletida com velocidade \mathbf{c} .

A aplicação da EB a problemas para os quais a natureza molecular da matéria não pode ser desprezada deu origem à linha de pesquisa da Dinâmica dos Gases Rarefeitos (DGR). Dentre os temas que impulsionaram o desenvolvimento desta área está a aerotermodinâmica espacial, o desenvolvimento de sistemas de vácuo e de nano e microdispositivos, entre outros Sharipov e Selenev [SHARIPOV e SELEZNEV, 1998].

Além de considerar a natureza molecular da matéria, a EB também se diferencia das equações de Navier-Stokes pelo uso das incógnitas. A EB faz uso de uma função incógnita denominada função de distribuição de partículas que, uma vez conhecida, fornece as principais propriedades macroscópicas do gás a partir do cálculo de médias apropriadas. Nas equações de Navier-Stokes, por sua vez, as incógnitas já correspondem as propriedades macroscópicas do fluido.

Outro fato que diferencia a EB das equações de Navier-Stokes consiste na abrangência dos escoamentos gasosos na qual ela pode ser empregada, pois enquanto as equações de Navier-Stokes podem ser aplicadas apenas em problemas nos quais é possível admitir que o comportamento do escoamento gasoso seja semelhante a de um meio contínuo, a EB é válida em todos os regimes de rarefação, inclusive no regime contínuo, Gad-El-Hak [GAD-EL-HAK, 2005].

Contudo, nos regimes contínuo e slip-flow, o emprego das equações de Navier-Stokes têm facilitado a aplicação de metodologias de caráter analítico e/ou métodos numéricos,

Sharipov e Seleznev [SHARIPOV e SELEZNEV, 1998]. Isso se justifica pela complexidade da EB, uma equação integro-diferencial, originalmente não linear (o que pode ser observado no operador de colisão), que envolve sete variáveis independentes (três componentes da variável espacial, três componentes da velocidade e o tempo), além de fazer uso de uma complicada estrutura para descrever o processo de colisão entre as partículas e suas conseqüências. Logo, a obtenção de soluções analíticas e até mesmo numéricas, para os problemas da DGR, a partir da EB, é muito restrita.

2.3 Equação Linearizada de Boltzmann

Uma alternativa que pode ser empregada nos casos em que o escoamento do gás está ao ponto de equilíbrio ou em regime permanente, consiste em escrever a função de distribuição em termos de uma função de perturbação $h(\mathbf{s}, \mathbf{c})$ da distribuição Maxwelliana $f_0(\mathbf{s}, \mathbf{c})$, de modo que se tenha

$$f(\mathbf{s}, \mathbf{c}) = f_0(\mathbf{s}, \mathbf{c})[1 + h(\mathbf{s}, \mathbf{c})]. \quad (2.12)$$

Assim, substituindo a Eq. (2.12) na Eq. (2.9), é possível obter a Equação Linearizada de Boltzmann (ELB).

Para a obtenção da ELB unidimensional (na direção x), por exemplo, inicialmente a função de distribuição de partículas $f(x, \mathbf{c})$ é escrita na forma

$$f(x, \mathbf{c}) = f_0(\mathbf{c})[1 + h(x, \mathbf{c})], \quad (2.13)$$

onde $h(x, \mathbf{c})$ corresponde à perturbação causada à distribuição Maxwelliana

$$f_0(\mathbf{c}) = n_0 [m_0 / (2\pi k_B T_0)]^{3/2} e^{-c^2}, \quad (2.14)$$

na qual n_0 é a densidade molecular, m_0 é a massa de uma partícula de gás, k_B é a constante de Boltzmann e T_0 é a temperatura do gás. Ainda, adimensionalizando a variável espacial em termos do livre caminho médio l , de modo que se tenha

$$\tau = \frac{x}{l}, \quad (2.15)$$

a ELB unidimensional, em coordenadas cartesianas, pode ser escrita na forma [BARICHELLO e SIEWERT, 2003]

$$c_x \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} h(\tau, \mathbf{c}) + \epsilon h(\tau, \mathbf{c}) = \epsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') K(\mathbf{c}', \mathbf{c}) dc'_x dc'_y dc'_z + S(\mathbf{c}). \quad (2.16)$$

Na Eq. (2.16), o termo não homogêneo $S(\mathbf{c})$ corresponde ao termo fonte, $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ é o núcleo de espalhamento das partículas do gás e,

$$\epsilon = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} l, \quad (2.17)$$

sendo σ_0 o diâmetro molecular.

Para a hipótese das partículas se comportarem como esferas rígidas durante o processo de colisão, o núcleo de espalhamento $K(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ exato pode ser expandido em termos de funções de Legendre [PEKERIS e ALTERMAN, 1957], na forma

$$K(\mathbf{c}, \mathbf{c}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (2n+1) (2 - \delta_{0,m}) P_n^m(\mu') P_n^m(\mu) k_n(c', c) \cos m(\xi' - \xi), \quad (2.18)$$

na qual

$$P_n^m(\mu) = \left[\frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right]^{1/2} (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_n(\mu) \quad n \geq m \quad (2.19)$$

são as funções normalizadas de Legendre e, $P_n(\mu)$, são os polinômios de Legendre de ordem n .

Na Eq. (2.18) são usadas as coordenadas esféricas $(c, \arccos \mu, \xi)$ para definir o vetor velocidade. Na mesma equação, os termos $k_n(c', c)$, presentes na expansão do núcleo são apresentados por Barichello e Siewert para $n = 0, 1, 2, 3$ [BARICHELLO e SIEWERT, 2003]. Tais expressões caracterizam-se pelo fato de a igualdade $k_n(c', c) = k_n(c, c')$ ser válida para todo n e por possuírem derivadas descontínuas em $c = c'$. Tais singularidades impõem dificuldades do ponto de vista analítico e numérico, para resolver a ELB, razão pela qual outras abordagens têm sido propostas, na teoria cinética dos gases, no sentido de simplificar a expressão usada para descrever o núcleo de espalhamento, mas que conservem as propriedades físicas do processo de colisão, tais como a conservação de massa, momento e energia. Tais aproximações dão origem às chamadas equações cinéticas ou equações modelo.

2.4 Modelos Cinéticos

Como mencionado anteriormente, os modelos cinéticos consistem de expressões simplificadas usadas para descrever o núcleo de espalhamento $K(\mathbf{c}, \mathbf{c}')$, presente na formulação da ELB. Tais aproximações dão origem às chamadas equações cinéticas ou equações modelo.

De acordo com Siewert [SIEWERT, 2002], para o caso do modelo de esferas rígidas, os núcleos de espalhamento correspondentes aos modelos cinéticos BGK [BHATNAGAR et al., 1954] e S [SHAKHOV, 1968], podem ser escritos simultaneamente pela expressão

$$K(c', c) = 1 + 2c' \cdot c + \frac{2}{3} \left(c'^2 - \frac{3}{2} \right) \left(c^2 - \frac{3}{2} \right) + \beta M(c', c), \quad (2.20)$$

com

$$M(c', c) = \frac{4}{15} c' \cdot c \left(c'^2 - \frac{5}{2} \right) \left(c^2 - \frac{5}{2} \right). \quad (2.21)$$

Nesse contexto, o núcleo de espalhamento do modelo BGK corresponde à Eq. (2.20) com o parâmetro $\beta = 0$, enquanto que para o modelo S o valor é $\beta = 1$. Logo, percebe-se que o modelo S inclui uma ordem superior para a expansão usada para descrever o núcleo de espalhamento.

Segundo Barichello e Siewert [BARICHELLO e SIEWERT, 2003], atualmente são vários os modelos cinéticos que vêm sendo empregados na descrição da DGR, entre eles:

- BGK, Gross-Jackson, S e MRS, empregados para descrever a dinâmica do escoamento de um gás com frequência de colisão constante;
- CLF, CES e CEBS, para gases com frequência de colisão variável;
- McCormack, usado em misturas gasosas.

Historicamente, a utilização de equações modelo têm viabilizado a obtenção de soluções analíticas, particularmente, nos problemas fisicamente mais simples e, em geral, formulados em coordenadas cartesianas.

Em problemas da DGR em geometrias cilíndricas uma alternativa usada, no sentido de viabilizar a aplicação de técnicas semi-analíticas, têm consistido no emprego da forma integral de um modelo cinético, ao invés de sua forma integro-diferencial.

2.5 Formulação Integro-Diferencial do Modelo Cinético S

Para escoamentos de gases rarefeitos no regime permanente e formulados em geometria cilíndrica, a formulação integro-diferencial obtida a partir do emprego do modelo cinético S, pode ser encontrada em Siewert e Valougeorgis [SIEWERT e VALOUGEORGIS, 2002]. Tal formulação é escrita em termos da função de perturbação $h(r, \xi, c_z, \phi)$, na qual r é a componente radial e, ξ , c_z , ϕ são componentes do vetor velocidade, conforme indicado na figura (2.2).

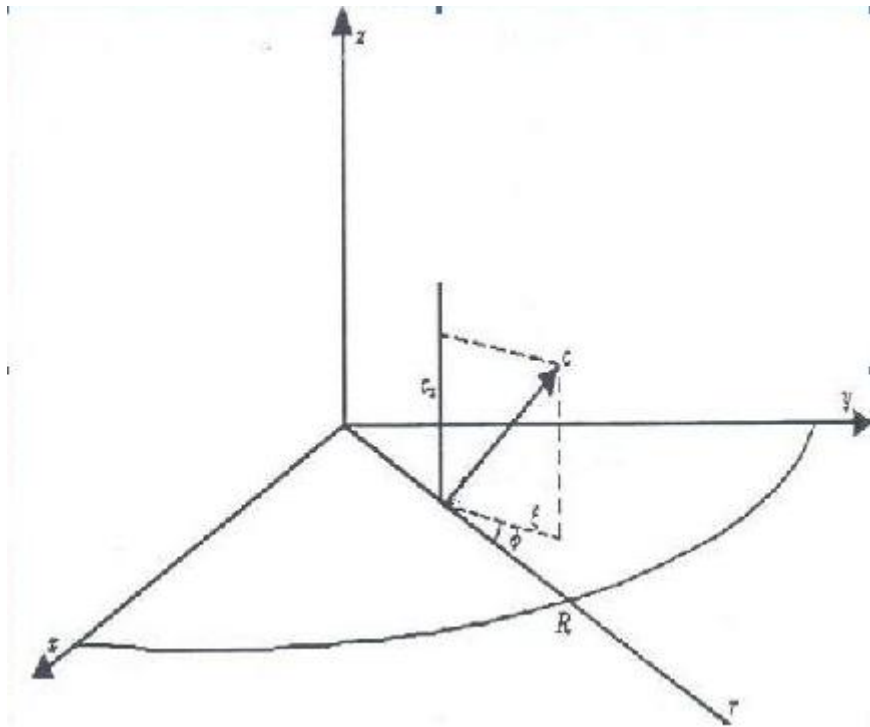


Figura 2.2 – Vetor Velocidade c de uma Partícula de Gás

Na figura (2.2), c denota o vetor velocidade e, c_z é sua componente na direção axial do duto, ξ sua componente na direção radial e ϕ sua componente angular.

Assim sendo, segundo Siewert e Valougeorgis [SIEWERT e VALOUGEORGIS, 2002], a equação cinética integro-diferencial do modelo S, para aplicações em geometria cilíndrica,

é

$$\left[\xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial(r)} - \frac{\text{sen} \phi}{r} \frac{\partial}{\partial(\phi)} \right) + 1 \right] h(r, \xi, c_z, \phi) = \pi^{-3/2} L_S[h](r, \xi, c_z, \phi) + Q_S(\xi, c_z), \quad (2.22)$$

na qual o termo integral é

$$L_S[h](r, \xi, c_z, \phi) = \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(r, \xi', c'_z, \phi') K(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) \xi' d\xi' dc'_z d\phi' \quad (2.23)$$

e o termo não homogêneo é

$$Q_S(\xi, c_z) = -c_z [k_1 + k_2(\xi^2 + c_z^2 - 5/2)], \quad (2.24)$$

sendo k_1 e k_2 constantes que, para o problema de Poiseuille são definidos por $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$ e, para o problema *creep* térmico são $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$, Siewert e Valougeorgis [SIEWERT e VALOUGEORGIS, 2002]. Ainda, na mesma formulação, o núcleo da integral é definido sendo

$$K(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = 1 + 2[c'_z c_z + \xi' \xi \cos(\phi' - \phi)] + (2/3)(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2) + M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}), \quad (2.25)$$

onde

$$M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = (4/15)[c'_z c_z + \xi' \xi \cos(\phi' - \phi)] + (c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2). \quad (2.26)$$

Siewert e Valougeorgis [SIEWERT e VALOUGEORGIS, 2002] também apresentam as condições de contorno

$$h(R, \xi, c_z, \phi) = \alpha D + (1 - \alpha)h(R, \xi, c_z, \phi + \pi), \quad \phi \in [\pi/2, \pi] \quad (2.27)$$

e

$$h(R, \xi, c_z, \phi) = \alpha D + (1 - \alpha)h(R, \xi, c_z, \phi - \pi), \quad \phi \in [\pi, 3\pi/2]. \quad (2.28)$$

Nelas, α corresponde à fração de partículas do gás refletidas difusivamente após colidirem com a superfície sólida do duto que delimita o escoamento do gás e, a constante D é dada

por

$$D = \frac{2}{\pi} \left(\int_0^{\pi/2} + \int_{3\pi/2}^{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} h(R, \xi, c_z, \phi) e^{-c^2 \xi^2} \cos(\phi) d\xi dc_z d\phi. \quad (2.29)$$

Neste contexto ainda, as quantidades de interesse físico são: o perfil de velocidade

$$u(r) = \pi^{-3/2} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c^2} h(r, \xi, c_z, \phi) c_z \xi d\xi dc_z d\phi \quad (2.30)$$

e o fluxo de calor

$$q(r) = \pi^{-3/2} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 5/2) h(r, \xi, c_z, \phi) c_z \xi d\xi dc_z d\phi. \quad (2.31)$$

Logo, percebe-se que as quantidades de interesse físico, $u(r)$ e $q(r)$, dadas pelas Eqs. (2.30) e (2.31), dependem da avaliação completa da função incógnita $h(r, \xi, c_z, \phi)$, da Eq. (2.22).

A equação cinética indicada na Eq. (2.22), juntamente com as condições de contorno apresentadas nas Eqs. (2.27) e (2.28), dependem da variável espacial $r \in [0, R]$ que esta adimensionalizada de modo que R corresponde ao parâmetro de rarefação anteriormente definido na Eq. (2.7). Logo, considerando a Eq. (2.8), para a formulação apresentada têm-se

$$R = \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{1}{K_n}. \quad (2.32)$$

Salienta-se ainda, que a equação do modelo cinético S se diferencia da equação do modelo BGK pela presença do termo $M(\mathbf{c}' : \mathbf{c})$ indicado na Eq. (2.26). Outra diferença marcante entre as equações cinética mencionadas consiste no fato da primeira possibilitar uma abordagem vetorial.

Para se obter a formulação vetorial (integro-diferencial) relativa à equação cinética do modelo S, a partir da Eq. (2.22) e das condições de contorno indicadas nas Eqs. (2.27) e (2.28), inicialmente, a Eq.(2.22) é multiplicada por

$$\phi_1(c_z) = c_z e^{-c_z^2} \quad (2.33)$$

e integrada em todo o c_z , de modo que se tenha

$$\left[\xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial(r)} - \frac{\text{sen} \phi}{r} \frac{\partial}{\partial(\phi)} \right) + 1 \right] h_1(r, \xi, \phi) = L_S[h_1, h_2](r, \xi) + a_1(\xi), \quad (2.34)$$

em que

$$L_S[h_1, h_2](r, \xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\xi'^2} [f_{1,1}(\xi', \xi) h_1(r, \xi', \phi') + f_{1,2}(\xi) h_2(r, \xi', \phi')] \xi' d\xi' d\phi' \quad (2.35)$$

com

$$f_{1,1}(\xi', \xi) = 1 + (2/15)(\xi'^2 - 1)(\xi^2 - 1) \quad (2.36)$$

e

$$f_{1,2}(\xi) = (1/5)(2/3)^{1/2}(\xi^2 - 1). \quad (2.37)$$

Na Eq. (2.34), tem-se ainda

$$h_1(r, \xi, \phi) = \int_{-\infty}^\infty e^{-c_z^2} h(r, \xi, c_z, \phi) c_z dc_z \quad (2.38)$$

e

$$a_1(\xi) = -(1/2)\pi^{1/2}[k_1 + k_2(\xi^2 - 1)]. \quad (2.39)$$

Posteriormente, a Eq. (2.22) também é multiplicada por

$$\phi_2(c_z) = (2/3)^{1/2} c_z (c_z^2 - 3/2) e^{-c_z^2} \quad (2.40)$$

e integrada em todo o c_z , de modo que se tenha

$$\left[\xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial(r)} - \frac{\text{sen} \phi}{r} \frac{\partial}{\partial(\phi)} \right) + 1 \right] h_2(r, \xi, \phi) = L_S[h_1, h_2](r) + a_2, \quad (2.41)$$

em que

$$L_S[h_1, h_2](r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-\xi'^2} [f_{2,1}(\xi') h_1(r, \xi', \phi') + f_{2,2} h_2(r, \xi', \phi')] \xi' d\xi' d\phi' \quad (2.42)$$

com

$$f_{2,1}(\xi') = (1/5)(2/3)^{1/2}(\xi'^2 - 1) \quad (2.43)$$

e

$$f_{2,2}(\xi) = 1/5. \quad (2.44)$$

Na Eq. (2.41), tem-se ainda

$$h_2(r, \xi, \phi) = (2/3)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c_z^2} (c_z^2 - 3/2) h(r, \xi, c_z, \phi) c_z dc_z, \quad (2.45)$$

e

$$a_2 = -(3\pi/8)^{1/2} k_2. \quad (2.46)$$

Assim sendo, a partir das Eqs. (2.34) e (2.41) é possível escrever

$$\left[\xi \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial(r)} - \frac{\text{sen} \phi}{r} \frac{\partial}{\partial(\phi)} \right) + 1 \right] \mathbf{H}(r, \xi, \phi) = \mathbf{L}_S(r, \xi) + \mathbf{A}(\xi), \quad (2.47)$$

em que

$$\mathbf{L}_S(r, \xi) = \frac{1}{\pi} \mathbf{Q}_S(\xi) \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}_S^T(\xi') \mathbf{H}(r, \xi', \phi') \xi' d\xi' d\phi' \quad (2.48)$$

com

$$\mathbf{Q}_S(\xi) = \begin{bmatrix} (2/15)^{1/2}(\xi^2 - 1) & 1 \\ (1/5)^{1/2} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.49)$$

E, as condições de contorno passam a ser escritas na forma

$$\mathbf{H}(R, \xi, \phi) = (1 - \alpha) \mathbf{H}(R, \xi, \phi + \pi), \quad \phi \in [\pi/2, \pi], \quad (2.50)$$

e

$$\mathbf{H}(R, \xi, \phi) = (1 - \alpha) \mathbf{H}(R, \xi, \phi - \pi), \quad \phi \in [\pi, 3\pi/2]. \quad (2.51)$$

Na formulação vetorial apresentada, o vetor $\mathbf{H}(r, \xi, \phi)$ é composto pelas componentes $h_1(r, \xi, \phi)$ e $h_2(r, \xi, \phi)$, das Eqs. (2.38) e (2.45). Enquanto que os termos $a_1(\xi)$ e a_2 , indicados nas Eqs. (2.39) e (2.46), constituem o vetor $\mathbf{A}(\xi)$.

Considerando ainda, a propriedade de simetria

$$\mathbf{H}(r, \xi, 2\pi - \phi) = \mathbf{H}(r, \xi, \phi), \quad \phi \in [0, \pi], \quad (2.52)$$

para todo o r e ξ , usando $\mu = \cos\phi$ para $\phi \in [0, \pi]$ e, definindo

$$\mathbf{I}(r, \xi, \mu) = \mathbf{H}(r, \xi, \arccos \mu), \quad \mu \in [-1, 1], \quad (2.53)$$

é possível reescrever a Eq. (2.47) na forma

$$\left[\xi \left(\mu \frac{\partial}{\partial(r)} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial(\mu)} \right) + 1 \right] \mathbf{I}(r, \xi, \mu) = \mathbf{L}_S(r, \xi) + \mathbf{A}(\xi), \quad (2.54)$$

na qual

$$\mathbf{L}_S(r, \xi) = \frac{2}{\pi} \mathbf{Q}_S(\xi) \int_{-1}^1 \int_0^\infty e^{-\xi'^2} \mathbf{Q}_S^T(\xi') \mathbf{I}(r, \xi', \mu') \xi' d\xi' \frac{d\mu'}{(1 - \mu'^2)^{1/2}}. \quad (2.55)$$

Enquanto que as condições de contorno passam a ser escritas na forma

$$\mathbf{I}(R, \xi, -\mu) = (1 - \alpha) \mathbf{I}(R, \xi, \mu), \quad \mu \in [0, 1]. \quad (2.56)$$

Por fim, multiplica-se a Eq. (2.54) por $\mathbf{Q}_S^{-1}(\xi)$ e, define-se

$$\mathbf{G}(r, \xi, \mu) = \mathbf{Q}_S^{-1}(\xi) \mathbf{I}(r, \xi, \mu). \quad (2.57)$$

E, assim, obtém-se a formulação vetorial, integro-diferencial, associada ao modelo cinético S para geometria cilíndrica deduzida por Siewert e Valougeorgis [SIEWERT e VALOUGEORGIS, 2002],

$$\left[\xi \left(\mu \frac{\partial}{\partial(r)} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial(\mu)} \right) + 1 \right] \mathbf{G}(r, \xi, \mu) = \int_{-1}^1 \int_0^\infty \Psi(\xi', \mu') \mathbf{G}(r, \xi', \mu') d\xi' d\mu' + \mathbf{\Gamma}, \quad (2.58)$$

na qual

$$\mathbf{\Gamma} = -\frac{\pi^{1/2}}{2} \begin{bmatrix} (15/2)^{1/2} k_2 \\ k_1 \end{bmatrix} \quad (2.59)$$

e

$$\Psi(\xi, \mu) = \frac{2}{\pi(1-\mu^2)^{1/2}} \mathbf{Q}_S^T(\xi) \mathbf{Q}(\xi) \xi e^{-\xi^2} \quad (2.60)$$

e, a condição de contorno é

$$\mathbf{G}(R, \xi, -\mu) = (1-\alpha) \mathbf{G}(R, \xi, \mu), \quad \mu \in [0, 1]. \quad (2.61)$$

A Eq. (2.58), juntamente com a condição de contorno indicada pela Eq. (2.61), correspondem a formulação integro-diferencial usualmente utilizada nas aplicações do modelo S em geometria cilíndrica.

2.5.1 Formulação Integral do Modelo Cinético S

A formulação Integral do modelo cinético S foi deduzida por Siewert e Valougeorgis [SIEWERT e VALOUGEORGIS, 2002] a partir da aplicação do método das características na equação integro-diferencial do modelo cinético S, indicada na Eq. (2.58). Esta consiste da equação integral e vetorial

$$\mathbf{Z}(r) = \mathbf{B}(r) + \mathbf{\Gamma} + \int_0^R t \mathbf{K}(t \rightarrow r) \mathbf{Z}(t) dt, \quad (2.62)$$

para $r \in [0, R]$. Nela, o núcleo da equação é definido por

$$\mathbf{K}(t \rightarrow r) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} F_0(t/\tau, r/\tau) \mathbf{\Delta}(\tau) \frac{d\tau}{\tau^2}, \quad (2.63)$$

sendo

$$F_0(t/\tau, r/\tau) = \begin{cases} I_0(t/\tau) K_0(r/\tau), & \text{se } t < r \\ K_0(t/\tau) I_0(r/\tau), & \text{se } t > r \end{cases}, \quad (2.64)$$

e

$$\mathbf{\Delta}(\tau) = \mathbf{\Delta}_0 + \mathbf{\Delta}_2(\tau^2) + \mathbf{\Delta}_4(\tau^4). \quad (2.65)$$

Na Eq. (2.64), os termos $I_0(x)$ e $K_0(x)$ correspondem as funções de Bessel modificadas de ordem zero, de primeira e segunda classe, respectivamente. Note ainda, que a expressão indicada na Eq. (2.64) não é definida nos casos em que $t = r$, fato esse que remete a existência de singularidades no núcleo da equação indicado na Eq. (2.63).

Na Eq. (2.65) tem-se

$$\mathbf{\Delta}_0 = \begin{bmatrix} 3/10 & -(1/30)^{1/2} \\ -(1/30)^{1/2} & 1 \end{bmatrix}, \quad (2.66)$$

$$\mathbf{\Delta}_2 = \begin{bmatrix} -2/15 & (2/15)^{1/2} \\ (2/15)^{1/2} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.67)$$

e

$$\mathbf{\Delta}_4 = \begin{bmatrix} 2/15 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.68)$$

O termo não homogêneo $\mathbf{\Gamma}$, presente na Eq. (2.62), correspondente ao termo fonte

$$\mathbf{\Gamma} = -\frac{\pi^{1/2}}{2} \begin{bmatrix} (15/2)^{1/2} k_2 \\ k_1 \end{bmatrix}, \quad (2.69)$$

no qual k_1 e k_2 são constantes definidas de modo que para o problema de Poiseuille tem-se $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$ e, para o problema *creep* térmico tem-se $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$.

Ainda na Eq. (2.62), o primeiro termo não homogêneo é definido pela expressão

$$\mathbf{B}(r) = \int_{-1}^1 \int_0^\infty \mathbf{\Psi}(\xi, \mu) \mathbf{F}[\xi, \mu_0, (R, r, \mu)] \exp(-s_0(r, \xi, \mu)) d\xi d\mu \quad (2.70)$$

que depende da condição de contorno de superfície refletora

$$\mathbf{F}(\xi, \mu) = (1 - \alpha) \mathbf{G}(R, \xi, \mu), \quad \mu \in [0, 1] \quad e \quad \xi \in [0, \infty]. \quad (2.71)$$

A expressão $\mathbf{B}(r)$ ainda depende da função característica

$$\mathbf{\Psi}(\xi, \mu) = \frac{2}{\pi(1 - \mu^2)^{1/2}} \mathbf{Q}_S^T(\xi) \mathbf{Q}_S(\xi) \xi e^{-\xi^2}, \quad (2.72)$$

na qual

$$\mathbf{Q}_S(\xi) = \begin{bmatrix} (2/15)^{1/2}(\xi^2 - 1) & 1 \\ (1/5)^{1/2} & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.73)$$

além da expressões

$$\mu_0(t, r, \mu) = \frac{1}{t}(t^2 - r^2 + r^2\mu^2)^{1/2} \quad (2.74)$$

e

$$s_0(r, \xi, \mu) = [(R^2 - r^2 + r^2\mu^2)^{1/2} + r\mu]/(\xi), \quad (2.75)$$

Nesse contexto, a obtenção da função incógnita $\mathbf{Z}(r)$, que satisfaz a Eq. (2.62), torna possível o cálculo das quantidades de interesse físico, tais como o perfil de velocidade

$$u(r) = \pi^{-1/2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{G}(r) \quad (2.76)$$

e o perfil do fluxo de calor (do inglês *heat-flow profile*)

$$q(r) = [15/(2\pi)]^{1/2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{G}(r), \quad (2.77)$$

sendo

$$\mathbf{G}(r) = \mathbf{Z}(r) - \mathbf{\Gamma} \quad (2.78)$$

Bem como, a taxa de fluxo do gás (do inglês *particle-flow rate*)

$$U = \frac{4}{R^3} \int_0^R u(r)rdr \quad (2.79)$$

e a taxa do fluxo de calor

$$Q = \frac{4}{R^3} \int_0^R q(r)rdr. \quad (2.80)$$

As expressões indicadas para a determinação das quantidades de interesse físico são válidas tanto para o problema de Poiseuille como para o problema *creep* térmico, sendo que a única diferença existente consiste no emprego adequado das constantes k_1 e k_2 do termo fonte, Γ , indicado na Eq. (2.69) e presente nas Eqs. (2.62) e (2.78).

Em relação à condição de contorno indicada na Eq. (2.71), ainda vale lembrar que $(1 - \alpha)$ corresponde à fração de partículas do gás que é refletida especularmente após colidir na superfície sólida que delimita o escoamento gasoso e, a fração restante, α , é refletida difusamente. Assim sendo, para os casos em que se pode admitir que as paredes sólidas do duto refletem as partículas do gás de modo perfeitamente difuso (com $\alpha = 1$), a condição de contorno indicada é nula e, conseqüentemente, o termo não homogêneo definido na Eq. (2.70) também é nulo, caso que simplifica consideravelmente a formulação e, que será o foco deste trabalho.

CAPÍTULO 3

APLICAÇÃO DO MÉTODO ESPECTRAL

Apresentado e definido o modelo matemático, buscar-se-á neste capítulo, apresentar soluções de caráter analítico para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico em dutos cilíndricos retos, obtidas a partir do emprego de um método espectral na formulação integral do modelo S apresentada no capítulo anterior.

O método espectral empregado consiste, inicialmente, na proposição de uma expansão truncada em termos de splines cúbicas de Hermite (dotada de coeficientes constantes a serem determinados), a fim de representar a função incógnita $\mathbf{Z}(r)$. Tal expansão é substituída na equação integral e, posteriormente, faz-se necessário ainda, a aplicação de um esquema de pontos de colocação a fim de estabelecer um sistema de equações que resultará nos valores constantes dos coeficientes da expansão proposta, que fazem com que esta satisfaça a equação governante.

Nesse contexto, o sistema linear que determina os coeficientes da expansão proposta só é obtido após a avaliação de todas as integrais envolvidas na formulação. Esta, certamente consiste na tarefa mais difícil deste trabalho, tendo em vista a complexidade e a presença de singularidades nos integrandos.

Salienta-se, que a mesma metodologia já foi empregada anteriormente, na resolução dos mesmos problemas, por Kamphorst [KAMPHORST, 2009] e Russi [RUSSI, 2011]. Kamphorst, em seu trabalho de tese de doutorado, fez uso dessa metodologia na obtenção de soluções de caráter analítico a partir da formulação integral dos modelos BGK e S, sendo que optou em utilizar o esquema de quadratura de Gauss-Legendre na avaliação numérica das integrais. Posteriormente, Russi, em seu trabalho de dissertação de mestrado, propôs a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod na avaliação das integrais presentes

na formulação integral do modelo BGK.

Como o emprego da quadratura de Gauss-Kronrod, proposto por Russi, mostrou-se mais eficiente em relação ao emprego da quadratura de Gauss-Legendre proposto inicialmente por Kamphorst, optou-se, neste trabalho, em também fazer uso do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod na avaliação das integrais oriundas do emprego da formulação integral do modelo S.

Assim sendo, neste capítulo serão apresentadas as definições das splines cúbicas de Hermite utilizadas na expansão proposta, detalhes da aplicação do método espectral, considerações sobre a avaliação das integrais mediante a aplicação do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod e, as soluções de caráter analítico obtidas.

Destaca-se, que as soluções obtidas são ditas de caráter analítico, pois apesar das integrais serem avaliadas numericamente, a solução é fechada para todo $r \in [0, R]$.

3.1 Definição das Splines Cúbicas de Hermite

As splines cúbicas de Hermite, utilizadas neste trabalho, são definidas por funções cúbicas em pequenos subintervalos do seu domínio de definição $x \in [0, 1]$, determinados a partir de nós e, são nulas fora destes subintervalos, Schultz [SCHULTZ, 1973].

Nesse contexto, existe um par de funções splines de Hermite, $\mathfrak{S}_\alpha(x)$, de ordem α , associadas a cada nó

$$\zeta_\beta = (\alpha/M)^2, \quad \beta = 0, 1, \dots, M. \quad (3.1)$$

Assim, definido os $M + 1$ nós ζ_β , tem-se $2M + 2$ splines cúbicas, definidas de modo distinto para as ordens pares e ímpares, de modo que

$$\mathfrak{S}_{2\beta}(x) = \psi_\beta(x) \quad (3.2)$$

e

$$\mathfrak{S}_{2\beta+1}(x) = \varphi_\beta(x), \quad (3.3)$$

para $\beta = 0, 1, \dots, M$.

Na definição das funções cúbicas associadas às funções $\psi_\beta(x)$ e $\varphi_\beta(x)$, são utilizadas ainda, as expressões

$$f_\beta(x) = \frac{x - \zeta_{\beta-1}}{\zeta_\beta - \zeta_{\beta-1}} \quad (3.4)$$

e

$$g_\beta(x) = \frac{\zeta_{\beta+1} - x}{\zeta_{\beta+1} - \zeta_\beta}. \quad (3.5)$$

Desse modo, para os subintervalos não nulos, a função ψ é definida de modo que

$$\psi_0(x) = g_0^2(x)[3 - 2g_0(x)], \quad x \in [\zeta_0, \zeta_1], \quad (3.6)$$

$$\psi_\beta(x) = \begin{cases} f_\beta^2(x)[3 - 2f_\beta(x)], & \text{se } x \in [\zeta_{\beta-1}, \zeta_\beta] \\ g_\beta^2(x)[3 - 2g_\beta(x)], & \text{se } x \in [\zeta_\beta, \zeta_{\beta+1}] \end{cases} \quad (3.7)$$

para $\beta = 1, \dots, M - 1$, e

$$\psi_M(x) = f_M^2(x)[3 - 2f_M(x)], \quad x \in [\zeta_{M-1}, \zeta_M]. \quad (3.8)$$

Do mesmo modo para as funções φ , são definidas nos subintervalos não-nulos, pelas expressões

$$\varphi_0(x) = xg_0^2(x), \quad x \in [\zeta_0, \zeta_1], \quad (3.9)$$

$$\varphi_\beta(x) = \begin{cases} (x - \zeta_\beta)f_\beta^2(x), & \text{se } x \in [\zeta_{\beta-1}, \zeta_\beta] \\ (x - \zeta_\beta)g_\beta^2(x), & \text{se } x \in [\zeta_\beta, \zeta_{\beta+1}] \end{cases} \quad (3.10)$$

para $\beta = 1, \dots, M - 1$, e

$$\varphi_M(x) = (x - \zeta_M)f_M^2(x), \quad x \in [\zeta_{M-1}, \zeta_M]. \quad (3.11)$$

Maiores detalhes e/ou propriedades das splines cúbicas de Hermite podem ser encontradas em Schultz [SCHULTZ, 1973].

3.2 Emprego da Expansão Truncada em Termos de Splines Cúbicas

Definidas as splines, kamphorst [KAMPHORST, 2009] propôs representar a função incógnita da Eq. (2.62) por uma expansão truncada em termos de splines cúbicas de Hermite,

$$\mathbf{Z}(r) = \sum_{\alpha=0}^L \mathbf{v}_{\alpha} \mathfrak{S}_{\alpha} \left(\frac{r}{R} \right), \quad (3.12)$$

na qual $\mathfrak{S}_{\alpha}(x)$ indica a spline cúbica de Hermite de ordem α e, \mathbf{v}_{α} corresponde ao vetor

$$\mathbf{v}_{\alpha} = [a_{\alpha} \quad b_{\alpha}]^T, \quad (3.13)$$

de coeficientes a_{α} e b_{α} que devem ser determinados.

Na expansão proposta na Eq. (3.12), o valor da constante L depende do número M de nós utilizados na definição das splines cúbicas de Hermite, segundo a expressão

$$L = 2M + 1, \quad (3.14)$$

pois, conforme visto anteriormente, para um número M de nós são definidas $2M + 2$ funções splines (note que α varia de 0 até L , logo, a partir da Eq. (3.14), constata-se que são definidos $2M + 2$ valores de α).

Substituindo-se a Eq. (3.12) na Eq. (2.62) e admitindo que não há reflexão especular na superfície do duto (caso em que o termo $\mathbf{B}(r)$ é nulo), tem-se

$$\sum_{\alpha=0}^L \left\{ \mathbf{v}_{\alpha} \mathfrak{S}_{\alpha}(r/R) - \int_0^R t \mathbf{K}(t \rightarrow r) \mathbf{v}_{\alpha} \mathfrak{S}_{\alpha}(t/R) dt \right\} = \mathbf{\Gamma}. \quad (3.15)$$

Promovendo as trocas de variáveis

$$x = \frac{r}{R}, \quad (3.16)$$

e

$$y = \frac{t}{R}, \quad (3.17)$$

a Eq. (3.15) passa a ser reescrita na forma

$$\sum_{\alpha=0}^L \{\mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(x) - R^2 [\mathbf{U}_\alpha(x) + \mathbf{V}_\alpha(x)]\} = \mathbf{\Gamma}, \quad (3.18)$$

sendo

$$\mathbf{U}_\alpha(x) = \int_0^x y \mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(y) dy \quad (3.19)$$

e

$$\mathbf{V}_\alpha(x) = \int_x^1 y \mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(y) dy. \quad (3.20)$$

Na Eq. (3.18), optou-se por dividir o intervalo de integração $y \in [0, 1]$, em $y \in [0, x]$ e $y \in [x, 1]$, devido à presença de singularidades (descontinuidades) na expressão usada para indicar o núcleo da equação

$$\mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} F_0(Ry/\tau, Rx/\tau) \mathbf{\Delta}(\tau) \frac{d\tau}{\tau^2}, \quad (3.21)$$

decorrente da não definição do termo

$$F_0(Ry/\tau, Rx/\tau) = \begin{cases} I_0(Ry/\tau) K_0(Rx/\tau), & \text{se } y < x \\ K_0(Ry/\tau) I_0(Rx/\tau), & \text{se } y > x \end{cases} \quad (3.22)$$

para os casos em que $y = x$.

E, a fim de estabelecer um sistema de equações que viabilize a obtenção do valor dos coeficientes constantes a_α e b_α da expansão proposta, é utilizado ainda, o esquema de pontos de colocação,

$$x_i = \left(\frac{i}{L}\right)^2, \quad i = 0, 1, 2, \dots, L. \quad (3.23)$$

Desse modo, obtém-se

$$\sum_{\alpha=0}^L \{\mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(x_i) - R^2 [\mathbf{U}_\alpha(x_i) + \mathbf{V}_\alpha(x_i)]\} = \mathbf{\Gamma}, \quad (3.24)$$

para $i = 0, 1, 2, \dots, L$.

Entretanto, afim de se estabelecer o sistema de equações decorrente da Eq. (3.24), se optou pelo tratamento de algumas particularidades dos termos envolvidos, bem como, pela sua escrita na forma escalar/matricial, facilitando assim, sua futura avaliação [KAMPHORST, 2009].

3.2.1 Aspectos Observados na Avaliação do Núcleo da Equação

A forma de definição do núcleo da equação integral do modelo S impõem várias dificuldades. Dentre elas, cita-se a presença das funções modificadas de Bessel $I_0(x)$ e $K_0(x)$, que divergem quando seus argumentos tendem para o infinito e para zero, respectivamente. Assim, para evitar problemas computacionais envolvendo *overflows*, optou-se em utilizar as expressões

$$\hat{I}_0(x) = I_0(x)e^{-x} \quad (3.25)$$

e

$$\hat{K}_0(x) = K_0(x)e^x \quad (3.26)$$

Diante desse contexto, o termo $F_0(Ry/\tau, Rx/\tau)$, usado na definição do núcleo da equação integral e definido na Eq. (3.22), é escrito na forma

$$\hat{F}_0(Ry/\tau, Rx/\tau) = \begin{cases} \exp\{(y-x)R/\tau\}\hat{I}_0(Ry/\tau)\hat{K}_0(Rx/\tau), & \text{se } y < x \\ \exp\{(x-y)R/\tau\}\hat{K}_0(Ry/\tau)\hat{I}_0(Rx/\tau), & \text{se } y > x \end{cases}. \quad (3.27)$$

Consequentemente, tem-se

$$\mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} \hat{F}_0(Ry/\tau, Rx/\tau) \mathbf{\Delta}(\tau) \frac{d\tau}{\tau^2}. \quad (3.28)$$

Outra dificuldade imposta à avaliação do núcleo da equação, consiste na presença da divisão por τ^2 , que remete a existência de outra singularidade quando τ tende a zero. Uma proposta, utilizada por Kamphorst [KAMPHORST, 2009] para contornar tal problema, consiste em reescrever o núcleo na forma

$$\mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) = \mathcal{K}_0(y \rightarrow x) \mathbf{\Delta}_0 + \mathcal{K}_2(y \rightarrow x) \mathbf{\Delta}_2 + \mathcal{K}_4(y \rightarrow x) \mathbf{\Delta}_4, \quad (3.29)$$

onde

$$\mathcal{K}_0(y \rightarrow x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} \hat{F}_0(Ry/\tau, Rx/\tau) \frac{d\tau}{\tau^2}, \quad (3.30)$$

$$\mathcal{K}_2(y \rightarrow x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} \hat{F}_0(Ry/\tau, Rx/\tau) d\tau \quad (3.31)$$

e

$$\mathcal{K}_4(y \rightarrow x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty e^{-\tau^2} \hat{F}_0(Ry/\tau, Rx/\tau) \tau^2 d\tau \quad (3.32)$$

são funções escalares e, as matrizes $\mathbf{\Delta}_0$, $\mathbf{\Delta}_2$, e $\mathbf{\Delta}_4$, estão definidas no capítulo anterior, nas Eqs. (2.66), (2.67) e (2.68).

Outro aspecto já empregado anteriormente por Kamphorst [KAMPHORST, 2009], no intuito de facilitar a posterior implementação computacional, consiste em reescrever o núcleo da equação integral na forma matricial

$$\mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx) = \begin{bmatrix} k_{11}(y; x) & k_{12}(y; x) \\ k_{21}(y; x) & k_{22}(y; x) \end{bmatrix}, \quad (3.33)$$

obtida mediante a substituição dos termos $\mathbf{\Delta}_0$, $\mathbf{\Delta}_2$ e $\mathbf{\Delta}_4$ pelas suas respectivas expressões, na Eq. (3.29). Nela, tem-se

$$k_{11}(y; x) = \frac{3}{10} \mathcal{K}_0(y \rightarrow x) - \frac{2}{5} \mathcal{K}_2(y \rightarrow x) + \frac{2}{15} \mathcal{K}_4(y \rightarrow x), \quad (3.34)$$

$$k_{12}(y; x) = - \left(\frac{1}{30} \right)^{1/2} \mathcal{K}_0(y \rightarrow x) + \left(\frac{2}{15} \right)^{1/2} \mathcal{K}_2(y \rightarrow x), \quad (3.35)$$

$$k_{22}(y; x) = \mathcal{K}_0(y \rightarrow x) \quad (3.36)$$

e

$$k_{21}(y; x) = k_{12}(y; x). \quad (3.37)$$

3.2.2 Aspectos Observados na Avaliação dos Termos U_α e V_α

Diante das alterações sugeridas na forma de escrever o núcleo da equação, $\mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx)$, faz-se necessário também, considerá-las na descrição dos termos $\mathbf{U}_\alpha(x_i)$ e $\mathbf{V}_\alpha(x_i)$, definidos nas Eqs. (3.19) e (3.20).

Entretanto, primeiramente, é importante do ponto de vista do esforço computacional requerido para sua futura avaliação, que se considerem os intervalos de integração $[d_\alpha, e_\alpha]$ para os quais as splines cúbicas $\mathfrak{S}_\alpha(x)$ são definidas como sendo não nulas. Desse modo, a Eq. (3.19) pode ser reescrita na forma

$$\mathbf{U}_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \leq d_\alpha \quad (3.38)$$

e

$$\mathbf{U}_\alpha(x_i) = \int_{d_\alpha}^{n_{\alpha,i}} y \mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx_i) \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(y) dy, \quad \text{se } x_i > d_\alpha \quad (3.39)$$

com

$$n_{\alpha,i} = \min(x_i, e_\alpha) \quad (3.40)$$

Do mesmo modo, a Eq. (3.20) também pode ser expressa por

$$\mathbf{V}_\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \geq e_\alpha \quad (3.41)$$

e

$$\mathbf{V}_\alpha(x_i) = \int_{m_{\alpha,i}}^{e_\alpha} y \mathbf{K}(Ry \rightarrow Rx_i) \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha(y) dy, \quad \text{se } x_i < e_\alpha \quad (3.42)$$

com

$$m_{\alpha,i} = \max(x_i, d_\alpha). \quad (3.43)$$

Posteriormente, também é possível reescrever o termo vetorial, $\mathbf{U}_\alpha(x_i)$, na forma

matricial

$$\mathbf{U}_\alpha(x_i) = \begin{bmatrix} u_1^\alpha(x_i) \\ u_2^\alpha(x_i) \end{bmatrix}, \quad (3.44)$$

com

$$u_1^\alpha(x_i) = a_\alpha g_{1,1}^\alpha(x_i) + b_\alpha g_{1,2}^\alpha(x_i) \quad (3.45)$$

e

$$u_2^\alpha(x_i) = a_\alpha g_{2,1}^\alpha(x_i) + b_\alpha g_{2,2}^\alpha(x_i), \quad (3.46)$$

sendo a_α e b_α os coeficientes da expansão proposta na Eq. (3.12), enquanto que os termos $g_{p,q}^\alpha(x_i)$, para $p = \{1, 2\}$ e $q = \{1, 2\}$, são definidos em termos das expressões $k_{p,q}(y, x_i)$ dadas nas Eqs. (3.34) à (3.37), de modo que

$$g_{p,q}^\alpha(x_i) = 0 \quad \text{se} \quad x_i \leq d_\alpha \quad (3.47)$$

e

$$g_{p,q}^\alpha(x_i) = \int_{d_\alpha}^{n_{\alpha,i}} y k_{pq}(Ry \rightarrow Rx_i) \mathfrak{S}_\alpha(y) dy \quad \text{se} \quad x_i > d_\alpha. \quad (3.48)$$

Da mesma forma, o vetor $\mathbf{V}_\alpha(x_i)$ é reescrito na forma matricial

$$\mathbf{V}_\alpha(x_i) = \begin{bmatrix} v_1^\alpha(x_i) \\ v_2^\alpha(x_i) \end{bmatrix}, \quad (3.49)$$

sendo

$$v_1^\alpha(x_i) = a_\alpha h_{1,1}^\alpha(x_i) + b_\alpha h_{1,2}^\alpha(x_i) \quad (3.50)$$

e

$$v_2^\alpha(x_i) = a_\alpha h_{2,1}^\alpha(x_i) + b_\alpha h_{2,2}^\alpha(x_i), \quad (3.51)$$

com

$$h_{p,q}^\alpha(x_i) = 0 \quad \text{se } x_i \geq e_\alpha \quad (3.52)$$

e,

$$h_{p,q}^\alpha(x_i) = \int_{m_{\alpha,i}}^{e_\alpha} y k_{pq}(Ry \rightarrow Rx_i) \mathfrak{S}_\alpha(y) dy \quad \text{se } x_i < e_\alpha, \quad (3.53)$$

para $p = \{1, 2\}$ e $q = \{1, 2\}$.

3.2.3 Definição do Sistema de Equações

Uma vez reescritos o núcleo da equação e os termos $\mathbf{U}_\alpha(x_i)$ e $\mathbf{V}_\alpha(x_i)$ na forma escalar/matricial apresentada anteriormente, é possível reescrever o sistema definido pela Eq. (3.24), na forma

$$\begin{cases} \sum_{\alpha=0}^L \{a_\alpha [\mathfrak{S}_\alpha(x_i) - R^2 A_{1,1}(x_i)] - b_\alpha R^2 A_{1,2}(x_i)\} = B_1 \\ \sum_{\alpha=0}^L \{a_\alpha [\mathfrak{S}_\alpha(x_i) - R^2 A_{2,1}(x_i)] - b_\alpha R^2 A_{2,2}(x_i)\} = B_2 \end{cases}, \quad (3.54)$$

para $i = 0, 1, \dots, L$, no qual

$$A_{p,q} = g_{p,q}^\alpha(x_i) + h_{p,q}^\alpha(x_i), \quad (3.55)$$

para $p = \{1, 2\}$ e $q = \{1, 2\}$, sendo $g_{p,q}^\alpha(x_i)$ e $h_{p,q}^\alpha(x_i)$ dados pelas expressões indicadas nas Eqs. (3.47) e (3.48) e, (3.52) e (3.53), respectivamente. E, os termos B_1 e B_2 definidos pelas componentes do termo fonte $\mathbf{\Gamma}$, de modo que

$$B_1 = -\frac{\pi^{1/2}}{2} \left(\frac{15}{2}\right)^{1/2} k_2 \quad (3.56)$$

e

$$B_2 = -\frac{\pi^{1/2}}{2} k_1. \quad (3.57)$$

O sistema assim definido, na Eq. (3.54), é linear e de ordem $2L + 2 = 4M + 4$ (sendo L a ordem da expansão utilizada e, M o número de nós usados na definição das splines cúbicas). Assim, uma vez avaliadas todas as integrais presentes no sistema (3.54), é possível

a obtenção das componentes, a_α e b_α , do vetor \mathbf{v}_α da expansão proposta para $\mathbf{Z}(r)$ na Eq. (3.12).

Conhecidos o vetor de coeficientes \mathbf{v}_α que fazem com que a expansão proposta para $\mathbf{Z}(r)$ satisfaça a equação integral do modelo S, aqui utilizada para descrever o escoamento de um gás rarefeito em um duto cilíndrico reto, é possível determinar quantidades de interesse físico para os dois problemas estudados, tais como o perfil de velocidade

$$u(r) = \pi^{-1/2}[0 \ 1]\mathbf{G}(r) \quad (3.58)$$

e o perfil do fluxo de calor

$$q(r) = [15/(2\pi)]^{1/2}[1 \ 0]\mathbf{G}(r), \quad (3.59)$$

sendo

$$\mathbf{G}(r) = \sum_{\alpha=0}^L \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha\left(\frac{r}{R}\right) - \mathbf{\Gamma}. \quad (3.60)$$

Bem como, a taxa de fluxo do gás e a taxa de fluxo de calor, através das Eqs. (2.79) e (2.80), respectivamente.

Nesse contexto, convém salientar que as expressões citadas para a obtenção das quantidades de interesse físico são as mesmas para os dois problemas estudados, diferenciando apenas quanto à utilização correta das constantes k_1 e k_2 nos termos indicados pelas Eqs. (3.56) e (3.57), lembrando que para o problema *creep* térmico devem ser usados $k_1 = 0$ e $k_2 = 1$, enquanto que para o problema de Poiseuille, $k_1 = 1$ e $k_2 = 0$, Kamphorst [KAMPHORST, 2009].

3.3 Avaliação Numérica das Integrais

Para a avaliação numérica das integrais presentes no sistema linear definido na Eq. (3.54), optou-se pela utilização do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod, visto que já foi utilizado com êxito no trabalho de dissertação de Russi [RUSSI, 2011].

O esquema de quadratura de Gauss-Kronrod consiste de uma variação do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, cuja existência se deve a Alexander Kronrod.

Para cada n pontos de quadratura de Gauss-Legendre, o esquema de Gauss-Kronrod faz uso destes e mais $n + 1$ pontos. Assim sendo, o esquema de Gauss-Kronrod de ordem quinze, por exemplo, possui sete pontos da quadratura de Gauss-Legendre, como pode ser visto nas Tabelas 3.1 e 3.2, Kronrod [KRONROD, 1965].

Tabela 3.1 – Pontos e pesos Gauss-Legendre com $N = 7$

Pontos	Pesos
$\pm 0.949107912342759^*$	0.129484966168870
$\pm 0.741531185599394^*$	0.279705391489277
$\pm 0.405845151377397^*$	0.381830050505119
0^*	0.417959183673469

Tabela 3.2 – Pontos e pesos Gauss-Kronrod com $N = 15$

Pontos	Pesos
± 0.991455371120813	0.022935322010529
$\pm 0.949107912342759^*$	0.063092092629979
± 0.864864423359769	0.104790010322250
$\pm 0.741531185599394^*$	0.140653259715525
± 0.586087235467691	0.169004726639267
$\pm 0.405845151377397^*$	0.190350578064785
± 0.207784955007898	0.204432940075298
0^*	0.209482141084728

Note que os pontos adicionais aos da quadratura de Gauss-Legendre intercalam-se perfeitamente a estes. Outro aspecto importante, a ser observado, consiste no fato de que para um número par N de pontos de quadratura de Gauss-Legendre, tem-se um número ímpar $2N + 1$ pontos de Gauss-Kronrod.

No presente trabalho, o cálculo dos pontos e pesos da quadratura de Gauss-Kronrod é realizado mediante a utilização de uma sub-rotina sugerida por Calió et. al. [CALIÒ et al., 1986], que faz uso de um problema de autovalores.

O emprego do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod se dá do mesmo modo que o esquema de pontos de quadratura de Gauss-Legendre, sendo

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{n=1}^N \omega_n f(\mu_n), \quad (3.61)$$

onde ω_n e μ_n corresponde aos pesos e pontos da quadratura, respectivamente, e, N é a ordem da quadratura.

Logo, para avaliação de integrais com intervalos de integração diferentes de $[-1, 1]$, faz-se necessário, primeiramente, a realização de uma troca de variáveis com o intuito de se ter tal intervalo. Nesse contexto, no presente trabalho, optou-se pela realização de duas formas de trocas de variáveis. Quando o intervalo de integração é $x \in [a, b]$,

$$z = \frac{2x - a - b}{b - a}, \quad (3.62)$$

de modo que se tenha

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{(b - a)}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{(b - a)z + a + b}{2}\right) dz. \quad (3.63)$$

E, para os intervalos $x \in [0, \infty]$,

$$z = 2e^{-x} - 1, \quad (3.64)$$

de modo que se tenha

$$\int_0^\infty f(x)dx = \int_{-1}^1 \frac{2}{z + 1} f\left(-\ln\left(\frac{z + 1}{2}\right)\right) dz. \quad (3.65)$$

3.3.1 Aplicação do Esquema de Quadratura de Gauss-Kronrod

A avaliação dos termos $A_{1,1}$, $A_{1,2}$, $A_{2,1}$, e $A_{2,2}$ do sistema linear (3.54) depende, entre outros, da avaliação do núcleo da equação integral, conforme definido na Eq. (3.29).

A subdivisão proposta em (3.29), remete à avaliação dos termos $\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i)$, $\mathcal{K}_2(Ry \rightarrow Rx_i)$ e $\mathcal{K}_4(Ry \rightarrow Rx_i)$, definidos em (3.30), (3.31) e (3.32), respectivamente. Tal abordagem, já sugerida por Kamphorst [KAMPHORST, 2009], mostrou ser bastante eficiente, visto que deste modo o termo $\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i)$ é definido do mesmo modo que o núcleo da equação integral do modelo BGK (já avaliado numericamente por Kamphorst) e, os demais não impõem maiores problemas para sua avaliação numérica por quadratura.

O termo $\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i)$, da Eq. (3.30), apresenta uma divisão por τ^2 , o que impõe dificuldades na avaliação numérica desta integral nas proximidades de $\tau = 0$, particularmente quando os valores de y e x_i estiverem bastante próximos. No entanto, quando y e x_i não

estiverem bastante próximos, como por exemplo, quando $|Ry - Rx_i| \geq 0,05$, as dificuldades numéricas, impostas pela divisão por τ^2 , são minimizadas pelo comportamento numérico das funções modificadas de Bessel.

Diante desse contexto, uma alternativa já utilizada na avaliação do núcleo da equação integral do modelo BGK [KAMPHORST, 2009; RODRIGUES et al., 2009; RUSSI, 2011], consiste em somar e subtrair uma outra integral (sem evidentemente alterar o integrando final), de forma que a integral resultante seja mais fácil de ser avaliada. Seguindo esta metodologia, a avaliação da integral $\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i)$ é realizada mediante a consideração de dois casos, um quando $|Ry - Rx_i| \geq 0,05$ e outro quando $|Ry - Rx_i| < 0,05$.

No primeiro caso a avaliação do núcleo é realizada mediante a troca da variável τ , efetuada conforme sugere (3.64) e, a consequente aplicação do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod. Logo, tem-se

$$\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \sum_{n=1}^{N_\tau} \omega_n h_n(y, x_i) z_n^2, \quad (3.66)$$

sendo N_τ correspondente ao número de pontos de quadratura de Gauss-Kronrod ($\mu_n \in [-1, 1]$) e de seus respectivos pesos (ω_n), empregados na avaliação numérica da integral, enquanto que

$$h_n(y, x_i) = \frac{e^{-\sigma_n^2} \hat{F}_0(Ry/\sigma_n, Rx_i/\sigma_n)}{\mu_n + 1}, \quad (3.67)$$

e,

$$z_n = -\ln \left(\frac{\mu_n + 1}{2} \right). \quad (3.68)$$

Assim, no caso em que $|Ry - Rx_i| \geq 0,05$, o emprego da expressão (3.66) possibilita a obtenção de resultados com no mínimo sete dígitos de precisão (observado mediante a comparação dos resultados obtidos com a utilização de (3.66) e os resultados da avaliação da integral no Maple), com o uso de cinquenta pontos de quadratura. Entretanto, tal metodologia não mantém a mesma precisão a medida que y e x_i assumem valores mais próximos.

Consequentemente, para o caso em que $|Ry - Rx_i| < 0,05$, optou-se por utilizar

uma metodologia que consiste em somar e subtrair um novo termo na Eq. (3.30). Assim, promovendo a subtração e a soma da integral

$$S_1(y, x_i) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty \hat{F}_0(Ry/\tau, Rx_i/\tau) \frac{d\tau}{\tau^2} \quad (3.69)$$

à Eq. (3.30), tem-se

$$\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty \left(e^{-\tau^2} - 1 \right) \hat{F}_0(Ry/\tau, Rx_i/\tau) \frac{d\tau}{\tau^2} + S_1(y, x_i). \quad (3.70)$$

Propõe-se então, a realização da troca de variável

$$s = \frac{1}{1 + \tau}, \quad (3.71)$$

que possibilita reescrever a Eq. (3.70) na forma

$$\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^1 H(y, x_i, s) ds + S_1(y, x_i), \quad (3.72)$$

em que

$$H(y, x_i, s) = \frac{e^{-\tau(s)^2} - 1}{(1 - s)^2} \hat{F}_0\left(Ry/\tau(s), Rx_i/\tau(s)\right), \quad (3.73)$$

sendo

$$\tau(s) = \frac{1}{s} - 1. \quad (3.74)$$

Efetuada ainda a soma e a subtração de

$$S_2 = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^1 e^{-s} \hat{K}_0(s) ds \quad (3.75)$$

junto à Eq. (3.72), obtém-se

$$\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^1 \left\{ H(y, x_i, s) + e^{-s} \hat{K}_0(s) \right\} ds + S_1(y, x_i) - S_2. \quad (3.76)$$

A avaliação numérica da primeira integral da Eq. (3.76) pode ser realizada através da troca da variável s , conforme sugerida em (3.63) e, o posterior uso de um esquema de

quadratura de Gauss-Kronrod. Desse modo, obtém-se

$$\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i) = \frac{1}{\pi^{1/2}} \sum_{n=1}^{N_\tau} \omega_n \left\{ H(y, x_i, s_n) + e^{-s_n} \hat{K}_0(s_n) \right\} + S_1(y, x_i) - S_2, \quad (3.77)$$

em que

$$s_n = \frac{\mu_n + 1}{2}. \quad (3.78)$$

Diante disso, o termo $S_1(y, x_i)$ pode ser avaliado no software Maple, resultando em

$$S_1(y, x_i) = \frac{2\pi^{-1/2}}{Rx_i} E_K(y/x_i) \quad \text{se } y < x_i \quad (3.79)$$

ou

$$S_1(y, x_i) = \frac{2\pi^{-1/2}}{Ry} E_K(x_i/y) \quad \text{se } y > x_i, \quad (3.80)$$

sendo $E_K(x)$ a integral elíptica completa de primeira ordem [ABRAMOWITZ e STEGUN, 1965], a qual, nesse trabalho, é avaliada numericamente em Fortran, com auxílio de uma subrotina sugerida no próprio livro do Abramovitz e Stegun. Ainda, o termo S_2 , presente nas Eqs. (3.79) e (3.80), é avaliado no software Maple, resultando em 1,40202222809807033.

Os termos $\mathcal{K}_2(Ry \rightarrow Rx_i)$ e $\mathcal{K}_4(Ry \rightarrow Rx_i)$, por sua vez, não possuem a divisão por τ^2 e, conseqüentemente, não apresentam dificuldades para a sua avaliação numérica por quadratura, apesar das descontinuidades nos casos em que $y = x$, imposta pela definição do termo $\hat{F}_0(Ry/\tau, Rx_i/\tau)$ da Eq. (3.27); fato esse, contornado pela subdivisão do intervalo de integração y , na Eq. (3.18), em $y \in [0, x]$ e $y \in [x, y]$. Assim, as integrais das Eqs. (3.31) e (3.32) podem ser avaliadas diretamente pelo esquema de quadratura de Gauss-Kronrod, mediante a realização da troca da variável τ , conforme sugerido em (3.64). Desse modo, obtém-se

$$\mathcal{K}_2(y \rightarrow x_i) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \sum_{n=1}^{N_\tau} \omega_n h_n(y, x_i) \quad (3.81)$$

e

$$\mathcal{K}_4(y \rightarrow x_i) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \sum_{n=1}^{N_\tau} \omega_n h_n(y, x_i) z_n^2. \quad (3.82)$$

Nas Eqs. (3.81) e (3.82), N_τ também indica a ordem da quadratura empregada e, os termo $h_n(y, x_i)$ e z_n são definidos em (3.67) e (3.68), respectivamente.

Assim sendo, o termo $\mathcal{K}_0(y \rightarrow x_i)$ é avaliado em (3.66) ou (3.77), dependendo se $|Ry - Rx_i| \geq 0,05$ ou $|Ry - Rx_i| < 0,05$ e, $\mathcal{K}_2(y \rightarrow x_i)$ e $\mathcal{K}_4(y \rightarrow x_i)$ pelas expressões (3.81) e (3.82). Com isso, torna-se possível também, a avaliação dos termos $k_{11}(y; x)$, $k_{12}(y; x)$, $k_{22}(y; x)$ e $k_{21}(y; x)$, definidos em (3.34), (3.35), (3.36) e (3.37), respectivamente.

Com a avaliação numérica dos termos $k_{11}(y; x)$, $k_{12}(y; x)$, $k_{22}(y; x)$ e $k_{21}(y; x)$, torna-se possível ainda, a avaliação de $g_{p,q}^\alpha(x_i)$ e $h_{p,q}^\alpha(x_i)$, indicadas em (3.47) e (3.48) e, (3.52) e (3.53), respectivamente. Assim, visando promover a avaliação por meio do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod, primeiramente, é realizada a troca da variável y , conforme troca sugerida na Eq. (3.63). Assim sendo, obtém-se

$$g_{p,q}^\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \leq d_\alpha \quad (3.83)$$

ou

$$g_{p,q}^\alpha(x_i) = c_{\alpha,i}^a \sum_{m=0}^{N_y} \omega_m S_{\alpha,i,m}^a k_{pq}(RS_{\alpha,i,m}^a \rightarrow Rx_i) \mathfrak{S}_\alpha(S_{\alpha,i,m}^a) \quad \text{se } x_i \leq d_\alpha \quad (3.84)$$

e,

$$h_{p,q}^\alpha(x_i) = 0, \quad \text{se } x_i \geq e_\alpha \quad (3.85)$$

ou

$$h_{p,q}^\alpha(x_i) = c_{\alpha,i}^b \sum_{m=0}^{N_y} \omega_m S_{\alpha,i,m}^b k_{pq}(RS_{\alpha,i,m}^b \rightarrow Rx_i) \mathfrak{S}_\alpha(S_{\alpha,i,m}^b) \quad \text{se } x_i < e_\alpha. \quad (3.86)$$

Nas Eqs. (3.84) e (3.86), N_y corresponde ao número de pontos de quadratura de Gauss-Kronrod (μ_m) e de seus respectivos pesos (ω_m), usados para a avaliação das integrais e,

$$c_{\alpha,i}^a = \frac{n_{\alpha,i} - d_\alpha}{2}, \quad (3.87)$$

$$c_{\alpha,i}^b = \frac{e_\alpha - m_{\alpha,i}}{2}, \quad (3.88)$$

$$S_{\alpha,i,m}^a = \frac{(n_{\alpha,i} - d_\alpha)\mu_m + d_\alpha + n_{\alpha,i}}{2}, \quad (3.89)$$

$$S_{\alpha,i,m}^b = \frac{(e_\alpha - m_{\alpha,i})\mu_m + d_\alpha + m_{\alpha,i}}{2}. \quad (3.90)$$

Dessa modo, com a avaliação numérica de $g_{p,q}^\alpha(x_i)$ e $g_{p,q}^\alpha(x_i)$, torna-se possível a avaliação dos termos $A_{1,1}$, $A_{1,2}$, $A_{2,1}$, e $A_{2,2}$, definidos na Eq. (3.55), que viabiliza a resolução do sistema linear (3.54).

A solução do sistema linear, por sua vez, estabelece o vetor \mathbf{v}_α de coeficientes constantes da expansão proposta. A partir destes é possível determinar as quantidades de interesse físico dos problemas estudados, entre elas, a taxa de fluxo do gás (U) e a taxa de fluxo de calor (Q). Tais quantidades são definidas em (2.79) e (2.80) e, também necessitam da avaliação de uma integral. Nesse intuito, propõe-se a realização da troca de variáveis

$$\eta(r) = \frac{2r}{R} - 1, \quad (3.91)$$

que viabiliza a avaliação pela quadratura de Gauss-Kronrod, a partir das expressões

$$U = \frac{2}{R^2} \sum_{h=1}^{N_r} \omega_h r_h^* u(r_h^*) \quad (3.92)$$

e

$$Q = \frac{2}{R^2} \sum_{h=1}^{N_r} \omega_h r_h^* q(r_h^*), \quad (3.93)$$

sendo N_r o número de pontos de quadratura empregado, e

$$r_h^* = \frac{R}{2}(\mu_h + 1). \quad (3.94)$$

RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados e discutidos resultados numéricos para quantidades de interesse físico do problema de Poiseuille e *creep* térmico, em dutos cilíndricos, obtidos a partir da implementação em Fortran das respectivas soluções de carácter analítico, conforme definidas no capítulo anterior.

4.1 Aspectos Computacionais

Optou-se pela implementação em Fortran, visto que a mesma linguagem de programação já permitiu a obtenção de resultados numéricos em trabalhos anteriores [KAMPHORST, 2009] e, além disso, mostrou demandar um tempo computacional muito menor se comparado com a implementação em Matlab feita por Russi [RUSSI, 2011].

O trabalho de implementação das soluções analíticas apresentadas no capítulo anterior, para os dois problemas estudados, iniciou com a elaboração de subrotinas específicas para:

- determinar os $M + 1$ nós utilizados na definição das funções splines;
- avaliar as splines cúbicas de Hermite, conforme definidas no início do capítulo 3;
- obter os $L + 1$ pontos de colocação, sendo $L = 2M + 1$;
- calcular os pontos e os respectivos pesos da quadratura de Gauss-Kronrod;
- avaliar numericamente as funções modificadas de Bessel, presentes na definição do núcleo;
- avaliar a integral elíptica completa da primeira ordem, usada na avaliação de $\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i)$;

- avaliar o termo $\mathcal{K}_0(Ry \rightarrow Rx_i)$, a partir das Eqs. (3.66) e (3.77), dependendo se $|Ry - Rx_i| \geq 0,05$ ou se $|Ry - Rx_i| < 0,05$;
- avaliar os termos $\mathcal{K}_2(Ry \rightarrow Rx_i)$ e $\mathcal{K}_4(Ry \rightarrow Rx_i)$, mediante utilização das expressões (3.81) e (3.82);
- avaliar os termos $k_{11}(y; x)$, $k_{12}(y; x)$, $k_{22}(y; x)$ e $k_{21}(y; x)$, definidos em (3.34), (3.35), (3.36) e (3.37), respectivamente;
- avaliar a expressão $g_{p,q}^\alpha(x_i)$, para $p = \{1, 2\}$ e $q = \{1, 2\}$, conforme definida em (3.83) e (3.84);
- avaliar a expressão $h_{p,q}^\alpha(x_i)$, para $p = \{1, 2\}$ e $q = \{1, 2\}$, conforme definida em (3.85) e (3.86);
- avaliar os termos $A_{1,1}$, $A_{1,2}$, $A_{2,1}$ e $A_{2,2}$ da expressão (3.55);
- avaliar as expressões B_1 e B_2 das Eqs. (3.56) e (3.57), respectivamente;
- determinar os termos da forma matricial do sistema linear (3.54), de ordem $4M + 4 = 2L + 2$;

Faz-se necessário ainda, a utilização de alguns parâmetros de entrada, tais como, o raio R do duto cilíndrico e os números N_τ , N_y e N_r de pontos de quadratura de Gauss-Kronrod, usados na avaliação das integrais das variáveis τ , y e r , respectivamente. Também se faz necessário a utilização do parâmetro de entrada M , que determina o número de nós usados na definição das splines cúbicas, bem como, estabelece a ordem $L + 1 = 2M + 2$ da expansão empregada e, conseqüentemente, define a ordem $4M + 4 = 2L + 2$ do sistema linear obtido.

Para a resolução do sistema linear, é proposto o emprego das subrotinas DGEFA e DGESL do pacote LINPACK, Dongarra et al. [DONGARRA et al., 1979]. A solução obtida, consiste dos coeficientes constantes a_α , b_α , dos vetores \mathbf{v}_α , que fazem com que a expansão (3.12) satisfaça a formulação integral dos problemas estudados, apresentada no final do capítulo 2.

Assim, uma vez definidos os vetores \mathbf{v}_α , a expressão $\mathbf{G}(r)$ da Eq. (2.78), pode ser reescrita na forma

$$\mathbf{G}(r) = \sum_{\alpha=0}^L \mathbf{v}_\alpha \mathfrak{S}_\alpha \left(\frac{r}{R} \right) - \mathbf{\Gamma} \quad (4.1)$$

e, possibilita a obtenção do perfil de velocidade $u(r)$ e do perfil de calor $q(r)$, conforme indicados nas Eqs. (2.76) e (2.77), respectivamente. Posteriormente, é possível se obter ainda, a taxa de fluxo do gás (U) e a taxa de fluxo do calor (Q), que são definidos em (2.79) e (2.80) e, avaliados pelas expressões indicadas nas Eqs. (3.91) e (3.92).

Nesse contexto, salienta-se que, na implementação, a distinção dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico se dá mediante o emprego adequado das constantes k_1 e k_2 , presentes na definição do termo fonte, indicado em (2.69), e nas expressões B_1 e B_2 dadas em (3.56) e (3.57), respectivamente.

4.1.1 Análise de Convergência

Comparando o emprego do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod com o esquema de quadratura de Gauss-Legendre utilizado em Kamphorst [KAMPHORST, 2009], na avaliação das integrais presentes na formulação integral do modelo cinético S (usada na modelagem dos dois problemas considerados), é possível constatar uma maior eficiência do esquema de quadratura utilizado neste trabalho.

Ambos os esquemas de quadratura mostraram-se muito eficientes, sendo que nos casos em que a singularidade é mais acentuada, o esquema de quadratura de Gauss-Kronrod pode ser mais preciso, sobretudo para as menores ordens de quadratura, conforme pode ser visto no gráfico da figura (4.1), que apresenta os erros relativos cometidos ao avaliar o termo $\mathcal{K}_0(0, 00003 \rightarrow 0, 00002)$, em função do número de pontos e pesos de quadratura de cada um dos dois esquemas considerados.

Assim sendo, mediante a utilização de quadraturas da mesma ordem, o esquema de Gauss-Kronrod também possibilita a obtenção de resultados numéricos mais precisos para as grandezas de interesse físico, se comparado com o esquema de Gauss-Legendre.

Afim de comparar os resultados numéricos obtidos mediante o emprego dos dois esquemas de quadratura mencionados (Gauss-Kronrod e Gauss-Legendre), se optou pela apresentação de gráficos contendo os erros relativos cometidos na avaliação da taxa de fluxo

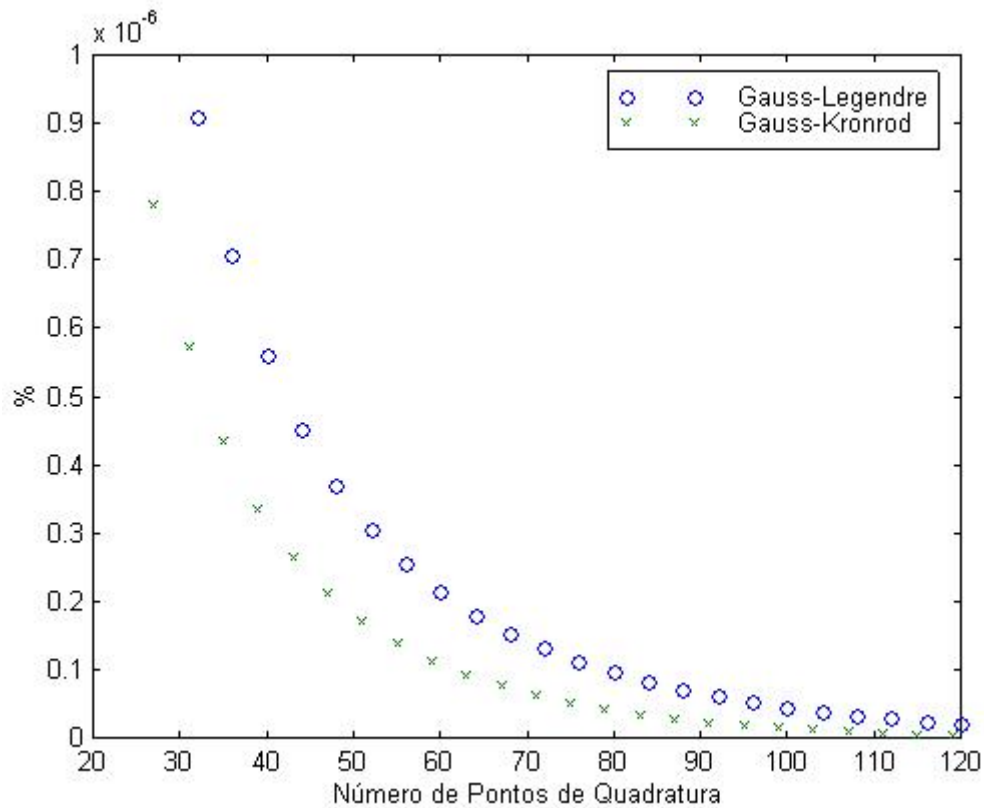


Figura 4.1 – Erro relativo ao avaliar $\mathcal{K}_0(0,00003 \rightarrow 0,00002)$

do gás (U) e na taxa de fluxo de calor (Q), oriundos do emprego de esquemas de quadratura de mesma ordem e, fazendo variar o número M de nós empregados na definição das splines cúbicas.

Assim, fazendo uso dos números $N_x = 50$, $N_y = 60$ e $N_z = 50$ de pontos de quadratura da Gauss-Legendre (ordens pares) e, $N_x = 49$, $N_y = 59$ e $N_z = 49$ pontos de quadratura da Gauss-Kronrod (ordens ímpares), bem como, $R = 5$, para os parâmetros de entrada, obteve-se os resultados que geraram os gráficos das figuras (4.2), (4.3), (4.4) e (4.5). As figuras (4.2) e (4.3) apresentam os erros relativos no cálculo das taxas de fluxo do gás, para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico. Enquanto que, as figuras (4.4) e (4.5), ilustram os erros relativos das taxas de calor obtidas para os mesmos problemas.

Observando as figuras (4.2), (4.3), (4.4) e (4.5), constata-se que em ambos os casos, os erros relativos indicados são ligeiramente menores mediante o emprego do esquema de Gauss-Kronrod, independentemente dos valores de M utilizados. O mesmo também pode ser observado, mediante a comparação dos resultados de outros valores de R .

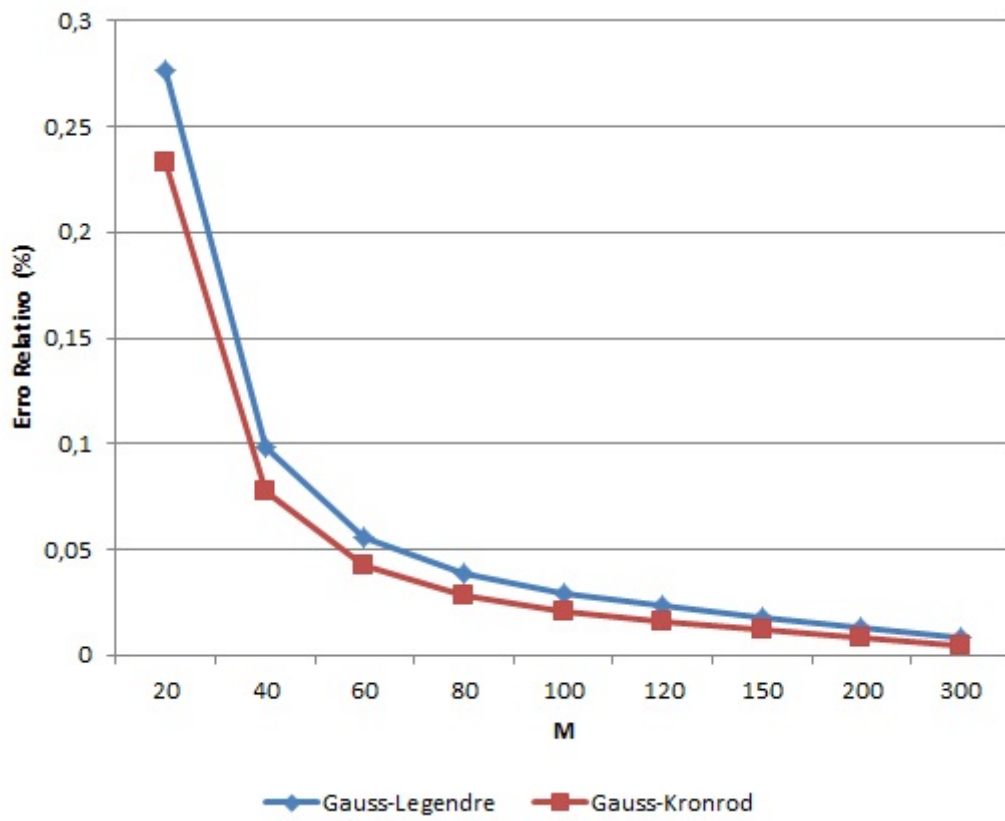


Figura 4.2 – Convergência das Taxas de Fluxo do Gás no Problema de Poiseuille com $R = 5$

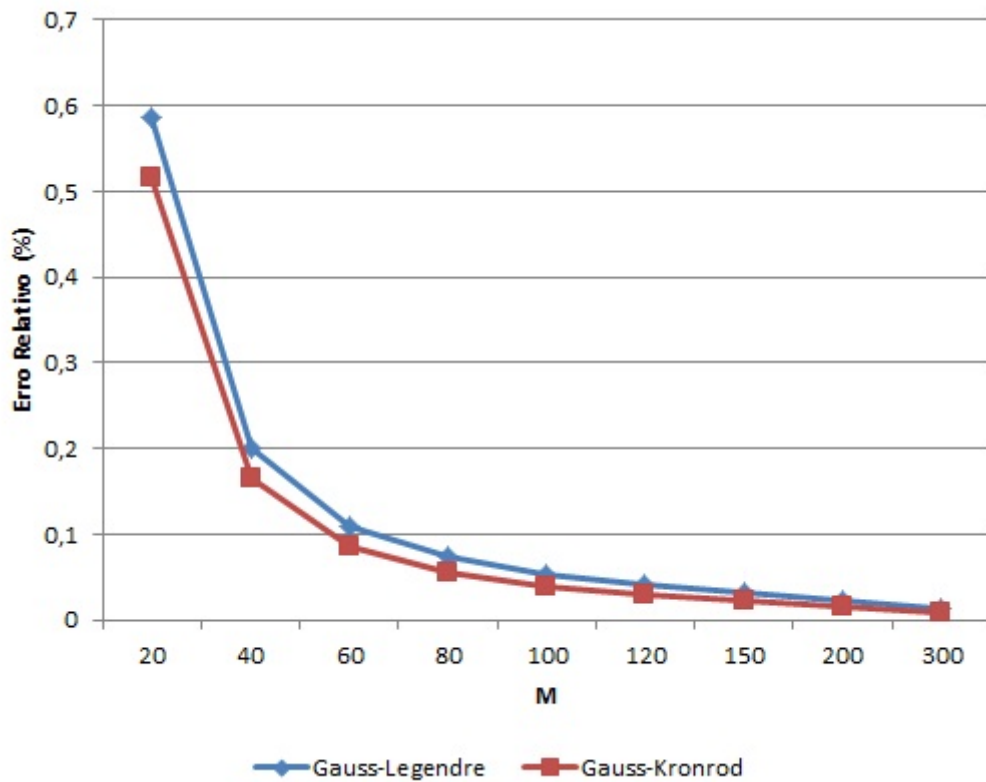


Figura 4.3 – Convergência das Taxas de Fluxo do Gás no Problema *Creep* Térmico com $R = 5$

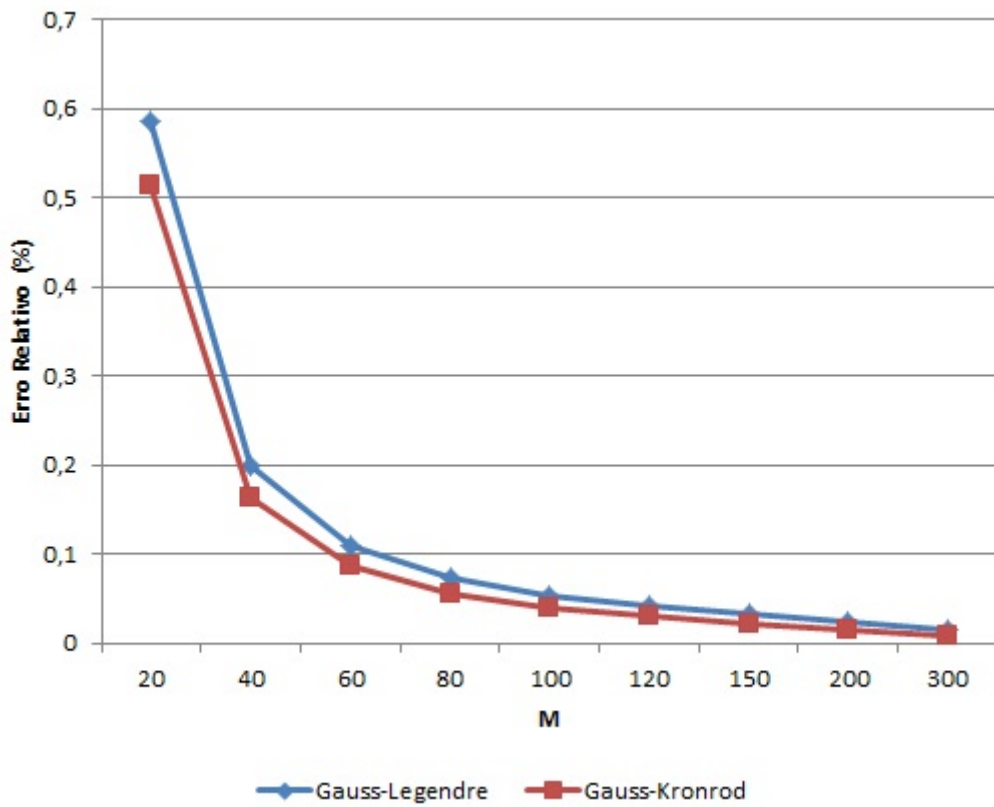


Figura 4.4 – Convergência das Taxas de Fluxo de Calor no Problema de Poiseuille com $R = 5$

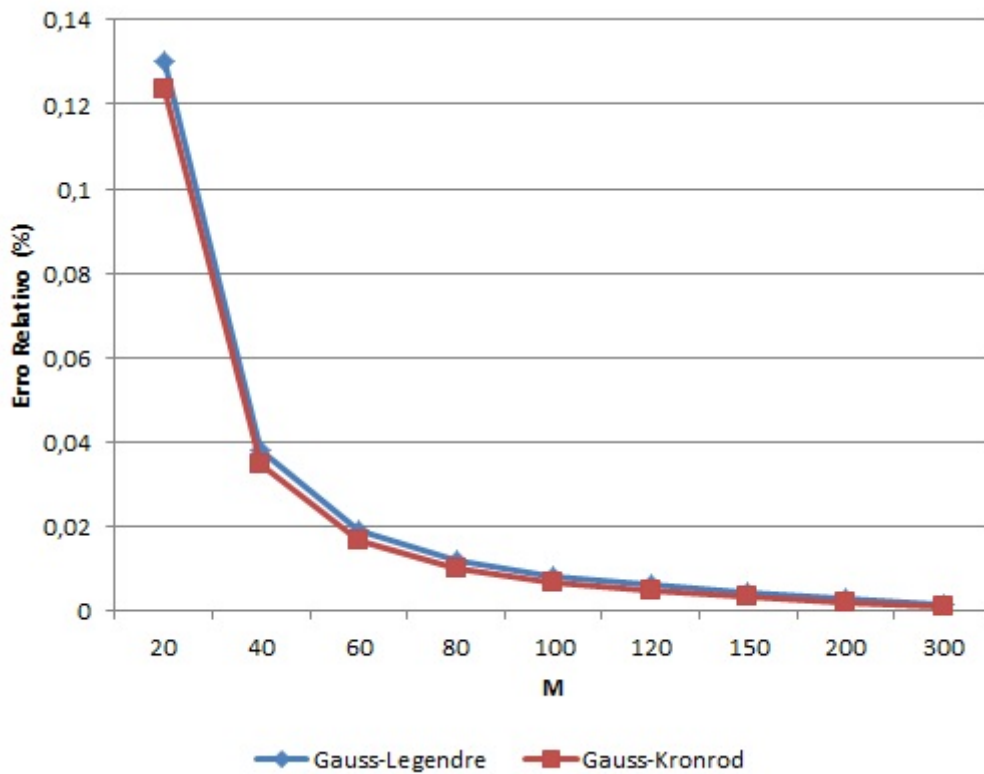


Figura 4.5 – Convergência das Taxas de Fluxo de Calor no Problema *Creep* Térmico com com $R = 5$

As informações contidas nas figuras (4.6) e (4.7) são obtidas mediante a utilização do esquemas de quadratura de Gauss-Kronrod, de ordens $N_r = 51$, $N_y = 61$ e $N_z = 51$, sendo considerados dois casos, $R = 0,5$ e $R = 5$. Assim, considerando a adimensionalização indicada em (2.32), os dois casos correspondem, respectivamente, à escoamentos com números de Knudsen $K_n \cong 1,41$ e $K_n \cong 0,14$, ou seja, escoamentos no regime de transição.

Nas figuras (4.6) e (4.7) é possível observar que a convergência é mais rápida no caso em que $R = 0,5$, se comparado com $R = 5$. Do mesmo modo, é possível constatar também, que os resultados numéricos sempre convergem melhor nos casos em que se tem os menores valores de R . Nesse aspecto, convém lembrar que a formulação integral considera o raio físico do duto (R), adimensionalizado, em termos do número de Knudsen, conforme indicado em (2.32). Logo, conclui-se que a convergência do método é melhor nos casos em que os escoamentos estão no regime de moléculas livres e de transição, respectivamente, onde não é válida a hipótese do contínuo.

O erro relativo das figuras (4.1), (4.2), (4.3), (4.4), (4.5), (4.6) e (4.7) foi calculado pela diferença do resultado encontrado e o resultado obtido por Kamphorst [KAMPHORST, 2009]. Além disso, a figura (4.1) foi feita no software Matlab e as demais figuras foram feitas no software Excel.

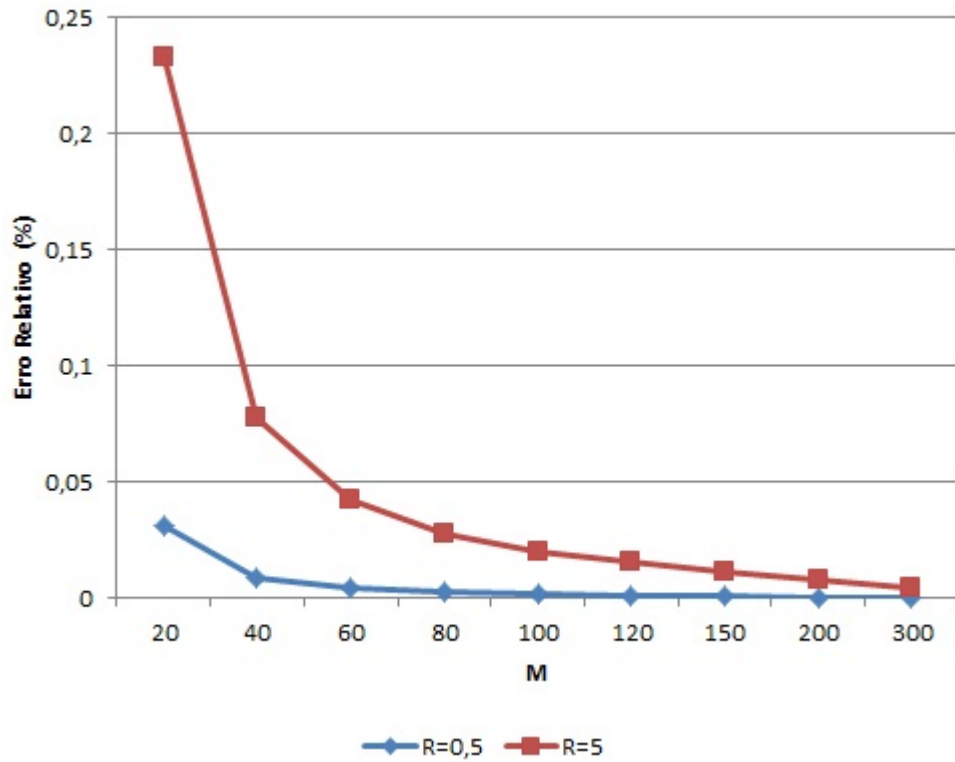


Figura 4.6 – Convergência das Taxas de Fluxo do Gás do Problema de Poiseuille com $R = 0,5$ e $R = 5$

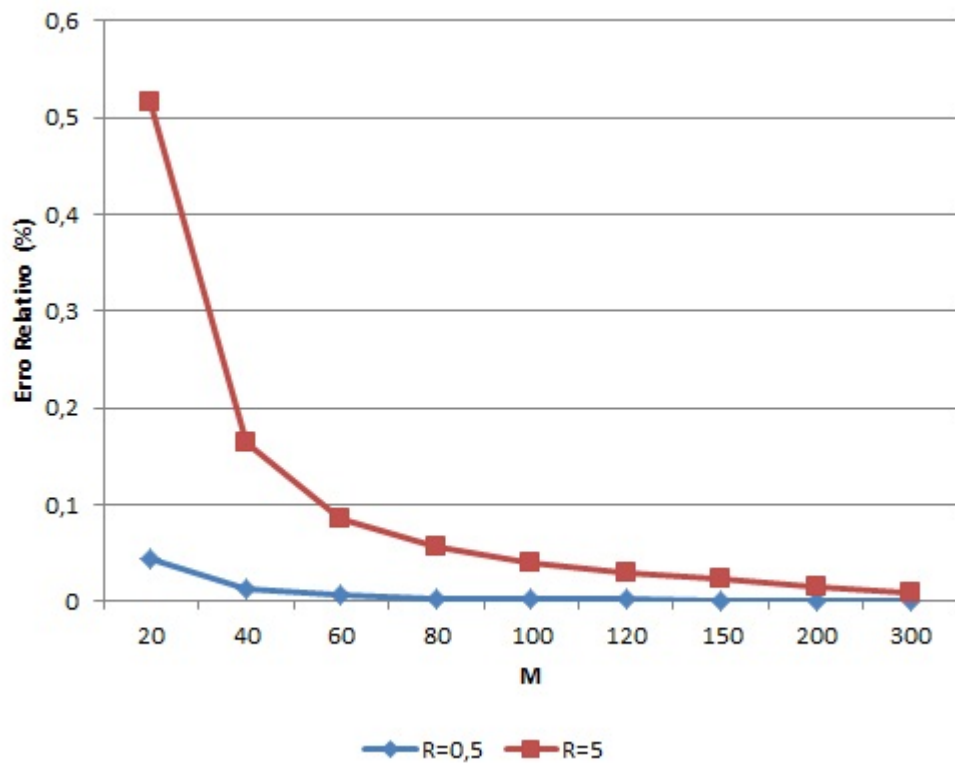


Figura 4.7 – Convergência das Taxas de Fluxo de Calor do Problema de Poiseuille com $R = 0,5$ e $R = 5$

4.2 Quantidades de Interesse físico

Aqui são apresentados e discutidos alguns resultados numéricos para quantidades de interesse físico dos problemas de Poiseuille e *creep* térmico, obtidos com auxílio da implementação em Fortran, realizada a partir das soluções de caráter analítico indicadas no capítulo anterior.

Os parâmetros de entrada utilizados para tanto, consistem dos números $N_\tau = 51$, $N_y = 61$ e $N_r = 51$ de pontos de quadratura de Gauss-Kronrod, bem como, do número $M = 500$ de nós usados na definição das splines cúbicas de Hermite. Salienta-se, que mediante a utilização de $M = 500$, a expansão truncada em termos de splines cúbicas de Hermite é da ordem $L = 2001$ e, o sistema linear obtido é da ordem 2004.

Nesse contexto, é possível obter resultados numéricos com cinco a seis dígitos de precisão (mesmo os casos em que se tem os maiores valores de R), observados a partir de testes de convergência e da comparação com resultados disponíveis nos trabalhos de Kamphorst [KAMPHORST, 2009] e Siewert e Valougeorgis [SIEWERT e VALOUGEORGIS, 2002].

O tempo computacional requerido para a obtenção de todas as quantidades de interesse físico de um problema, dado o valor de R , é de aproximadamente duas horas e cinquenta e dois minutos, utilizando um computador com processador Intel Celeron de 3GB de memória e de 160HD. No entanto, para os casos em que se tem os menores valores de R , esse tempo poderia ser reduzida significativamente (para poucos minutos), mediante a utilização de parâmetros de entrada menores e, com a garantia do mesmo número de dígitos de precisão.

4.2.1 Perfis de Velocidade

Como já mencionado anteriormente, no contexto desse trabalho, o perfil de velocidade $u(r)$ do escoamento gasoso é definido em (2.76).

As tabelas 4.1 e 4.2 apresentam resultados numéricos para velocidades do escoamento de um gás em um duto cilíndrico com diferentes valores para o R , nos problemas de Poiseuille e *creep* térmico, respectivamente. Tais valores são adimensionais (devido a adimensionalização da formulação utilizada) e, correspondem à unidades de comprimento por unidade de tempo.

Os valores são apresentados em notação científica, sendo que $-8.839084(-4)$, por exemplo, corresponde a $-8.839084 \cdot 10^{-4}$. E, os sinais negativo e positivo, indicam sentido

opostos do escoamento.

Tabela 4.1 – Velocidades para o Problema de Poiseuille

r/R	$R = 0.001$	$R = 0.1$	$R = 1$	$R = 50$
0.00	-8.839084(-4)	-8.519925(-2)	-9.857250(-1)	-6.425817(+2)
0.05	-8.833535(-4)	-8.513781(-2)	-9.846484(-1)	-6.410198(+2)
0.10	-8.816859(-4)	-8.495330(-2)	-9.814157(-1)	-6.363582(+2)
0.15	-8.788960(-4)	-8.464473(-2)	-9.760140(-1)	-6.286057(+2)
0.20	-8.749677(-4)	-8.421035(-2)	-9.684220(-1)	-6.177695(+2)
0.25	-8.698776(-4)	-8.364767(-2)	-9.586087(-1)	-6.038549(+2)
0.30	-8.635942(-4)	-8.295336(-2)	-9.465324(-1)	-5.868658(+2)
0.35	-8.560770(-4)	-8.212310(-2)	-9.321388(-1)	-5.668050(+2)
0.40	-8.472745(-4)	-8.115143(-2)	-9.153589(-1)	-5.436744(+2)
0.45	-8.371223(-4)	-8.003147(-2)	-8.961054(-1)	-5.174745(+2)
0.50	-8.255395(-4)	-7.875462(-2)	-8.742680(-1)	-4.882048(+2)
0.55	-8.124247(-4)	-7.731009(-2)	-8.497067(-1)	-4.558639(+2)
0.60	-7.976485(-4)	-7.568406(-2)	-8.222415(-1)	-4.204490(+2)
0.65	-7.810442(-4)	-7.385869(-2)	-7.916370(-1)	-3.819564(+2)
0.70	-7.623908(-4)	-7.181032(-2)	-7.575771(-1)	-3.403805(+2)
0.75	-7.413859(-4)	-6.950650(-2)	-7.196218(-1)	-2.957143(+2)
0.80	-7.175949(-4)	-6.690054(-2)	-6.771274(-1)	-2.479465(+2)
0.85	-6.903480(-4)	-6.392022(-2)	-6.290798(-1)	-1.970546(+2)
0.90	-6.584874(-4)	-6.044039(-2)	-5.736804(-1)	-1.429689(+2)
0.95	-6.195312(-4)	-5.619170(-2)	-5.069449(-1)	-8.534502(+1)
1.00	-5.615159(-4)	-4.986658(-2)	-4.084488(-1)	-1.745521(+1)

Tabela 4.2 – Velocidades para o Problema *Creep* Térmico

r/R	$R = 0.001$	$R = 0.1$	$R = 1$	$R = 50$
0.00	4.405025(-4)	3.803187(-2)	2.646628(-1)	1.435209(1)
0.05	4.402252(-4)	3.800310(-2)	2.644042(-1)	1.429123(1)
0.10	4.393919(-4)	3.791671(-2)	2.636270(-1)	1.402502(1)
0.15	4.379977(-4)	3.777218(-2)	2.623251(-1)	1.360395(1)
0.20	4.360345(-4)	3.756866(-2)	2.604885(-1)	1.301916(1)
0.25	4.334908(-4)	3.730489(-2)	2.581027(-1)	1.254162(1)
0.30	4.303507(-4)	3.697920(-2)	2.551482(-1)	1.137218(1)
0.35	4.265940(-4)	3.658941(-2)	2.515996(-1)	9.874116(0)
0.40	4.221949(-4)	3.613279(-2)	2.474251(-1)	9.346064(0)
0.45	4.171212(-4)	3.560590(-2)	2.425844(-1)	8.751990(0)
0.50	4.113326(-4)	3.500441(-2)	2.370272(-1)	7.658995(0)
0.55	4.047781(-4)	3.432291(-2)	2.306897(-1)	6.371250(0)
0.60	3.973932(-4)	3.355447(-2)	2.234909(-1)	5.076392(0)
0.65	3.890945(-4)	3.269012(-2)	2.153256(-1)	3.786722(0)
0.70	3.797714(-4)	3.171800(-2)	2.060538(-1)	2.297797(0)
0.75	3.692727(-4)	3.062182(-2)	1.954826(-1)	9.808535(-1)
0.80	3.573811(-4)	2.937813(-2)	1.833324(-1)	8.115297(-1)
0.85	3.437616(-4)	2.795065(-2)	1.691675(-1)	7.605063(-1)
0.90	3.278351(-4)	2.627650(-2)	1.522226(-1)	6.425382(-1)
0.95	3.083604(-4)	2.422024(-2)	1.308204(-1)	5.314175(-1)
1.00	2.793541(-4)	2.112361(-2)	9.645220(-2)	4.306210(-1)

4.2.2 Perfil da Taxa de Calor

A seguir são apresentados valores dos perfis da taxa de calor (em unidades de potência por unidade de área de secção transversal ao fluxo), conforme definido em (2.77).

Tabela 4.3 – Fluxo de Calor para o Problema de Poiseuille

r/R	$R = 0.001$	$R = 0.1$	$R = 1$	$R = 50$
0.00	4.405027(-4)	3.808691(-2)	2.736715(-1)	8.458907(-1)
0.05	4.402255(-4)	3.805793(-2)	2.733814(-1)	8.422649(-1)
0.10	4.393921(-4)	3.797090(-2)	2.725094(-1)	8.396594(-1)
0.15	4.379979(-4)	3.7825323(-2)	2.710486(-1)	8.375866(-1)
0.20	4.360348(-4)	3.762030(-2)	2.689871(-1)	8.359273(-1)
0.25	4.334910(-4)	3.735458(-2)	2.663079(-1)	8.346168(-1)
0.30	4.303509(-4)	3.702647(-2)	2.629883(-1)	8.336161(-1)
0.35	4.265942(-4)	3.663379(-2)	2.589986(-1)	8.328903(-1)
0.40	4.221951(-4)	3.617375(-2)	2.543011(-1)	8.314499(-1)
0.45	4.171214(-4)	3.564289(-2)	2.4884874(-1)	8.302745(-1)
0.50	4.113327(-4)	3.503684(-2)	2.425818(-1)	8.283371(-1)
0.55	4.047782(-4)	3.435012(-2)	2.354253(-1)	8.256634(-1)
0.60	3.973933(-4)	3.357574(-2)	2.272828(-1)	8.212094(-1)
0.65	3.890945(-4)	3.270464(-2)	2.180292(-1)	8.138880(-1)
0.70	3.797714(-4)	3.172482(-2)	2.074972(-1)	8.044167(-1)
0.75	3.692727(-4)	3.061982(-2)	1.954555(-1)	7.739381(-1)
0.80	3.573811(-4)	2.936594(-2)	1.815670(-1)	7.495665(-1)
0.85	3.437615(-4)	2.792649(-2)	1.653034(-1)	7.107495(-1)
0.90	3.278349(-4)	2.623790(-2)	1.457309(-1)	6.333049(-1)
0.95	3.083601(-4)	2.416318(-2)	1.207862(-1)	2.634215(-1)
1.00	2.793537(-4)	2.103640(-2)	7.986685(-2)	1.088031(-1)

Tabela 4.4 – Fluxo de Calor para o Problema *Creep* Térmico

r/R	$R = 0.001$	$R = 0.1$	$R = 1$	$R = 50$
0.00	-1.986129(-3)	-1.732965(-1)	-1.043877(0)	-2.874992(0)
0.05	-1.984883(-3)	-1.731765(-1)	-1.043119(0)	-2.794977(0)
0.10	-1.981136(-3)	-1.728163(-1)	-1.040838(0)	-2.734969(0)
0.15	-1.974869(-3)	-1.722136(-1)	-1.037012(0)	-2.665962(0)
0.20	-1.966043(-3)	-1.713648(-1)	-1.031604(0)	-2.604956(0)
0.25	-1.954608(-3)	-1.702643(-1)	-1.024559(0)	-2.534950(0)
0.30	-1.940491(-3)	-1.689050(-1)	-1.0158052(0)	-2.444946(0)
0.35	-1.923602(-3)	-1.672775(-1)	-1.005246(0)	-2.364941(0)
0.40	-1.903826(-3)	-1.653701(-1)	-9.927633(-1)	-2.274937(0)
0.45	-1.881017(-3)	-1.631679(-1)	-9.782049(-1)	-2.174932(0)
0.50	-1.854993(-3)	-1.606523(-1)	-9.613806(-1)	-2.064927(0)
0.55	-1.825526(-3)	-1.577999(-1)	-9.420497(-1)	-1.984920(0)
0.60	-1.792325(-3)	-1.545811(-1)	-9.199046(-1)	-1.874906(0)
0.65	-1.755016(-3)	-1.509574(-1)	-8.945456(-1)	-1.834876(0)
0.70	-1.713101(-3)	-1.468778(-1)	-8.654398(-1)	-1.774796(0)
0.75	-1.665901(-3)	-1.422726(-1)	-8.318529(-1)	-1.704557(0)
0.80	-1.612438(-3)	-1.370416(-1)	-7.927214(-1)	-1.623782(0)
0.85	-1.551205(-3)	-1.310299(-1)	-7.463918(-1)	-1.500976(0)
0.90	-1.479600(-3)	-1.239697(-1)	-6.899781(-1)	-1.399141(0)
0.95	-1.392041(-3)	-1.152861(-1)	-6.172195(-1)	-1.204118(0)
1.00	-1.261629(-3)	-1.022000(-1)	-4.972757(-1)	-8.176098(-1)

4.2.3 Taxas de Fluxo

As tabelas 4.5 e 4.6 apresentam taxas de fluxo do gás e de calor para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, obtidos a partir da implementação das expressões (3.92) e (3.93).

Os valores das taxas de fluxo do gás (ou taxa de escoamento) são correspondentes à unidades de volume por unidade de tempo, enquanto que as taxas de fluxo de calor, à unidades de potência.

Tabela 4.5 – Taxas de Fluxo do Gás

R	Poiseuille	Creep Térmico
0.001	-1.499564(0)	7.469326(-1)
0.1	-1.409017(0)	6.208756(-1)
1	-1.476443(0)	3.967497(-1)
50	-1.335615(1)	2.244166(-2)

Tabela 4.6 – Taxas de Fluxo do Calor

R	Poiseuille	Creep Térmico
0.001	7.469326(-1)	-3.369502(0)
0.1	6.208756(-1)	-2.880057(0)
1	3.967497(-1)	-1.674547(0)
50	2.244166(-2)	-7.362002(-2)

Nas tabelas 4.5 e 4.6 é possível observar que as taxas de fluxo de calor do problema de Poiseuille correspondem, numericamente, aos valores das taxas de fluxo do gás no problema *creep* térmico, fato esse, já evidenciado por Siewert e Valougeorgis [SIEWERT e VALOUGEORGIS, 2002].

Segundo Kamphorst [KAMPHORST, 2009], ao analisar o comportamento do módulo das taxas de fluxo do gás em função do raio R do duto, constata-se que, no problema de Poiseuille estas assumem valores mínimos nos casos em que se tem R próximo de 0,3, enquanto que no problema *creep* térmico, decrescem com o aumento dos valores de R .

Observando o valor absoluto dos resultados encontrados para as taxas de fluxo de calor, nos problemas de Poiseuille e *creep* térmico, constata-se que em ambos os valores diminuem com o aumento dos valores de R . Diante desse fato, evidencia-se a presença de maiores taxas de fluxo de calor em micro ou nanocanais.

4.3 Análise dos Perfis de Velocidade em Diferentes Estados de Rarefação

Nesta sessão é apresentada uma análise gráfica dos perfis de velocidade para os problemas de poiseuille e *creep* térmico, utilizando como parâmetros de entrada $N_\tau = 51$, $N_y = 61$, $N_r = 51$, $M = 500$ e valores distintos de R .

Optou-se pelos valores de $R = 150$, $R = 50$, $R = 1$ e $R = 0.001$, que correspondem, respectivamente, a escoamentos nos regimes contínuo, slip-flow, transição e moléculas livres, visto que a adimensionalização utilizada na presente formulação, considera

$$K_n = \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{1}{R}. \quad (4.2)$$

A figura 4.8 indica gráficos de perfis de velocidade para o problema de Poiseuille, enquanto que a figura 4.9, gráficos de perfis de velocidade para o problema *creep* térmico.

Nas duas figuras, a primeira linha de gráficos apresenta perfis de velocidade para o escoamento de um gás rarefeito em dutos cilíndricos com $R = 150$ e $R = 50$, que correspondem, respectivamente, à escoamentos nos regimes contínuo e slip-flow. No primeiro, a velocidade do gás na parede é inferior a 0,1% da velocidade máxima do escoamento, o que torna viável sua modelagem mediante a utilização das equações de Navier-Stokes com condição de não deslizamento na parede. No segundo gráfico, este percentual aumenta para aproximadamente 2,7% no problema de Poiseuille e 3% no problema *creep* térmico, o que inviabiliza a utilização da condição de não deslizamento.

Na segunda linha de gráficos, são apresentados os perfis de velocidade para $R = 1$ e $R = 0,001$, que equivalem, respectivamente, à escoamentos nos regimes de transição e de moléculas livres. Neles, as velocidades do gás na parede correspondem aproximadamente a 41,7% e 63,5% da velocidade máxima do escoamento no problema de Poiseuille e, 38% e 63% no problema *creep* térmico, resultados estes decorrentes dos efeitos de maior rarefação do gás.

Tais constatações vão de encontro com GAD-EL-HAK [GAD-EL-HAK, 2005], visto que nos casos em que se tem os maiores valores para o número de Knudsen (correspondente aos menores valores de R), tem-se maior influência dos efeitos de rarefação, o que inviabiliza a hipótese do contínuo.

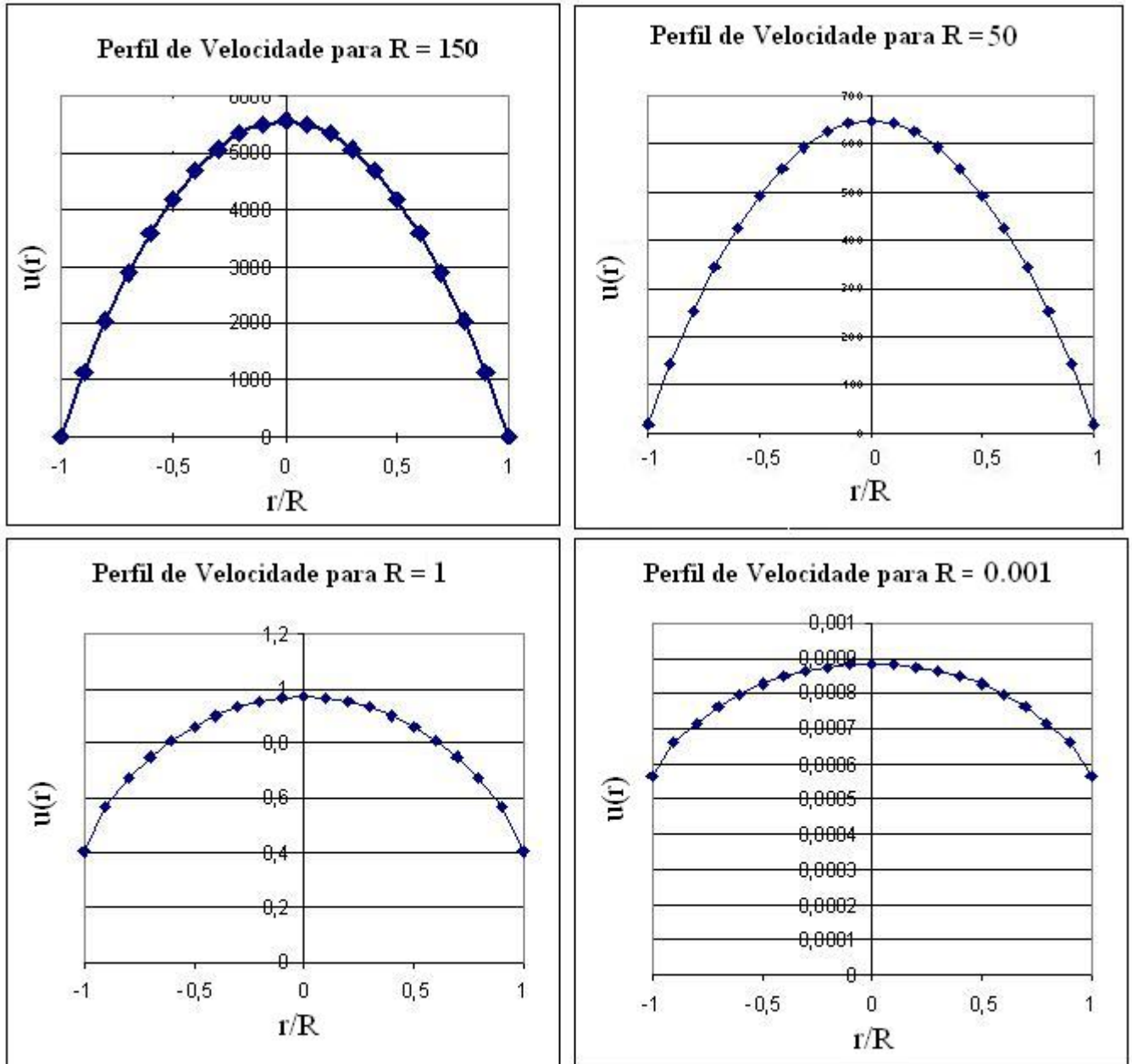


Figura 4.8 – Perfis de Velocidade do problema de Poiseuille

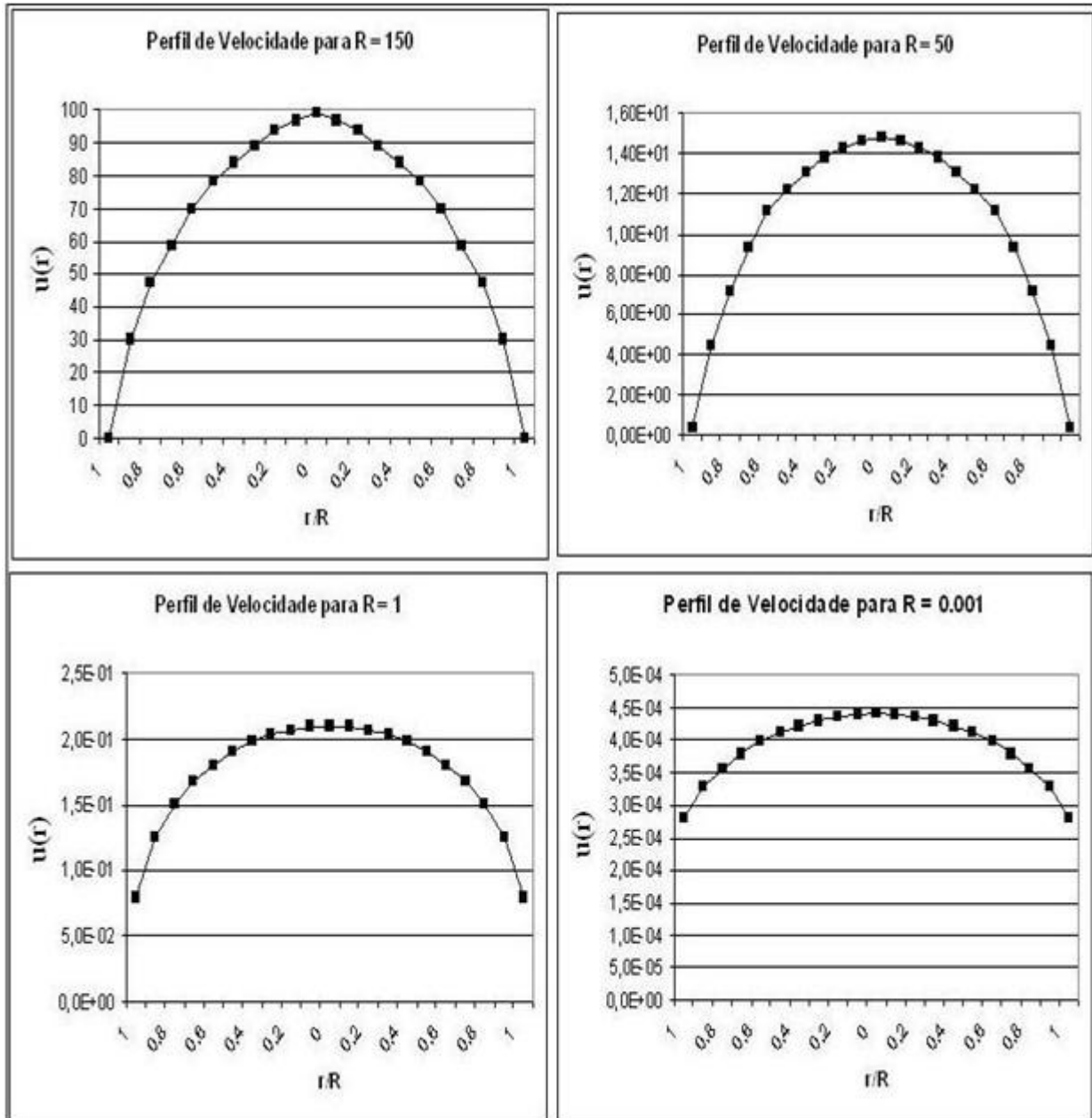


Figura 4.9 – Perfis de Velocidade do problema *Creep* Térmico

CONCLUSÕES

Observa-se ao final deste trabalho que o emprego do método espectral, baseado na utilização de uma expansão truncada em termos de splines cúbicas de Hermite e o uso de um esquema de pontos de colocação, na formulação integral/vetorial do modelo S, tem se mostrado uma boa alternativa na abordagem dos dois problemas clássicos da dinâmica dos gases rarefeitos, denominados de Poiseuille e *creep* térmico.

Nesse contexto, o emprego do esquema de quadratura de Gauss-Kronrod favoreceu a obtenção de resultados numéricos mais precisos, se comparado com a utilização do esquema de quadratura de Gauss-Legendre de mesma ordem. Fato esse, que contribuiu para a diminuição do esforço computacional requerido para se alcançar resultados numéricos, com uma determinada precisão, se comparado com a metodologia empregada por Kamphorst [KAMPHORST, 2009].

Salienta-se que o modelo S forneceu resultados mais precisos se comparados com os respectivos resultados obtidos com a utilização do modelo BGK, tendo em vista que faz uso de uma expansão de ordem superior para representar o processo de espalhamento das partículas do gás. Outra diferença básica entre as duas formulações consiste no fato da formulação integral do modelo S, empregada neste trabalho, ser vetorial.

A implementação em Fortran das soluções de caráter analítico encontradas para os problemas de Poiseuille e *creep* térmico, possibilitaram a obtenção de resultados para quantidades de interesse físico com um número significativo de dígitos de precisão, o que favoreceu a realização da análise dos resultados numéricos.

Assim, pode se constatar perfis parabólicos para as velocidades, bem como, para as taxas de fluxo. Nestes perfis, os maiores valores (em módulo) das quantidades de interesse físico situam-se na região central do duto e, conforme evidenciado graficamente para os perfis

de velocidade, nas proximidades do duto que delimita o escoamento, tais valores dependem significativamente do estado de rarefação do gás.

De um modo geral, quanto menor o valor do raio R do duto cilíndrico, maiores são as influências dos fenômenos de rarefação. Contudo, é justamente nestes casos que as soluções implementadas melhor convergem. Logo, é correto afirmar que a presente metodologia é aplicável em todos os regimes de rarefação, porém mostra-se mais eficiente para obtenção de resultados de escoamentos no interior de micro ou nanocanais, os quais constituíram a motivação central para a realização do presente trabalho de dissertação de mestrado.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. **Handbook of Mathematical Function**. Dover Pub., New York, 1965.

AUBERT, C., 1999. “**Écoulements compressibles de gaz dans les microcanaux: effets de raréfaction, effets instationnaires**”, Tese de doutorado, Université Paul Sabatier, Soutenue, France.

BAHUKUDUMBI, P.; PARK, J. H.; BESKOK, A. A Unified Engineering Model for Steady and Quasi-Steady Shear-Driven Gas Microflows, **Microscale Thermophysical Engineering**, v. 7, p. 291–315, 2003.

BARICHELLO, L. B.; SIEWERT, C. E. A Discrete-Ordinates Solution for a Non-Grey Model with Complete Frequency Redistribution, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 62, p. 665–675, 1999.

BARICHELLO, L. B.; SIEWERT, C. E. Some Comments on Modeling the Linearized Boltzmann Equation, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 77, p. 43–59, 2003.

BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems, **Physical Review**, v. 94, p. 511–525, 1954.

CALIÒ, F.; GAUTSCHI, W.; MARCHETTI, E. On computing Gauss-Kronrod Quadrature Formulae, **Mathematical Computational**, v. 47, p. 639–650, 1986.

CERCIGNANI, C. **The Boltzmann Equation and Its applications**. Springer-Verlag, New York, 1988.

DONGARRA, J. J.; BUNCH, J. R.; MOLER, C. B.; STEWART, G. W. **LINPACK User's Guide**. Society for Industrial and applied Mathematics - SIAM, Philadelphia, 1979.

FERZIGER, J. H.; KAPER, H. G. **Mathematical Theory of Transport Processes in Gases**. North-Holland, Amsterdam, 1972.

GAD-EL-HAK, M. **The MEMS Handbook**. Mechanical Engineering Handbook Series, Virginia, 2005.

KAKAÇ, S.; VASILIEV, L.; BAYAZITOGU, Y.; YENER, Y. **Microscale Heat Transfer: Fundamentals and Applications**. Springer Netherlands, New York, 2005.

KAMPHORST, C. H., 2009. “**Fluxo de Gases Rarefeitos em dutos cilíndricos: uma abordagem via equações integrais**”, Tese de doutorado, UFRGS, Porto Alegre.

KARNIADAKIS, G. E.; BESKOK, A. **Micro Flows**. Springer-Verlag, New York, 2002.

KRONROD, A. S. **Nodes and Weights of Quadrature Formulas**. Consultants Bureau, New York, 1965.

KRUEGER, S. Sensors for Mobility, **MST News**, v. 3, p. 6–10, 2007.

LI, D. **Micro and Nanoscale Gas Dynamics**. Springer, New York, 2008.

LIU, L.; CAO, W.; WU, J.; WEN, W.; CHANG, D. C.; SHENG, P. Desing and Integration of an all-in-one Biomicrofluid, **Biomicrofluidics**, v. 2, p. 034103(1)–034103(8), 2008.

LOYALKA, S. K.; FERZIGER, J. H. Model Dependence of the Slip Coefficient, **Physics of Fluids A**, v. 11, p. 1668–1671, 1968.

LOYALKA, S. K.; HICKEY, K. A. Plane Poiseuille flow: near continuum results for a rigid sphere gas., **Physics of Fluids A**, v. 160, p. 395–408, 1989.

PATSISA, G. P.; NINOSA, K.; MATHIOULAKIS, D.; KALTSASA, G. Simulation and Experimental Evaluation of Gas Mass Flow Transfer Rate in Microchannels, **Procedia Engineering**, v. 25, p. 447–450, 2011.

PEKERIS, C. L.; ALTERMAN, Z. Solution of the Boltzmann-Hilbert Integral Equation II. The Coefficients of Viscosity and Heat Conduction, **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 43, p. 998–1007, 1957.

RODRIGUES, P.; KAMPHORST, C. H.; BARICHELLO, L. B. A Spectral Method for Rarefied Gas Dynamics Problems in Cylindrical Geometry, **International Journal of Pure and Applied Mathematics**, v. 51, p. 181–187, 2009.

ROY, S.; RAJU, R.; CHUANG, H. F.; CRUDEN, B. A.; MEYYAPPAN, M. Modeling Gas Flow Through Microchannels and Nanopores, **Journal of Applied Physics**, v. 93, p. 4870–4879, 2003.

RUSSI, A. L., 2011. “**Soluções de Caráter Analítico para Problemas da Dinâmica de Gases Rarefeitos em dutos cilíndricos**”, Dissertação de mestrado, UNIJUÍ, Ijuí.

SCHULTZ, M. N. **Spline Analysis**. Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1973.

SHAKHOV, E. M. Generalization of the Krook Kinetic Relaxation Equation, **Fluid Dynamics**, v. 3, p. 142–145, 1968.

SHARIPOV, F.; SELEZNEV, V. Data on Internal Gas Flows, **The Journal of Chemical Physics**, v. 27, p. 657–706, 1998.

SIEWERT, C. E. Poiseuille and Thermal-Creep Flow in a Cylindrical Tube, **Journal of Computational Physics**, v. 160, p. 470–480, 2000.

SIEWERT, C. E. Generalized boundary conditions for the S-model kinetic equations basic to flow in a plane channel, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer (JQSRT)**, v. 72, p. 75–88, 2002.

SIEWERT, C. E.; VALOUGEORGIS, D. An Analytic Discrete-Ordinates Solution of the S model in Rarefied Gas Dynamics: Poiseuille and Thermal-Creep Flow in a Cylindrical Tube, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 72, p. 531–550, 2002.

SONG, X.; CHEN, J. K. A Comparative Study on Poiseuille Flow of Simple Fluids Through Cylindrical and Slit-Like Nanochannels, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 51, p. 1770–1779, 2008.

WENG, H. C.; CHEN, C. On the Importance of Thermal Creep in Natural Convective Gas Microflow with Wall Heat Fluxes, **J. Phys. D: Appl. Phys.**, v. 41, p. 115501(1)–115501(10), 2008.

WILLIAMS, M. M. R. A Review of the Rarefied Gas Dynamics Theory Associated with Some Classical Problems in Flow and Heat Transfer, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik Physik**, v. 52, p. 500–516, 2001.