

DENIZE KALEMPA

**FENÔMENOS DE TRANSPORTE NO ESCOAMENTO
DE MISTURAS DE GASES RAREFEITOS**

**Dissertação apresentada como requisito
parcial à obtenção do grau de Mestre em
Física, curso de Pós-Graduação em Física,
Setor de Ciências Exatas, Universidade
Federal do Paraná.**

Orientador: Prof. Dr. Felix Sharipov

**CURITIBA
2005**

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus pela oportunidade de chegar até aqui.

Aos meus pais que sempre se esforçaram para que eu tivesse condições para me dedicar aos estudos.

Ao prof. Dr. Felix Sharipov pelo excelente trabalho de orientação e por toda a dedicação e paciência desde os meus tempos de iniciação científica.

À CAPES pelo apoio financeiro.

Ao CNPq pela concessão de bolsa de iniciação científica durante os últimos quatro anos do curso de graduação (período que possibilitou iniciar meus estudos na área de Dinâmica de Gases Rarefeitos) e também pelo financiamento do projeto intitulado *Aplicações da Dinâmica dos Gases Rarefeitos em Engenharia* no qual participo com o desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus amigos Adriano W. da Silva e Elaine G. da Silva que sempre me apoiaram nas situações difíceis e a todos que de alguma forma colaboraram para a conclusão deste trabalho.

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS	v
LISTA DE FIGURAS	vii
RESUMO	ix
ABSTRACT	x
1 Introdução	1
2 Conceitos básicos da Dinâmica dos Gases Rarefeitos	5
2.1 Número de Knudsen e parâmetro de rarefação	5
2.2 Função de distribuição e equação de Boltzmann	6
2.3 Interação gás-superfície	10
2.4 Deslizamento do gás na superfície sólida	12
3 Exposição do problema e objetivo	14
4 Análise termodinâmica	17
5 Solução nos regimes de moléculas livres e hidrodinâmico	21
5.1 Solução no regime de moléculas livres	21
5.2 Solução no regime hidrodinâmico	24
5.2.1 Cálculo dos coeficientes de deslizamento	27
5.2.2 Equações de entrada	29
5.2.3 Discretização das equações e solução numérica	31
6 Solução no regime de transição	35
6.1 Equações de entrada	35
6.2 Discretização das equações e solução numérica	36

7	Resultados e discussão	42
7.1	Coeficientes de deslizamento	42
7.1.1	Coeficiente de deslizamento viscoso	43
7.1.2	Coeficiente de deslizamento difuso	49
7.1.3	Coeficiente de deslizamento térmico	55
7.2	Coeficientes cinéticos	61
8	Conclusão	70
	REFERÊNCIAS	72
A	Modelo de McCormack	80
B	Resultados numéricos	83
B.1	Coeficientes de deslizamento	83
B.2	Coeficientes cinéticos: $T = 300K$ e potencial realístico de interação entre as partículas	86

LISTA DE TABELAS

7.1	Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne - Ar devido ao gradiente de velocidade, modelo de esferas-rígidas	46
7.2	Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura He - Ar devido ao gradiente de velocidade, modelo de esferas-rígidas	46
7.3	Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura He - Xe devido ao gradiente de velocidade, modelo de esferas-rígidas	47
7.4	Coefficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração C_0 , misturas hipotéticas com razão entre as massas das espécies igual a m_2/m_1	52
7.5	Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne- Ar devido ao gradiente de concentração, potencial realístico de interação	52
7.6	Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura He- Ar devido ao gradiente de concentração, potencial realístico de interação	53
7.7	Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura He- Xe devido ao gradiente de concentração, potencial realístico de interação.	53
7.8	Coefficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração C_0 para misturas hipotéticas com razão entre as massas das espécies igual a m_2/m_1	58
7.9	Perfil da velocidade dos constituintes da mistura Ne - Ar devido ao gradiente de temperatura, potencial realístico de interação	58
7.10	Perfil da velocidade dos constituintes da mistura He - Ar devido ao gradiente de temperatura, potencial realístico de interação	59
7.11	Perfil da velocidade de cada constituinte da mistura He - Xe devido gradiente de temperatura, potencial realístico de interação.	59
7.12	Quantidades utilizadas no cálculo dos coeficientes cinéticos via Eqs. (5.43)-(5.47).	61
7.13	Comparação dos resultados: mistura de He-Ar, $C_0 = 0.5$, potencial de Lennard-Jones (6-12) à T=295K	62
7.14	Comparação entre os resultados obtidos com frequências de colisões diferentes: mistura de He-Ar, $C_0 = 0.5$, modelo de esferas-rígidas	62
B.1	Coefficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração C_0 , modelo de esferas-rígidas	83

B.2	Coeficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração C_0 , potencial realístico de interação.	84
B.3	Coeficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração C_0 , modelo de esferas-rígidas	84
B.4	Coeficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração C_0 , potencial realístico de interação	84
B.5	Coeficiente de deslizamento térmico σ_T da mistura vs concentração C_0 , modelo de esferas-rígidas	85
B.6	Coeficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração C_0 , potencial realístico	85
B.7	Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de Ne-Ar, $C_0 = 0.1$	86
B.8	Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de Ne-Ar, $C_0 = 0.5$	87
B.9	Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de Ne-Ar, $C_0 = 0.9$	88
B.10	Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Ar, $C_0 = 0.1$	89
B.11	Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Ar, $C_0 = 0.5$	90
B.12	Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Ar, $C_0 = 0.9$	91
B.13	Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Xe, $C_0 = 0.1$	92
B.14	Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Xe, $C_0 = 0.5$	93
B.15	Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Xe, $C_0 = 0.9$	94

LISTA DE FIGURAS

3.1	Esquema e coordenadas do escoamento da mistura gasosa	14
5.1	Coordenadas para uma partícula num ponto P no plano yz	22
5.2	Esquema para cálculo dos coeficientes de deslizamento	28
6.1	Esquema utilizado para discretização das equações	39
7.1	Coefficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração molar C_0 para a mistura Ne-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação	44
7.2	Coefficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração molar C_0 para a mistura He-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação	44
7.3	Coefficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração molar C_0 para a mistura He-Xe, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação	45
7.4	Perfil do desvio de velocidade $u_y^{(w)}$ das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe em função da distância x normal à parede para concentração: (a) $C_0 = 0.1$, (b) $C_0 = 0.5$ e (c) $C_0 = 0.9$	48
7.5	Coefficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração molar C_0 para a mistura de Ne-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.	49
7.6	Coefficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração molar C_0 para a mistura de He-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.	50
7.7	Coefficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração molar C_0 para a mistura de He-Xe, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.	51
7.8	Perfil da velocidade $u_y^{(c)}$ em função da distância x normal à parede para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe com concentração: (a) $C_0 = 0.1$, (b) $C_0 = 0.5$ e (c) $C_0 = 0.9$	54
7.9	Coefficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração molar C_0 para a mistura Ne-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.	55
7.10	Coefficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração molar C_0 para a mistura He-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.	56
7.11	Coefficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração molar C_0 para a mistura He-Xe, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.	57

7.12	Perfil da velocidade $u_y^{(T)}$ em função da distância x normal à parede para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe com concentração: (a) $C_0 = 0.1$, (b) $C_0 = 0.5$, (c) $C_0 = 0.9$, potencial realístico de interação	60
7.13	Perfil dos coeficientes cinéticos para a mistura Ne-Ar à temperatura de 300K e potencial realístico de interação	64
7.14	Perfil dos coeficientes cinéticos para a mistura He-Ar à temperatura de 300K e potencial realístico de interação	65
7.15	Coefficientes cinéticos para a mistura He-Xe à temperatura de 300K e potencial realístico de interação	66
7.16	Perfil de velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração $C_0 = 0.5$ devido ao gradiente de pressão	67
7.17	Perfil de velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração $C_0 = 0.5$ devido ao gradiente de concentração	68
7.18	Perfil de velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração $C_0 = 0.5$ devido ao gradiente de temperatura	68

RESUMO

Os fenômenos de transporte de massa e calor no escoamento de uma mistura binária de gases rarefeitos monoatômicos através de um longo capilar cilíndrico sujeita a gradientes de pressão, temperatura e concentração são estudados em todo o intervalo do número de Knudsen. Uma análise termodinâmica do problema mostra que os fluxos de massa, calor e difusão são completamente determinados via coeficientes cinéticos de Onsager, os quais são calculados numericamente com base no modelo cinético de McCormack para a equação de Boltzmann. Os cálculos numéricos são realizados para três misturas de gases nobres: Neônio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio. No regime de moléculas livres, como a interação intermolecular pode ser desprezada, a solução da equação cinética é obtida analiticamente. No regime de transição a equação cinética é resolvida numericamente através do método de velocidades discretas. A condição de contorno de espalhamento difuso das partículas na superfície sólida é utilizada. No regime hidrodinâmico, visando evitar o esforço computacional necessário para a solução da equação cinética, utiliza-se a equação de Navier-Stokes com a condição de contorno de deslizamento da mistura gasosa na superfície sólida que a delimita. Os coeficientes de deslizamento viscoso, térmico e difuso são calculados numericamente e uma análise da sensibilidade desses coeficientes ao potencial de interação entre as partículas e à composição química da mistura é realizada. A não linearidade da velocidade hidrodinâmica na camada de Knudsen é verificada através dos perfis das velocidades das espécies constituintes de cada mistura considerada no presente trabalho. Os resultados obtidos para os coeficientes cinéticos são tabelados para um amplo intervalo de número de Knudsen e o perfil de cada coeficiente cinético em função da rarefação das misturas consideradas neste trabalho é mostrado. O perfil da velocidade dos constituintes da mistura Hélio-Argônio é mostrado nos três regimes de escoamento.

Palavras chave: gas rarefeito, misturas, coeficientes de deslizamento, fluxos de massa e calor

ABSTRACT

The mass flow and heat flux of a rarefied gas binary mixture through a long tube caused by gradients of pressure, temperature and concentration were studied over the whole range of the Knudsen number. A thermodynamics analysis of the problem shows that the mass flow rate and the heat and diffusion fluxes can be totally determined by using the Onsager kinetic coefficients which were calculated on the basis of the McCormack kinetic model of the Boltzmann equation. The numerical calculations were carried out for the gaseous mixtures Neon-Argon, Helium-Argon and Helium-Xenon. In the free molecular regime we may neglect the intermolecular collisions and, consequently, the solution of the kinetic equation can be solved analitically. In the transition regime the kinetic equation was solved by the discrete velocity method. The diffuse scattering boundary condition was used. To avoid the computational efforts necessary to solve the kinetic equation in the hydrodynamic regime we used the Navier-Stokes equation taking into account the velocity slip boundary condition. The viscous, thermal and diffusion slip coefficients were calculated and the dependence of these coefficients on the intermolecular interaction potential and chemical composition of gaseous mixture was studied. The velocity profiles of every species in the Knudsen layer were given. The results obtained for the kinetic coefficients were tabulated for an wide range of the Knudsen number and their profiles as a function of the rarefaction parameter of the mixture were given. The velocity profiles of species of the mixture Helium-Argon were given for the three regimes of the gas flow.

Key-words: rarefied gas, mixtures, slip coefficients, mass flow and heat flux

CAPÍTULO 1

Introdução

O estudo dos fenômenos de transporte no escoamento de gases rarefeitos através de capilares é muito importante para o desenvolvimento tecnológico de equipamentos de vácuo, indústria aeronáutica, microengenharia, etc. Em escoamentos de gases rarefeitos costuma-se caracterizar o regime de escoamento pelo chamado número de Knudsen Kn , definido como a razão entre o livre caminho médio molecular e um comprimento característico do escoamento, em três tipos: (i) regime de moléculas livres ($Kn \rightarrow \infty$) no qual o livre caminho médio molecular é muito maior que o comprimento característico do escoamento; (ii) regime hidrodinâmico ($Kn \rightarrow 0$) no qual o livre caminho médio molecular é muito pequeno comparado ao comprimento característico do escoamento e (iii) regime de transição, no qual o livre caminho médio molecular e o comprimento característico do escoamento possuem a mesma ordem de grandeza.

A Mecânica dos Meios Contínuos é válida somente no regime hidrodinâmico. Para abranger todo o intervalo de número de Knudsen é necessário aplicar a Dinâmica dos Gases Rarefeitos, um campo científico que tem se desenvolvido muito e cujos métodos se baseiam ou na solução da equação de Boltzmann [1] ou na simulação direta de Monte Carlo [2]. Como é conhecido, a equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial não linear muito complexa para ser resolvida e ainda hoje, com o grande avanço computacional, é muito difícil encontrar uma solução numérica para essa equação. Existem alguns trabalhos na literatura, como por exemplo [3, 4], nos quais a equação de Boltzmann é linearizada e resolvida numericamente com o operador de colisões exato mas esses trabalhos se restringem somente ao uso do potencial de interação intermolecular de esferas-rígidas. O método de simulação direta de Monte Carlo [2] é um método estatístico aplicado em escoamentos com número de Mach ¹ grande, como por exemplo, escoamento ao redor de uma esfera [5], escoamentos relacionados a aerodinâmica [6], escoamento de gás através de um orifício [7], etc. É um método muito conhecido nos campos de engenharia mas requer um esforço computacional muito grande.

Atualmente, existem muitos artigos na literatura referentes ao escoamento interno de gases rarefeitos e uma extensa lista de artigos publicados até 1998 com a respectiva análise crítica dos mesmos pode ser encontrada no review [8]. De 1998 em diante podemos citar [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17].

Em situações práticas lidamos mais frequentemente com escoamentos de misturas de gases rarefeitos e existem poucos artigos na literatura (comparados com o número de artigos existentes para escoamento de um único gás) sobre esse assunto, principalmente no regime

¹Os números de Mach Ma , Knudsen Kn e Reynolds Re estão relacionados pela expressão $Re = (\pi\gamma/2)^{1/2}Ma/Kn$, onde γ é a razão entre os calores específicos a pressão e volume constantes

de transição. As Refs. [18, 19, 20, 21] apresentam alguns dados experimentais referentes ao escoamento de uma mistura de gases rarefeitos através de um tubo. A Ref. [22] se restringe a pequenos números de Knudsen, ou seja, ao regime hidrodinâmico. As Refs. [23, 24, 25, 26] apresentam resultados numéricos para escoamentos de misturas de gases rarefeitos através de tubos e canais para todo o intervalo de número de Knudsen obtidos via método variacional. O escoamento de Couette para misturas gasosas é tratado nas Refs. [3, 27], o escoamento bidimensional de misturas através de uma fenda é tratado na Ref. [28]. Estudos mais recentes relacionados ao escoamento de misturas de gases rarefeitos podem ser encontrados nas Refs. [29, 30, 31, 32, 33].

Acredita-se que o pequeno número de publicações referentes ao estudo de misturas de gases rarefeitos ocorra devido ao fato de que a resolução de problemas associados ao escoamento de misturas de gases rarefeitos são mais complicados devido ao aparecimento de vários fenômenos tais como difusão, termo-difusão, barodifusão, etc.

O presente trabalho tem por objetivo determinar numericamente os fluxos de massa, calor e difusão no escoamento de uma mistura binária de gases rarefeitos através de um longo tubo sujeita a gradientes de pressão, temperatura e concentração considerando-se todo o intervalo de número de Knudsen. De acordo com uma análise termodinâmica do problema (apresentada no Capítulo 4), esses fluxos são completamente determinados através dos coeficientes cinéticos, os quais satisfazem as relações de reciprocidade de Onsager-Casimir [34, 35, 36, 37, 38] e servem como um importante critério da precisão dos cálculos numéricos. A determinação desses coeficientes é realizada através da solução numérica do modelo proposto por McCormack [39] para a equação de Boltzmann (equação cinética de McCormack).

No regime de moléculas livres a interação intermolecular pode ser desprezada e, conseqüentemente, a equação cinética pode ser resolvida analiticamente.

No regime de transição não podemos desprezar a interação intermolecular e, como consequência, obter uma solução analítica para a equação cinética não é tão simples como no regime de moléculas livres. Nesse regime a equação cinética é resolvida numericamente através do método de velocidades discretas [40] assumindo-se reflexão difusa das partículas na superfície sólida.

No regime hidrodinâmico também podemos resolver numericamente a equação cinética do mesmo modo que no regime de transição, mas à medida que a rarefação da mistura gasosa aumenta, ou seja, à medida que o número de Knudsen diminui, o esforço computacional necessário tende a aumentar. Nesse regime, é mais vantajoso trabalhar com as equações da Mecânica dos Meios Contínuos. Porém, quando isso é feito costuma-se resolver a equação de Navier-Stokes assumindo que a velocidade do gás na superfície sólida que o delimita é nula e, a equação de Fourier assumindo a continuidade da temperatura na interface gás-sólido. Isso é válido somente quando a rarefação do gás pode ser desprezada, o que ocorre para $Kn < 0.01$. Se assumirmos essas condições no intervalo $0.01 \leq Kn \leq 0.1$ existem certos fenômenos, como por exemplo o *creep* térmico² [12, 41, 42, 43], que não serão descritos de forma correta. Nesse intervalo de número de Knudsen devemos resolver a equação de Navier-Stokes com a condição de contorno de deslizamento da velocidade do gás na superfície sólida que o delimita e a equação de Fourier com a condição de contorno de salto de temperatura na interface gás-sólido.

²Movimento do gás nas proximidades da parede que ocorre devido a um gradiente longitudinal de temperatura. O gás se movimenta na direção oposta ao gradiente de temperatura, ou seja, das regiões com menor temperatura para as regiões com maior temperatura.

Neste trabalho, no regime hidrodinâmico os coeficientes cinéticos relacionados aos fenômenos de *creep* térmico, barodifusão, fluxo de Poiseuille, efeito mecanocalórico, termodifusão, efeito Dufour, fluxo de massa devido ao gradiente de concentração e fluxo ordinário de difusão são determinados através do uso combinado da lei de Fick e da equação de Navier-Stokes com a condição de contorno de deslizamento da velocidade da mistura na superfície sólida e das relações de reciprocidade de Onsager-Casimir. O coeficiente cinético relacionado ao fluxo ordinário de calor é obtido via lei de Fourier.

Como será visto no Capítulo 2, a condição de contorno de deslizamento da velocidade da mistura é expressa em função dos chamados coeficientes de deslizamento viscoso, térmico e difuso e é necessário conhecer os valores desses coeficientes a fim de determinar completamente os coeficientes cinéticos no regime hidrodinâmico.

Atualmente existe grande interesse por parte de cientistas e engenheiros no estudo e determinação dos coeficientes de deslizamento principalmente devido ao surgimento de uma revolucionária área de tecnologia: o desenvolvimento e fabricação das MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems). O estudo do fenômeno de deslizamento começou a ser estudado há muitos anos atrás por Maxwell [44, 45]. De acordo com as Refs. [44, 46] as primeiras estimativas para os coeficientes de deslizamento viscoso e térmico de um único gás foram feitas assumindo-se que a função de distribuição não varia na camada de Knudsen³ e que as partículas sofrem reflexão difusa-especular na superfície. Os resultados obtidos por Maxwell tiveram grande importância científica naquela época pois possibilitaram uma melhor compreensão do fenômeno de deslizamento de um gás. Hoje sabemos que as partículas gasosas incidentes interagem com as refletidas e, conseqüentemente, a função de distribuição das partículas incidentes varia significativamente na camada de Knudsen e essa variação deve ser considerada via solução da equação de Boltzmann.

Para o caso de gás único existem muitos trabalhos na literatura, tanto teóricos como experimentais, referentes ao estudo do fenômeno de deslizamento. Como exemplos mais atuais podemos citar as Refs. [47, 48, 49, 50, 51]. Também existem muitos trabalhos referentes à aplicação dos coeficientes de deslizamento em áreas específicas tais como aerodinâmica de veículos espaciais [52], modelagem numérica de microfluidicos [53, 54, 55], desenvolvimento de equipamentos de vácuo [56, 57, 58], etc. Uma análise crítica dos principais resultados teóricos para os coeficientes de deslizamento para gás único publicados até o anos de 1998 e 2000 pode ser encontrada, respectivamente, nas Refs. [8, 59].

Novamente, para o caso de misturas gasosas existem poucos artigos na literatura (comparados com o número de artigos existentes para gás único) referentes ao fenômeno de deslizamento. Algumas referências com a respectiva análise são apresentadas no Capítulo 2. Entre os artigos mais recentes podemos citar [60, 61, 62, 63, 64, 65, 66].

No presente trabalho também desenvolvemos um programa numérico para cálculo dos coeficientes de deslizamento para misturas de gases monoatômicos. Como será visto no Capítulo 5, o cálculo dos coeficientes de deslizamento se baseia na solução da equação cinética de McCormack [39] na camada de Knudsen via método de velocidades discretas [40]. Uma análise da sensibilidade dos coeficientes de deslizamento à composição química da mistura e ao potencial de interação entre as partículas gasosas é realizada. Para realizar essa análise utilizamos as misturas Neônio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio, o modelo de esferas-

³A camada de Knudsen é uma camada adjacente à superfície sólida e com espessura da ordem do livre caminho médio molecular

rígidas e também um potencial realístico [67] de interação entre as partículas.

A não linearidade da velocidade hidrodinâmica de cada mistura na camada de Knudsen é mostrada graficamente no Capítulo 7 juntamente com os demais resultados obtidos para os coeficientes de deslizamento.

Os resultados obtidos para os coeficientes cinéticos são tabelados para um amplo intervalo de número de Knudsen e o perfil de cada coeficiente em função da rarefação da mistura é mostrado graficamente. O perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura Hélio-Argônio é mostrado e analisado.

CAPÍTULO 2

Conceitos básicos da Dinâmica dos Gases Rarfeitos

Este capítulo tem por objetivo apresentar alguns dos conceitos fundamentais da Dinâmica dos Gases Rarfeitos utilizados no presente trabalho. Maiores detalhes podem ser encontrados nas Refs. [8, 68, 69, 70, 71, 72].

2.1 Número de Knudsen e parâmetro de rarefação

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

$$Kn = \frac{\lambda}{a}. \quad (2.1)$$

Costuma-se utilizar com maior frequência o chamado parâmetro de rarefação do gás, δ , que é inversamente proporcional ao número de Knudsen e, de acordo com a Ref. [8], é definido como

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{Kn}. \quad (2.2)$$

O parâmetro de rarefação δ (ou o número de Knudsen Kn) caracteriza a rarefação do gás e de acordo com o valor que esse parâmetro assume o regime de escoamento do fluxo gasoso pode ser dividido em três tipos:

- (i) regime de moléculas livres ($\delta \rightarrow 0$ ou $Kn \rightarrow \infty$): nesse regime o livre caminho médio molecular é muito maior que o comprimento característico do escoamento e, portanto, as colisões entre as partículas gasosas ocorrem com muito menos frequência que as colisões das partículas com a superfície sólida que delimita o fluxo gasoso. Assim, a interação entre as partículas pode ser desprezada, ou seja, nesse regime considera-se que as partículas se movimentam independentemente entre si.
- (ii) regime hidrodinâmico ($\delta \rightarrow \infty$ ou $Kn \rightarrow 0$): nesse regime o livre caminho médio é muito menor que o comprimento característico do escoamento e, conseqüentemente, o meio gasoso pode ser considerado como um meio contínuo no qual as equações da hidrodinâmica podem ser aplicadas.

(iii) regime de transição: quando o comprimento característico do escoamento é da mesma ordem de grandeza do livre caminho médio molecular, o regime é chamado de regime de transição. Nesse regime não podemos desprezar a interação entre as partículas como no regime de moléculas livres e também não podemos considerar o meio como um contínuo como no regime hidrodinâmico. Nesse regime a equação de Boltzmann deve ser resolvida e, por esse motivo, esse é o regime que apresenta maior dificuldade no estudo dos fenômenos que ocorrem em fluxos gasosos.

Muitos autores, como por exemplo Bird na Ref. [2], definem outro regime de escoamento intermediário aos regimes hidrodinâmico e de transição: o regime de deslizamento. Esse é o regime de escoamento onde o efeito de deslizamento do gás na superfície sólida que o delimita (apresentado na seção 4 deste capítulo) é de fundamental importância no estudo dos fenômenos relacionados ao escoamento. Porém, para definir esse regime de escoamento, ou seja, para indicar o intervalo de número de Knudsen que abrange este regime, é necessário estabelecer uma precisão para as quantidades a serem calculadas. Assumimos uma precisão de 1% para os fluxos a serem calculados e o intervalo de número de Knudsen no qual o efeito de deslizamento deve ser considerado ao resolver a equação de Navier-Stokes é $0.01 \leq Kn \leq 0.1$.

Para saber qual o valor do número de Knudsen ou do parâmetro de rarefação para um dado sistema gasoso precisamos saber o valor do livre caminho médio, o qual depende do tamanho e da velocidade das partículas ou das moléculas gasosas consideradas. Como essas quantidades são imensuráveis, os conceitos da teoria cinética dos gases [68] são utilizados para expressar o livre caminho médio da seguinte forma:

$$\lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\mu}{P} \left(\frac{2kT}{m} \right)^{1/2}, \quad (2.3)$$

onde m denota a massa das partículas (ou moléculas) gasosas, P e T denotam a pressão e temperatura do sistema gasoso, k é a constante de Boltzmann e μ a viscosidade do gás considerado. Assim, o uso da equação (2.3) permite determinar o livre caminho médio em função de quantidades mensuráveis.

Substituindo a Eq. (2.3) em (2.2) obtemos a seguinte expressão para o parâmetro de rarefação

$$\delta = \frac{P}{\mu} \left(\frac{m}{2kT} \right)^{1/2} a. \quad (2.4)$$

A Eq. (2.4) também é válida para misturas gasosas já que a pressão P e a viscosidade μ da mistura são quantidades mensuráveis e a massa m pode ser assumida como a massa média da mistura, ou seja,

$$m = \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 + n_2}, \quad (2.5)$$

onde m_α ($\alpha = 1, 2$) denota a massa atômica ou molecular da espécie α e n_α denota a densidade numérica das partículas tipo α .

2.2 Função de distribuição e equação de Boltzmann

Na teoria cinética dos gases, um gás monoatômico é descrito em termos de uma função de distribuição $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ que contém informação sobre a distribuição espacial e de velocidades das partículas gasosas num determinado instante de tempo. Assim, todas as propriedades

macroscópicas (pressão, temperatura, densidade, etc) do gás são determinadas através da função de distribuição $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$. As expressões para todas as macrocaracterísticas de um gás podem ser encontradas nas Refs. [8, 68]. Para o caso de uma mistura de N gases monoatômicos, a cada espécie gasosa está associada uma função de distribuição $f_\alpha(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ ($\alpha = 1, \dots, N$) e as propriedades macroscópicas da mistura são expressas da seguinte forma:

(i) Densidade numérica

$$n(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N n_\alpha(t, \mathbf{r}'), \quad (2.6)$$

onde

$$n_\alpha(t, \mathbf{r}') = \int f_\alpha(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha \quad (2.7)$$

é a densidade numérica do α -ésimo constituinte da mistura.

(ii) Velocidade hidrodinâmica

$$\mathbf{u}'(t, \mathbf{r}') = \frac{1}{\varrho} \sum_{\alpha=1}^N \varrho_\alpha \mathbf{u}'_\alpha(t, \mathbf{r}'), \quad (2.8)$$

onde

$$\varrho = \sum_{\alpha=1}^N \varrho_\alpha, \quad \varrho_\alpha = n_\alpha m_\alpha, \quad (2.9)$$

é a densidade de massa da mistura (ϱ_α denota a densidade de massa do constituinte α da mistura) e

$$\mathbf{u}'_\alpha(t, \mathbf{r}') = \frac{1}{n_\alpha} \int \mathbf{v}_\alpha f_\alpha(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha, \quad (2.10)$$

é a velocidade hidrodinâmica do α -ésimo constituinte da mistura.

(iii) Tensor tensão

$$\Pi_{ij}(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N \Pi_{\alpha ij}(t, \mathbf{r}'), \quad (2.11)$$

onde

$$\Pi_{\alpha ij}(t, \mathbf{r}') = m_\alpha \int V_{\alpha i} V_{\alpha j} f_\alpha(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha, \quad (2.12)$$

é o tensor tensão do α -ésimo constituinte da mistura e

$$\mathbf{V}_\alpha = \mathbf{v}_\alpha - \mathbf{u}' \quad (2.13)$$

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

(iv) Vetor fluxo de calor

$$\mathbf{q}'(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{q}'_\alpha(t, \mathbf{r}'), \quad (2.14)$$

onde

$$\mathbf{q}'_{\alpha}(t, \mathbf{r}') = \frac{m_{\alpha}}{2} \int V_{\alpha}^2 \mathbf{V}_{\alpha} f_{\alpha}(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha}, \quad (2.15)$$

é o vetor fluxo de calor do α -ésimo constituinte da mistura.

(v) Pressão

$$P(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N P_{\alpha}(t, \mathbf{r}'), \quad (2.16)$$

onde

$$P_{\alpha}(t, \mathbf{r}') = \frac{m_{\alpha}}{3} \int V_{\alpha}^2 f_{\alpha}(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha}, \quad (2.17)$$

denota a pressão de cada constituinte da mistura.

(vi) Temperatura

$$T(t, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha=1}^N T_{\alpha}(t, \mathbf{r}'), \quad (2.18)$$

onde

$$T_{\alpha}(t, \mathbf{r}') = \frac{m_{\alpha}}{3nk} \int V_{\alpha}^2 f_{\alpha}(t, \mathbf{r}', \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha}, \quad (2.19)$$

denota a temperatura dos constituintes da mistura.

A função de distribuição de um gás satisfaz à equação de Boltzmann [1, 68, 69, 70, 71, 72], uma equação integro-diferencial não linear, estabelecida por Ludwig Boltzmann em 1872, que é a base da teoria cinética dos gases.

Para uma mistura de N gases cada função de distribuição $f_{\alpha}(t, \mathbf{r}', \mathbf{v})$ ($\alpha = 1, \dots, N$) satisfaz um equação de Boltzmann, ou seja, temos um sistema de N equações de Boltzmann que, na ausência de forças externas, pode ser escrito do seguinte modo

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\alpha} \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \mathbf{r}} = \sum_{\beta=1}^N Q(f_{\alpha} f_{\beta}), \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (2.20)$$

onde

$$Q(f_{\alpha} f_{\beta}) = \int \int \int w(\mathbf{v}_{\alpha}, \mathbf{v}_{\beta}; \mathbf{v}'_{\alpha}, \mathbf{v}'_{\beta}) (f'_{\alpha} f'_{\beta} - f_{\alpha} f_{\beta}) d\mathbf{v}'_{\alpha} d\mathbf{v}'_{\beta} d\mathbf{v}_{\beta} \quad (2.21)$$

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

(i) Condição de normalização

$$\int \int w(\mathbf{v}_{\alpha}, \mathbf{v}_{\beta}; \mathbf{v}'_{\alpha}, \mathbf{v}'_{\beta}) d\mathbf{v}_{\alpha} d\mathbf{v}_{\beta} = 1; \quad (2.22)$$

(ii) Condição de reversibilidade no processo de colisão, i.e.

$$w(\mathbf{v}_\alpha, \mathbf{v}_\beta; \mathbf{v}'_\alpha, \mathbf{v}'_\beta) = w(-\mathbf{v}'_\alpha, -\mathbf{v}'_\beta; -\mathbf{v}_\alpha, -\mathbf{v}_\beta). \quad (2.23)$$

A integral das colisões moleculares satisfaz as seguintes condições:

(i) Condição associada às leis de conservação de massa, momento e energia nas colisões entre as partículas

$$\sum_{\beta=1}^N \int \psi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) Q(f_\alpha f_\beta) d\mathbf{v}_\alpha = 0, \quad (2.24)$$

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

$$\psi_\alpha = m_\alpha, \quad \psi_\alpha = m_\alpha \mathbf{v}_\alpha, \quad \psi_\alpha = \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2. \quad (2.25)$$

(ii) Teorema H de Boltzmann

$$\sum_{\alpha, \beta} \int \ln f_\alpha Q(f_\alpha f_\beta) d\mathbf{v}_\alpha \leq 0. \quad (2.26)$$

A condição dada em (2.26) deve ser satisfeita pela integral de colisões para garantir a validade da segunda lei da termodinâmica.

A grande dificuldade para resolver a equação de Boltzmann está na presença da integral de colisões $Q(f_\alpha f_\beta)$. Existem vários métodos analíticos para resolver a equação de Boltzmann, como por exemplo, método dos momentos de Grad [1, 2, 69, 72] e método de Chapman-Enskog [1, 2, 69, 70]. Porém, esses métodos fornecem resultados aproximados que são válidos somente num determinado intervalo do número de Knudsen (regime hidrodinâmico). Segundo a Ref. [73], mesmo no regime hidrodinâmico existem alguns fenômenos que não são descritos de forma correta com o uso do método analítico de Chapman-Enskog.

Para considerar todo o intervalo do número de Knudsen surgiu a idéia de simplificar a integral de colisões utilizando um modelo matemático para essa integral. A escolha desse modelo matemático, também chamado de modelo cinético, deve ser feita observando-se que: (i) as propriedades fundamentais (2.24) e (2.26) da integral de colisões original devem ser mantidas; (ii) a equação simplificada deve fornecer corretamente todos os coeficientes de transporte (viscosidade, condutividade térmica, etc); (iii) no estado de equilíbrio a integral de colisões deve ser nula.

Ao substituir a integral de colisões por um modelo cinético a equação de Boltzmann passa a ser chamada de equação modelo ou equação cinética.

Os modelos mais conhecidos para gás único são o modelo de BGK (Bhatnagar, Gross e Krook) [74] e o modelo de Shakhov [75]. Entre os modelos propostos para misturas gasosas [76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83] o modelo proposto por McCormack [39] é o mais adequado pois mantém as propriedades da integral de colisões original e fornece corretamente todos os coeficientes de transporte (viscosidade, condutividade térmica, difusão e termo-difusão). Detalhes sobre esse modelo podem ser encontrados no Apêndice A.

Atualmente, com o avanço computacional, é possível resolver a equação de Boltzmann com a integral de colisões exata, mas essa ainda é uma tarefa difícil e que exige um grande

esforço computacional. Os trabalhos existentes na literatura, como por exemplo [3, 65, 84, 85], nos quais a equação de Boltzmann é resolvida com a integral de colisões original se restringem somente a utilização do modelo mais simples de interação intermolecular, o modelo de esferas-rígidas, e como é conhecido existem situações nas quais este modelo de potencial fornece resultados sem sentido físico.

Portanto, os modelos cinéticos ainda hoje continuam sendo muito utilizados em cálculos práticos que envolvem a solução da equação de Boltzmann justamente por exigirem menos esforço computacional e ao mesmo tempo fornecerem resultados em boa concordância com os obtidos experimentalmente e via solução da equação exata de Boltzmann.

2.3 Interação gás-superfície

O estudo da interação gás-superfície é de grande importância na Dinâmica dos Gases Rarefeitos pois permite especificarmos as condições de contorno das moléculas refletidas na superfície sólida.

De acordo com a Ref. [1], na superfície sólida que delimita o gás precisamos estabelecer uma relação entre as funções de distribuição das partículas que incidem na parede f^- e das partículas que deixam a parede f^+ . Para uma mistura de N gases essa relação é escrita do seguinte modo:

$$|v_{\alpha n}|f_{\alpha}^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \int_{v'_{\alpha n} < 0} |v'_{\alpha n}| \mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_{\alpha} \rightarrow \mathbf{v}_{\alpha}) f_{\alpha}^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}') d\mathbf{v}'_{\alpha}, \quad v_{\alpha n} \geq 0, \quad (2.27)$$

onde $\alpha = 1, \dots, N$, \mathbf{v}'_{α} e \mathbf{v}_{α} são, respectivamente, as velocidades de incidência e reflexão na parede do α -ésimo constituinte da mistura e $v_{\alpha n} = \mathbf{v}_{\alpha} \cdot \mathbf{n}$ é a componente normal da velocidade do α -ésimo constituinte da mistura.

$\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_{\alpha} \rightarrow \mathbf{v}_{\alpha})$ denota o núcleo de espalhamento do constituinte α . O núcleo de espalhamento é a densidade de probabilidade de que uma partícula que chega à parede com velocidade entre \mathbf{v}'_{α} e $\mathbf{v}'_{\alpha} + d\mathbf{v}'_{\alpha}$ num ponto \mathbf{r} e tempo t deixe a parede praticamente no mesmo ponto com velocidade entre \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ após um intervalo de tempo Δt . Assim, o núcleo de espalhamento expressa o tipo de interação que ocorre entre o gás e a superfície sólida que o delimita e depende da espécie gasosa em estudo, da composição química e temperatura da superfície, da estrutura mecânica da superfície, etc. É uma quantidade sempre positiva que satisfaz a condição de normalização

$$\int_{v_{\alpha n} > 0} \mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_{\alpha} \rightarrow \mathbf{v}_{\alpha}) d\mathbf{v}_{\alpha} = 1, \quad (2.28)$$

e a relação de reciprocidade

$$|v'_{\alpha n}| \exp\left(-\frac{m_{\alpha} \mathbf{v}'_{\alpha}{}^2}{2kT_w}\right) \mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_{\alpha} \rightarrow \mathbf{v}_{\alpha}) = |v_{\alpha n}| \exp\left(-\frac{m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}{}^2}{2kT_w}\right) \mathcal{R}(\mathbf{r}, -\mathbf{v}_{\alpha} \rightarrow -\mathbf{v}'_{\alpha}), \quad (2.29)$$

onde T_w é a temperatura da parede e m_{α} é massa do α -ésimo constituinte da mistura. A prova da relação de reciprocidade (2.29) é apresentada por Cercignani na Ref. [1].

A interação gás-superfície mais conhecida e muito utilizada em cálculos práticos é a reflexão difusa e, neste caso, o núcleo de espalhamento do α -ésimo constituinte da mistura é

escrito do seguinte modo

$$\mathcal{R}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_\alpha \rightarrow \mathbf{v}'_\alpha) = \frac{m_\alpha^2 v_{\alpha n}}{2\pi(kT_w)^2} \exp\left(-\frac{m_\alpha \mathbf{v}'_\alpha^2}{2kT_w}\right). \quad (2.30)$$

Fisicamente esse núcleo expressa que todas as partículas são refletidas com uma função de distribuição Maxwelliana que independe da função de distribuição das partículas incidentes, ou seja, a partícula refletida perde toda a informação sobre seu estado anterior à colisão com a parede.

A interação gás-superfície também pode ser descrita através do chamado coeficiente de acomodação $a(\varphi)$ definido na Ref. [69]. Para um mistura de N gases rarefeitos, cada espécie gasosa possui um coeficiente de acomodação definido da seguinte forma:

$$a_\alpha(\varphi) = \frac{\int_{v'_{\alpha n} < 0} \varphi(\mathbf{v}'_\alpha) |v'_{\alpha n}| f_\alpha(\mathbf{v}'_\alpha) d\mathbf{v}'_\alpha - \int_{v_{\alpha n} > 0} \varphi(\mathbf{v}_\alpha) |v_{\alpha n}| f_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}_\alpha}{\int_{v'_{\alpha n} < 0} \varphi(\mathbf{v}'_\alpha) |v'_{\alpha n}| f_\alpha(\mathbf{v}'_\alpha) d\mathbf{v}'_\alpha - \int_{v_{\alpha n} > 0} \varphi(\mathbf{v}_\alpha) |v_{\alpha n}| f_{\alpha d}(\mathbf{v}_\alpha) d\mathbf{v}}, \quad (2.31)$$

onde $f_\alpha(\mathbf{v}'_\alpha)$ é a função de distribuição das partículas incidentes, $f_\alpha(\mathbf{v}_\alpha)$ é a função de distribuição das partículas refletidas, $\varphi(\mathbf{v}_\alpha)$ é uma dada função da velocidade da partícula e $f_{\alpha d}(\mathbf{v}_\alpha)$ é a função de distribuição das partículas refletidas difusamente.

No caso de reflexão difusa, ao substituírmos as Eqs. (2.27) e (2.30) na Eq. (2.31) obtemos que $a_\alpha(\varphi) = 1$ para qualquer função $\varphi(\mathbf{v}_\alpha)$. Por isso, a reflexão difusa também é conhecida como espalhamento com acomodação perfeita.

Existem outros núcleos de espalhamento bastante conhecidos e utilizados, como por exemplo, o núcleo correspondendo à interação difusa-especular introduzido por Maxwell [8] e o núcleo introduzido por Cercignani e Lampis [86].

Existem situações nas quais os resultados teóricos obtidos através da consideração de interação difusa não concordam com os resultados experimentais. Essa discordância costuma ocorrer quando lidamos com gases leves como Hélio e Neônio. Nesse caso, para eliminar essa discrepância utiliza-se o núcleo de espalhamento difuso-especular proposto por Maxwell. Porém, também existem situações onde o uso do núcleo de Maxwell falha, veja por exemplo as Refs. [87, 88], e tal falha se deve ao fato de que nesse núcleo os coeficientes de acomodação associados a cada função $\varphi(\mathbf{v}_\alpha)$ são todos iguais ao número de partículas refletidas difusamente, enquanto que na prática as funções $\varphi(\mathbf{v}_\alpha)$ ($\alpha = 1, \dots, N$) estão associadas a coeficientes de acomodação diferentes entre si.

O núcleo de espalhamento proposto por Cercignani e Lampis [86] fornece resultados mais coerentes com os experimentais pois são introduzidos dois coeficientes de acomodação: um coeficiente de acomodação de momento tangencial e outro coeficiente de acomodação para a energia cinética. Apesar de fornecer resultados mais corretos do que os obtidos via núcleo de Maxwell, esse modelo de núcleo é pouco utilizado devido à sua complexidade.

Na prática costuma-se assumir com maior frequência a interação difusa e, por isso, neste trabalho essa é a interação assumida. Mesmo considerando misturas com gases leves não utilizamos outro tipo de interação e, caso considerássemos, o número de parâmetros necessários nos cálculos numéricos aumentaria já que haveria necessidade de introduzir os coeficientes de acomodação de cada espécie constituinte da mistura.

2.4 Deslizamento do gás na superfície sólida

De acordo com a seção 2.1, no regime hidrodinâmico ($Kn \rightarrow 0$ ou $\delta \rightarrow \infty$) podemos evitar a resolução da equação cinética, a qual exige um grande esforço computacional, e utilizar as equações da Mecânica dos Meios Contínuos. Geralmente, quando isso é feito costuma-se resolver a equação de Navier-Stokes assumindo que a velocidade tangencial do gás na superfície sólida que o delimita é igual a zero. Isso é válido somente quando o número de Knudsen é pequeno o suficiente para que a rarefação do gás possa ser desprezada. Porém, existem situações onde a rarefação do gás não pode ser desprezada (MEMS e aerodinâmica nas camadas superiores, por exemplo) e, nesses casos, se assumirmos a velocidade tangencial à parede nula não descreveremos de forma correta alguns fenômenos tais como o *creep* térmico devido ao aparecimento do fenômeno de deslizamento do gás na superfície sólida.

O fenômeno de deslizamento é bastante conhecido e começou a ser analisado por Maxwell [44, 45]. A ocorrência desse fenômeno está associada à considerável influência de gradientes de velocidade normais à superfície sólida e gradientes de temperatura e concentração longitudinais à superfície sólida que delimita o fluxo gasoso. O deslizamento devido ao gradiente de velocidade é conhecido como deslizamento viscoso e o devido ao gradiente de temperatura é conhecido como deslizamento térmico. O deslizamento devido ao gradiente de concentração é chamado de deslizamento difuso e foi primeiramente discutido e analisado por Kramers and Kistemaker na Ref. [89]. Para considerar o efeito de deslizamento, a equação de Navier-Stokes deve ser resolvida utilizando a condição de contorno de deslizamento do gás na superfície sólida que o delimita.

Essa condição de contorno é escrita em função dos chamados coeficientes de deslizamento da velocidade e, no caso de uma mistura de gases rarefeitos, pode ser escrita do seguinte modo:

$$u'_t|_{x'=0} = \sigma_p \frac{\mu}{P} \left(\frac{2kT}{m} \right)^{1/2} \frac{\partial u'_t}{\partial x'} + \sigma_c \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial \ln C}{\partial \tau'} + \sigma_T \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial \ln T}{\partial \tau'}, \quad \tau' = y', z', \quad (2.32)$$

onde u'_t denota a velocidade tangencial da mistura na superfície sólida, x' é a coordenada normal à superfície na direção parede \rightarrow gás, μ é a viscosidade da mistura, C é a concentração molar da mistura definida como

$$C = \frac{n_1}{n_1 + n_2}, \quad (2.33)$$

P é pressão local da mistura, T é a temperatura local da mistura, ρ é a densidade de massa da mistura,

$$m = Cm_1 + (1 - C)m_2 \quad (2.34)$$

é massa molecular média da mistura e k é a constante de Boltzmann. As quantidades adimensionais σ_p , σ_c e σ_T denotam, respectivamente, os coeficientes de deslizamento viscoso, difuso e térmico.

O significado da condição de contorno de deslizamento da velocidade, dada na Eq. (2.32), é que a velocidade tangencial da mistura na superfície sólida depende do perfil de velocidade, da distribuição de temperatura e da densidade do número de partículas dos constituintes da mistura (concentração) nas proximidades da parede.

As primeiras estimativas para os coeficientes de deslizamento viscoso σ_p e térmico σ_T para um gás único foram obtidas por Maxwell [44] em 1879. Ele considerou que uma parte α das moléculas incidentes era refletida difusamente enquanto que o restante, i.e. $(1 -$

α), era refletida especularmente. Maxwell também assumiu que a função de distribuição não varia na camada de Knudsen¹. Com essas hipóteses ele obteve as seguintes estimativas para os coeficientes de deslizamento viscoso e térmico de um gás único:

$$\sigma_p = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{2 - \alpha}{\alpha}, \quad \sigma_T = 0.75. \quad (2.35)$$

Naquela época esses resultados tiveram grande importância científica pois possibilitaram uma melhor compreensão do fenômeno de deslizamento viscoso e térmico. Porém, as moléculas incidentes interagem com as moléculas refletidas e, conseqüentemente, a função de distribuição das moléculas incidentes varia significativamente na camada de Knudsen e essa variação deve ser considerada via solução da equação de Boltzmann.

O fenômeno de deslizamento difuso foi primeiramente notado e analisado por Kramers e Kistemaker na Ref. [89] e a primeira estimativa para esse coeficiente foi feita por Brock na Ref. [90].

Nos últimos anos um grande avanço referente ao cálculo dos coeficientes de deslizamento foi feito, mas mesmo assim ainda encontramos muitos trabalhos recentes, como por exemplo [91, 92, 93], nos quais as estimativas dadas em (2.35) são utilizadas.

Nas Refs. [94, 95, 96, 97] o fenômeno de deslizamento de misturas é estudado com base no método dos momentos para a equação de Boltzmann. Já nas Refs. [98, 99, 100] o deslizamento de misturas é estudado com base no método variacional para solução da equação cinética. Nas Refs. [101, 102] o coeficiente de deslizamento difuso foi obtido via solução da equação cinética de Hamel [79]. Entretanto, o modelo de Hamel não fornece expressões corretas para todos os coeficientes de transporte e, conseqüentemente, nem todos os resultados obtidos através desse modelo são confiáveis.

Nas Refs. [65, 85] os coeficientes de deslizamento térmico e difuso para misturas hipotéticas de gases rarefeitos são determinados via solução da equação de Boltzmann com a integral de colisões original mas esses trabalhos se restringem ao uso do modelo de esferas-rígidas de interação entre as partículas e, de acordo com a Ref. [94] e com os resultados obtidos no presente trabalho (apresentados no Capítulo 7), os coeficientes de deslizamento térmico e difuso dependem do potencial de interação entre as partículas e, portanto, é necessário utilizar um potencial de interação mais próximo da realidade física.

¹Camada adjacente à superfície sólida e com espessura da ordem do livre caminho médio molecular

CAPÍTULO 3

Exposição do problema e objetivo

Considera-se dois grandes reservatórios contendo a mesma mistura binária de gases rarefeitos e conectados através de um tubo de comprimento ℓ e raio R tal que $\ell \gg R$. A Figura 3.1 esquematiza o sistema.

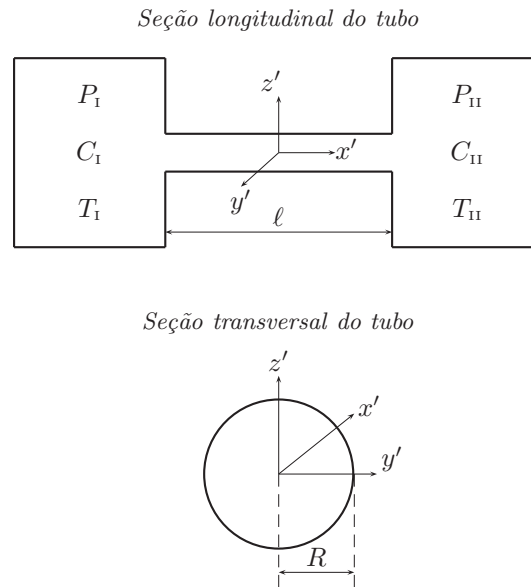


Figura 3.1: Esquema e coordenadas do escoamento da mistura gasosa

A mistura confinada no reservatório esquerdo possui pressão P_I , temperatura T_I e concentração molar C_I enquanto que a mistura confinada no reservatório direito possui pressão P_{II} , temperatura T_{II} e concentração molar C_{II} . A concentração molar da mistura é definida na Eq. (2.33).

A mistura gasosa flui através do capilar devido aos gradientes longitudinais de pressão X_p , temperatura X_T e concentração X_C , definidos da seguinte forma

$$X_p = \frac{R}{P} \frac{\partial P}{\partial x'}, \quad X_T = \frac{R}{T} \frac{\partial T}{\partial x'}, \quad X_C = \frac{R}{C} \frac{\partial C}{\partial x'}, \quad (3.1)$$

onde P , T e C correspondem, respectivamente, à pressão, temperatura e concentração da mistura numa dada seção transversal do tubo.

Segundo as Refs. [8, 17, 103, 104], para um gás fluindo através de um longo capilar ($\ell \gg R$) os gradientes locais de pressão e temperatura são pequenos mesmo se as diferenças de pressão e temperatura nos reservatórios conectados pelo capilar forem grandes. Isso pode ser facilmente verificado pois

$$\frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial x'} \sim \frac{P_{\text{II}} - P_{\text{I}}}{P_{\text{av}} \ell} = O\left(\frac{1}{\ell}\right), \quad (3.2)$$

$$\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x'} \sim \frac{T_{\text{II}} - T_{\text{I}}}{T_{\text{av}} \ell} = O\left(\frac{1}{\ell}\right), \quad (3.3)$$

onde

$$P_{\text{av}} = \frac{P_{\text{I}} + P_{\text{II}}}{2}, \quad T_{\text{av}} = \frac{T_{\text{I}} + T_{\text{II}}}{2}, \quad (3.4)$$

são, respectivamente, a pressão e temperatura médias da mistura gasosa confinada no capilar. O mesmo é válido para o gradiente de concentração pois

$$\frac{1}{C} \frac{\partial C}{\partial x'} \sim \frac{C_{\text{II}} - C_{\text{I}}}{C_{\text{av}} \ell} = O\left(\frac{1}{\ell}\right), \quad (3.5)$$

onde

$$C_{\text{av}} = \frac{C_{\text{I}} + C_{\text{II}}}{2} \quad (3.6)$$

é a concentração média da mistura confinada no capilar.

Então, como assumimos que $\ell \gg R$, os gradientes definidos em (3.1) são pequenos, ou seja

$$|X_{\text{P}}| \ll 1, \quad |X_{\text{T}}| \ll 1, \quad |X_{\text{C}}| \ll 1. \quad (3.7)$$

Outras consequências de assumirmos $\ell \gg R$ são a de podermos desprezar os efeitos de borda e considerar somente as componentes longitudinais para o vetor fluxo de calor e velocidade hidrodinâmica da mistura, i.e.

$$\mathbf{q}' = (q'_x, 0, 0), \quad \mathbf{u}' = (u'_x, 0, 0). \quad (3.8)$$

Ao longo do tubo existem fenômenos de transferência de massa e transferência de calor. O fenômeno de transferência de massa ocorre devido ao gradiente de pressão (Fluxo de Poiseuille) e também devido aos fenômenos de difusão e creep térmico (fluxo de massa devido ao gradiente de temperatura). A transferência de calor ocorre devido ao gradiente de temperatura e também devido ao efeito mecanocalórico (fluxo de calor devido ao gradiente de pressão) e ao efeito Dufour (fluxo de calor causado pelo gradiente de concentração). A difusão se deve ao gradiente de concentração e também aos fenômenos de termo-difusão (difusão devida ao gradiente de temperatura) e barodifusão (difusão devida ao gradiente de pressão).

O objetivo do presente trabalho é calcular numericamente os fluxos de massa J_{M} , calor J_{H} e difusão J_{D} , os quais possuem interesse prático, para um intervalo de número de Knudsen que varia desde o regime de moléculas livres (Knudsen $\rightarrow \infty$) até o regime hidrodinâmico (Knudsen $\rightarrow 0$).

Esses fluxos são definidos da seguinte forma:

$$J_{\text{M}} = 2\pi \int_0^R \rho u'_x r' dr', \quad (3.9)$$

$$J_H = 2\pi \int_0^R q'_x r' dr', \quad (3.10)$$

$$J_D = 2\pi \int_0^R \varrho_1 (u'_{1x} - u'_x) r' dr' = 2\pi \int_0^R \frac{\varrho_1 \varrho_2}{\varrho} (u'_{1x} - u'_{2x}) r' dr', \quad (3.11)$$

onde ϱ é a densidade de massa da mistura, ϱ_1, ϱ_2 são as densidades de massa de cada espécie que compõe a mistura e as definições para essas grandezas são dadas na Eq. (2.9). As componentes longitudinais da velocidade hidrodinâmica u'_x e do vetor fluxo de calor q'_x são definidas nas Eqs. (2.8) e (2.14). A quantidade

$$r' = \sqrt{y'^2 + z'^2} \quad (3.12)$$

é a coordenada radial (devido à geometria do problema é mais conveniente trabalhar com coordenadas cilíndricas (x', r', φ) no lugar das coordenadas cartesianas (x', y', z')).

No próximo capítulo mostra-se, através de uma análise termodinâmica do problema, que os coeficientes cinéticos [34], além de fornecerem um importante critério de precisão dos cálculos numéricos, determinam completamente os fluxos de massa J_M , calor J_H e difusão J_D que desejamos encontrar.

CAPÍTULO 4

Análise termodinâmica

De acordo com a Ref. [34], no estudo termodinâmico dos processos irreversíveis os fluxos podem ser representados como combinações lineares das forças termodinâmicas, ou seja,

$$J_i = \sum_j \Lambda'_{ij} X_j, \quad (4.1)$$

onde J_i são fluxos termodinâmicos (fluxo de massa, calor, etc), X_i são forças termodinâmicas (gradientes de pressão, temperatura, etc) e Λ'_{ij} são os chamados coeficientes cinéticos. A Eq. (4.1) é válida se as forças termodinâmicas X_i forem fracas, ou seja, $|X_i| \ll 1$, de modo que o sistema está num estado fracamente desequilibrado.

Se os fluxos e as forças termodinâmicas forem escolhidos de forma que a produção de entropia σ no sistema tenha a forma

$$\sigma = \sum_i J_i X_i = \sum_{ij} \Lambda'_{ij} X_i X_j, \quad (4.2)$$

o teorema de Onsager-Casimir estabelece que os coeficientes cinéticos satisfazem a relação de reciprocidade

$$\Lambda'_{ji} = \epsilon_i \epsilon_j \Lambda'_{ij}, \quad (4.3)$$

onde ϵ_j assume o valor +1 se a força termodinâmica X_j for invariante frente a uma reversão temporal, ou -1 caso contrário. A relação de reciprocidade entre os coeficientes cinéticos das equações lineares que descrevem as leis fenomenológicas dos processos irreversíveis foi estabelecida em 1931 por Onsager [37] para sistemas isolados. Posteriormente Casimir [35] generalizou as relações de reciprocidade para levar em consideração a paridade temporal das forças termodinâmicas. De Groot e Mazur [34] obtiveram as relações de reciprocidade para o caso de sistemas em equilíbrio local e, nas Refs. [38, 43, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111], as relações de reciprocidade foram obtidas para sistemas abertos fora do estado de equilíbrio local.

Na Eq. (4.2), a matriz dos coeficientes cinéticos deve ser definida positivamente pois a produção de entropia num processo irreversível é sempre positiva.

Na situação apresentada no capítulo anterior, se escrevermos os fluxos J_M , J_H e J_D na forma da Eq. (4.1) a relação de reciprocidade (4.3) não será satisfeita. De acordo com a Ref. [38] os fluxos de massa J_p , calor J_T e difusão J_C , que satisfazem a relação de reciprocidade (4.3), associados aos gradientes de pressão X_p , temperatura X_T e concentração X_C , são definidos como

$$J_p = -2\pi n_0 \int_0^R w_x r' dr', \quad (4.4)$$

$$J_T = -\frac{2\pi}{kT_0} \int_0^R q_x^* r' dr', \quad (4.5)$$

$$J_C = -2\pi n_{01} \int_0^R (u'_{1x} - u'_{2x}) r' dr', \quad (4.6)$$

onde

$$w_x = \frac{1}{n} (n_1 u'_{1x} + n_2 u'_{2x}) \quad (4.7)$$

é a componente longitudinal da velocidade média da mistura e

$$q_x^* = q'_x - \frac{5}{2} P (w_x - u'_x) \quad (4.8)$$

é a componente longitudinal do vetor fluxo de calor peculiar.

Para esses fluxos, a Eq. (4.1) é escrita como

$$\begin{pmatrix} J_P \\ J_T \\ J_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda'_{PP} & \Lambda'_{PT} & \Lambda'_{PC} \\ \Lambda'_{TP} & \Lambda'_{TT} & \Lambda'_{TC} \\ \Lambda'_{CP} & \Lambda'_{CT} & \Lambda'_{CC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_P \\ X_T \\ X_C \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Na forma adimensional, os coeficientes cinéticos são escritos do seguinte modo:

$$\Lambda_{ij} = \frac{2}{n_0 \pi R^2} \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2} \Lambda'_{ij}. \quad (4.10)$$

Como os gradientes de pressão X_P , temperatura X_T e concentração X_C são pequenos, as seguintes relações lineares são válidas:

$$u_{\alpha x} = u_{\alpha x}^{(P)} X_P + u_{\alpha x}^{(T)} X_T + u_{\alpha x}^{(C)} X_C, \quad (4.11)$$

$$q_{\alpha x} = q_{\alpha x}^{(P)} X_P + q_{\alpha x}^{(T)} X_T + q_{\alpha x}^{(C)} X_C, \quad (4.12)$$

onde $u_{\alpha x}$ e $q_{\alpha x}$ denotam, respectivamente, as componentes longitudinais da velocidade hidrodinâmica e do vetor fluxo de calor adimensionais, definidas como

$$u_{\alpha x} = \frac{u'_{\alpha x}}{v_0}, \quad q_{\alpha x} = \frac{q'_{\alpha x}}{P_{\alpha 0} v_0}, \quad v_0 = \left(\frac{2kT_0}{m} \right)^{1/2}. \quad (4.13)$$

Substituindo as relações (4.11) e (4.12) nas equações (4.4)-(4.6) obtemos, após uma comparação com (4.9) e adimensionalização segundo (4.10), as seguintes expressões para os coeficientes cinéticos adimensionais :

$$\Lambda_{Pi} = -4 \int_0^1 [C_0 u_{1x}^{(i)} + (1 - C_0) u_{2x}^{(i)}] r dr, \quad (4.14)$$

$$\Lambda_{Ti} = -4 \int_0^1 q_x^{*(i)} r dr, \quad (4.15)$$

$$\Lambda_{Ci} = -4C_0 \int_0^1 (u_{1x}^{(i)} - u_{2x}^{(i)}) r dr. \quad (4.16)$$

Como os gradientes considerados são invariantes frente a uma reversão temporal, as relações de reciprocidade de Onsager-Casimir, dadas em (4.3), são as seguintes:

$$\Lambda_{PT} = \Lambda_{TP}, \quad \Lambda_{PC} = \Lambda_{CP}, \quad \Lambda_{TC} = \Lambda_{CT}. \quad (4.17)$$

Cada coeficiente cinético possui um significado físico. Os coeficientes com índices iguais estão associados aos fenômenos diretos enquanto que os coeficientes com índices diferentes estão associados aos fenômenos cruzados. A seguir encontra-se o significado de cada um dos coeficientes cinéticos.

- (i) Λ_{pp} descreve o fluxo de massa causado pelo gradiente de pressão X_p . No regime hidrodinâmico esse fluxo é conhecido como fluxo de Poiseuille e é relacionado com o coeficiente de viscosidade.
- (ii) Λ_{TT} descreve o fluxo de calor devido ao gradiente de temperatura X_T . No regime hidrodinâmico esse fluxo está relacionado ao coeficiente de condutividade térmica.
- (iii) Λ_{CC} é o fluxo de difusão devido ao gradiente de concentração X_C . No regime hidrodinâmico esse fluxo está relacionado ao coeficiente de difusão.
- (iv) Λ_{pT} é o fluxo de massa devido ao gradiente de temperatura X_T . Esse fluxo é conhecido como *creep* térmico.
- (v) Λ_{Tp} é o fluxo de calor devido ao gradiente de pressão X_p , o qual é conhecido como efeito mecanocalórico.
- (vi) Λ_{pC} é o fluxo de massa devido ao gradiente de concentração X_C .
- (vii) Λ_{Cp} é o fluxo de difusão devido ao gradiente de pressão X_p , conhecido como barodifusão.
- (viii) Λ_{TC} descreve o fluxo de calor devido ao gradiente de concentração X_C . É conhecido como efeito Dufour.
- (ix) Λ_{CT} é o fluxo de difusão causado pelo gradiente de temperatura X_T . É conhecido como termo-difusão ou efeito Soret.

Os fluxos de interesse prático, dados nas equações (3.9)-(3.11), estão relacionados aos fluxos termodinâmicos J_p , J_T e J_C do seguinte modo:

$$J_M = -mJ_p + (m_2 - m_1)(1 - C_0)J_C, \quad (4.18)$$

$$J_H = -kT \left[J_T + \frac{5}{2} \frac{(m_2 - m_1)}{m} (1 - C_0)J_C \right], \quad (4.19)$$

$$J_D = -\frac{m_1 m_2}{m} (1 - C_0)J_C. \quad (4.20)$$

Assim, para determinar os fluxos de massa J_M , calor J_H e difusão J_C basta determinar os fluxos termodinâmicos J_p , J_T e J_C , os quais são obtidos via coeficientes cinéticos. A vantagem em utilizar as expressões (4.18)-(4.20) é que os coeficientes cinéticos, além de possibilitarem verificar a precisão dos cálculos numéricos através das relações de reciprocidade (4.17), determinam completamente os fluxos de interesse. O uso das relações de reciprocidade (4.17)

ainda permite reduzir o número de coeficientes cinéticos de nove para seis e, conseqüentemente, diminuir o número de coeficientes determinantes da solução do problema.

Nos próximos capítulos apresenta-se o método de solução utilizado para determinar os coeficientes cinéticos em cada regime de escoamento e os resultados obtidos.

CAPÍTULO 5

Solução nos regimes de moléculas livres e hidrodinâmico

Neste capítulo apresenta-se a metodologia utilizada na determinação dos coeficientes cinéticos nos regimes de moléculas livres e hidrodinâmico.

5.1 Solução no regime de moléculas livres

No regime de moléculas livres cada espécie de gás que constitui a mistura flui de forma independente de modo que a interação intermolecular é desprezível. Assim, fazendo $Q(f_\alpha f_\beta) = 0$ na Eq. (2.20) obtemos a seguinte equação diferencial

$$v_{\alpha x} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x'} + v_{\alpha y} \frac{\partial f_\alpha}{\partial y'} + v_{\alpha z} \frac{\partial f_\alpha}{\partial z'} = 0. \quad (5.1)$$

Como as forças termodinâmicas dadas na Eq. (3.1) são pequenas, podemos linearizar a Eq. (5.1) escrevendo a função de distribuição f_α do seguinte modo:

$$f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}_\alpha) = f_\alpha^0(x', \mathbf{v}_\alpha)[1 + h_\alpha(y', z', \mathbf{v}_\alpha)], \quad |h_\alpha| \ll 1, \quad (5.2)$$

onde

$$f_\alpha^0(x', \mathbf{v}_\alpha) = n_\alpha(x') \left[\frac{m_\alpha}{2\pi kT(x')} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{m_\alpha \mathbf{v}_\alpha^2}{2kT(x')} \right] \quad (5.3)$$

é a Maxwelliana local e h_α é chamada de função de perturbação.

Substituindo a Eq. (5.2) na Eq. (5.1)¹ e introduzindo a velocidade adimensional do α -ésimo constituinte da mistura

$$\mathbf{c}_\alpha = \left(\frac{m_\alpha}{2kT_0} \right)^{1/2} \mathbf{v}_\alpha, \quad (5.4)$$

e as coordenadas espaciais adimensionais

$$x = \frac{x'}{R}, \quad y = \frac{y'}{R}, \quad z = \frac{z'}{R}, \quad (5.5)$$

¹O termo $\partial f_\alpha / \partial t$ que aparece na Eq. (5.1) foi omitido pois não há dependência temporal

obtemos a seguinte equação:

$$c_{\alpha y} \frac{\partial h_\alpha}{\partial y} + c_{\alpha z} \frac{\partial h_\alpha}{\partial z} = -c_{\alpha x} \left[X_P + \eta_\alpha X_C + \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) X_T \right], \quad (5.6)$$

onde

$$\eta_1 = 1, \quad \eta_2 = -\frac{C_0}{(1 - C_0)}, \quad (5.7)$$

e as quantidades X_P , X_C e X_T denotam, respectivamente, os gradientes longitudinais de pressão, concentração e temperatura definidos na Eq. (3.1). O termo do lado direito da Eq. (5.6) é chamado de termo livre.

A Eq. (5.6) pode ser resolvida analiticamente. Para isso é mais conveniente transformar as coordenadas cartesianas de posição (x, y, z) e de velocidade $(c_{\alpha x}, c_{\alpha y}, c_{\alpha z})$ em coordenadas cilíndricas de posição (x, r, φ) e velocidade $(c_{\alpha r}, c_{\alpha \varphi}, \theta)$. A Figura 5.1 mostra as coordenadas para uma partícula situada num ponto P no plano yz .

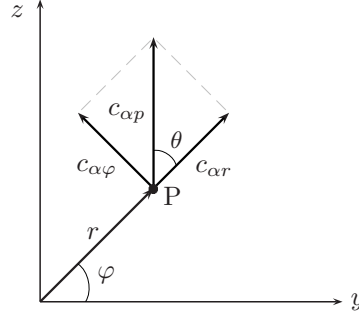


Figura 5.1: Coordenadas para uma partícula num ponto P no plano yz

Com o auxílio dessa figura podemos observar que:

$$r = \sqrt{y^2 + z^2}, \quad (5.8)$$

$$c_{\alpha r} = c_{\alpha \varphi} \cos \theta, \quad c_{\alpha \varphi} = c_{\alpha r} \sin \theta \quad (5.9)$$

$$c_{\alpha \varphi} = \sqrt{c_{\alpha r}^2 + c_{\alpha \varphi}^2}, \quad \theta = \arctan (c_{\alpha \varphi} / c_{\alpha r}). \quad (5.10)$$

As relações entre as coordenadas cartesianas e cilíndricas são as seguintes:

$$y = r \cos \varphi, \quad z = r \sin \varphi, \quad (5.11)$$

$$c_{\alpha y} = c_{\alpha r} \cos \varphi - c_{\alpha \varphi} \sin \varphi, \quad c_{\alpha z} = c_{\alpha r} \sin \varphi + c_{\alpha \varphi} \cos \varphi. \quad (5.12)$$

Assim, utilizando as coordenadas cilíndricas esquematizadas na Figura 5.1 e as relações (5.11) e (5.12), a Eq. (5.6) é reescrita da seguinte forma:

$$c_{\alpha r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial r} + \frac{c_{\alpha \varphi}}{r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial \varphi} + \frac{c_{\alpha \varphi}^2}{r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial c_{\alpha r}} - \frac{c_{\alpha r} c_{\alpha \varphi}}{r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial c_{\alpha \varphi}} = -c_{\alpha x} \left[X_P + \eta_\alpha X_C + \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) X_T \right]. \quad (5.13)$$

Os dois últimos termos do lado esquerdo da Eq. (5.13) podem ser reescritos como:

$$\begin{aligned} \frac{c_{\alpha\varphi}}{r} \left(c_{\alpha\varphi} \frac{\partial h_\alpha}{\partial c_{\alpha r}} - c_{\alpha r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial c_{\alpha\varphi}} \right) &= \frac{c_{\alpha\varphi}}{r} \left[c_{\alpha\varphi} \left(\frac{\partial h_\alpha}{\partial c_{\alpha p}} \frac{\partial c_{\alpha p}}{\partial c_{\alpha r}} + \frac{\partial h_\alpha}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial c_{\alpha r}} \right) \right. \\ &\quad \left. - c_{\alpha r} \left(\frac{\partial h_\alpha}{\partial c_{\alpha p}} \frac{\partial c_{\alpha p}}{\partial c_{\alpha\varphi}} + \frac{\partial h_\alpha}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial c_{\alpha\varphi}} \right) \right] = -\frac{c_{\alpha\varphi}}{r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial \theta}, \end{aligned} \quad (5.14)$$

onde

$$\frac{\partial c_{\alpha p}}{\partial c_{\alpha r}} = \cos \theta, \quad \frac{\partial c_{\alpha p}}{\partial c_{\alpha\varphi}} = \sin \theta, \quad \frac{\partial \theta}{\partial c_{\alpha r}} = -\frac{\sin \theta}{c_{\alpha p}}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial c_{\alpha\varphi}} = \frac{\cos \theta}{c_{\alpha p}}. \quad (5.15)$$

Uma consequência da simetria axial do problema é que podemos eliminar a variável φ na Eq. (5.13) já que para uma partícula da espécie α situada num ponto de coordenada radial r temos que $\partial h_\alpha / \partial \varphi = 0$.

Portanto, como o termo proporcional a $\partial h_\alpha / \partial \varphi$ na Eq. (5.13) é nulo e, utilizando a Eq. (5.14), podemos reescrever a Eq. (5.13) do seguinte modo:

$$c_{\alpha r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial r} - \frac{c_{\alpha\varphi}}{r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial \theta} = -c_{\alpha x} \left[X_p + \eta_\alpha X_c + \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) X_T \right]. \quad (5.16)$$

Como a Eq. (5.16) é uma equação linear podemos dividir a sua solução em três partes independentes, ou seja,

$$h_\alpha = h_\alpha^{(p)} X_p + h_\alpha^{(c)} X_c + h_\alpha^{(T)} X_T, \quad (5.17)$$

e, consequentemente, obtemos as três equações diferenciais a seguir:

$$c_{\alpha r} \frac{\partial h_\alpha^{(p)}}{\partial r} - c_{\alpha\varphi} \frac{\partial h_\alpha^{(p)}}{\partial \theta} = -c_{\alpha x}, \quad (5.18)$$

$$c_{\alpha r} \frac{\partial h_\alpha^{(c)}}{\partial r} - c_{\alpha\varphi} \frac{\partial h_\alpha^{(c)}}{\partial \theta} = -\eta_\alpha c_{\alpha x}, \quad (5.19)$$

$$c_{\alpha r} \frac{\partial h_\alpha^{(T)}}{\partial r} - c_{\alpha\varphi} \frac{\partial h_\alpha^{(T)}}{\partial \theta} = -c_{\alpha x} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right). \quad (5.20)$$

Como assumimos que as partículas que incidem na parede são refletidas de forma difusa, a seguinte condição de contorno deve ser satisfeita:

$$h_\alpha^{(i)}(r, c_{\alpha x}, c_{\alpha p}, \theta) = 0 \quad \text{em} \quad r = 1 \quad \text{e} \quad \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi, \quad (5.21)$$

onde convencionou-se que o movimento das partículas na direção parede \rightarrow centro ocorre para $\pi/2 \leq \theta \leq \pi$ e na direção centro \rightarrow parede para $0 \leq \theta \leq \pi/2$.

Assim, resolvendo as Eqs. (5.18)-(5.20) com a condição de contorno de reflexão difusa (5.21) obtemos as seguintes soluções:

$$h_\alpha^{(p)} = \frac{c_{\alpha x}}{c_{\alpha p}} \left(-r \cos \theta - \sqrt{1 - r^2 \sin^2 \theta} \right), \quad (5.22)$$

$$h_\alpha^{(c)} = \eta_\alpha h_\alpha^{(p)}, \quad (5.23)$$

$$h_\alpha^{(T)} = \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) h_\alpha^{(P)}. \quad (5.24)$$

Para determinar os coeficientes cinéticos Λ_{ij} ($i, j = P, C, T$), definidos nas Eqs. (4.14)-(4.16), precisamos determinar as quantidades $u_{\alpha x}^{(i)}$ e $q_{\alpha x}^{(i)}$. Utilizando as definições dadas nas Eqs. (2.10) e (2.15), as adimensionalizações dadas na Eq. (4.13) e as soluções dadas nas Eqs. (5.22)-(5.24) obtemos:

$$u_\alpha^{(P)} = - \left(\frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} \frac{E(r^2)}{\sqrt{\pi}}, \quad u_\alpha^{(T)} = -\frac{1}{2} u_\alpha^{(P)}, \quad u_\alpha^{(C)} = \eta_\alpha u_\alpha^{(P)}, \quad (5.25)$$

$$q_\alpha^{(P)} = u_\alpha^{(T)}, \quad q_\alpha^{(T)} = \frac{9}{4} u_\alpha^{(P)}, \quad q_\alpha^{(C)} = \eta_\alpha u_\alpha^{(T)}, \quad (5.26)$$

onde $E(r)$ é uma integral elíptica de segunda ordem definida como

$$E(r) = \int_0^{\pi/2} (1 - r \sin^2 \theta)^{1/2} d\theta. \quad (5.27)$$

A seguir, utilizando as Eqs. (5.25) e (5.26) nas definições (4.14)-(4.16) obtemos as seguintes expressões para os coeficientes cinéticos no regime de moléculas livres:

$$\Lambda_{PP} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left[C_0 \left(\frac{m}{m_1} \right)^{1/2} + (1 - C_0) \left(\frac{m}{m_2} \right)^{1/2} \right], \quad (5.28)$$

$$\Lambda_{TT} = \frac{9}{4} \Lambda_{PP}, \quad (5.29)$$

$$\Lambda_{CC} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} C_0 \left[\left(\frac{m}{m_1} \right)^{1/2} + \frac{C_0}{(1 - C_0)} \left(\frac{m}{m_2} \right)^{1/2} \right], \quad (5.30)$$

$$\Lambda_{PT} = \Lambda_{TP} = -\frac{1}{2} \Lambda_{PP}, \quad (5.31)$$

$$\Lambda_{PC} = \Lambda_{CP} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} C_0 \left[\left(\frac{m}{m_1} \right)^{1/2} - \left(\frac{m}{m_2} \right)^{1/2} \right], \quad (5.32)$$

$$\Lambda_{TC} = \Lambda_{CT} = -\frac{1}{2} \Lambda_{PC}. \quad (5.33)$$

Portanto, no regime de moléculas livres os coeficientes cinéticos dependem somente da concentração e da massa das espécies que constituem a mistura. Os resultados obtidos via Eqs. (5.28)-(5.33) para as misturas Neônio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio para alguns valores de concentração C_0 são mostrados no Capítulo 7.

5.2 Solução no regime hidrodinâmico

No regime hidrodinâmico, de acordo com a seção 2.4, as equações da Mecânica dos Meios Contínuos podem ser aplicadas na solução dos problemas de Dinâmica dos Gases Rarificados. Quando isso é feito costuma-se resolver a equação de Navier-Stokes assumindo-se a

condição de não deslizamento do gás na superfície sólida, ou seja, a velocidade tangencial do gás na superfície sólida é assumida como zero. Essa condição é válida somente quando o número de Knudsen é pequeno o suficiente para que a rarefação do gás possa ser desprezada.

Quando o número de Knudsen for moderadamente pequeno, a rarefação não pode ser desprezada pois, caso contrário, alguns fenômenos tais como o *creep* térmico, não serão descritos de forma correta. Para evitar a solução da equação de Boltzmann e continuar usando Navier-Stokes é necessário utilizar a condição de contorno de deslizamento da velocidade na superfície sólida dada na Eq. (2.32).

De acordo com a Ref. [112] a equação de Navier-Stokes é escrita da seguinte forma:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}'}{Dt} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u}' + \frac{1}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}') + \rho \mathbf{g}, \quad (5.34)$$

onde \mathbf{u}' denota a velocidade hidrodinâmica da mistura (na forma dimensional), P é a pressão da mistura, μ é a viscosidade da mistura, \mathbf{g} denota a aceleração gravitacional e

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

é chamada de derivada material ou substancial. No presente trabalho a derivada material é nula pois consideramos um fluxo estável ($\partial \mathbf{u}' / \partial t = 0$) e desprezamos os termos de segunda ordem para a velocidade da mistura ($(\mathbf{u}' \cdot \nabla) \mathbf{u}'$).

Como a densidade ρ é expressa em termos da distribuição de Boltzmann, analisando os termos proporcionais à aceleração gravitacional e ao divergente da velocidade observamos que a ordem de grandeza desses termos é pequena e, conseqüentemente, esses termos podem ser desprezados.

A pressão da mistura gasosa é constante em cada seção transversal do tubo, ou seja, $\partial P / \partial y' = \partial P / \partial z' = 0$.

Consideramos o fluxo gasoso completamente desenvolvido na direção longitudinal x' e uma característica importante das condições hidrodinâmicas na região completamente desenvolvida é que tanto as componentes transversais da velocidade \mathbf{u}' quanto o gradiente da velocidade axial são nulos em qualquer posição, ou seja,

$$u'_y = u'_z = 0, \quad \text{e} \quad \frac{\partial u'_x}{\partial x'} = 0 \rightarrow u'_x = u_x(y', z').$$

Desse modo a Eq. (5.34) é reescrita do seguinte modo:

$$\frac{\partial^2 u'_x}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2 u'_x}{\partial z'^2} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x'}.$$

Utilizando as adimensionalizações dadas na Eq. (5.5) e transformando as coordenadas cartesianas em cilíndricas obtemos a seguinte equação:

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{du'_x}{dr} \right) = \frac{PR}{\mu} r X_p, \quad (5.35)$$

onde X_p denota o gradiente de pressão definido na Eq. (3.1) e R denota o raio do tubo.

Resolvendo a Eq. (5.35) com a condição de contorno dada na Eq. (2.32) obtemos

$$u'_x = -\frac{PR}{4\mu} \left(1 - r^2 + 2 \frac{\sigma_p}{\delta} \right) X_p + \frac{\mu}{\rho R} (\sigma_c X_c + \sigma_T X_T), \quad (5.36)$$

onde δ é parâmetro de rarefação da mistura cuja definição é dada na Eq. (2.4), ρ é a densidade de massa da mistura. As quantidades adimensionais σ_p , σ_c e σ_T denotam, respectivamente, os coeficientes de deslizamento viscoso, difuso e térmico.

A solução da equação de Navier-Stokes possibilita calcular o fluxo da massa, enquanto que os fluxos de calor e difusão podem ser calculados via leis de Fourier e Fick. De acordo com a Ref. [68], a aproximação de primeira ordem de Chapman-Enskog fornece

$$q^* = -\kappa \frac{T_0}{R} X_T + P_0 C_0 (1 - C_0) \alpha_T (u'_1 - u'_2), \quad (5.37)$$

$$u'_{1x} - u'_{2x} = -\frac{D_{12}}{R} \left[\frac{m_2 - m_1}{m} X_P + \alpha_T X_T + \frac{1}{(1 - C_0)} X_C \right], \quad (5.38)$$

onde μ , κ , D_{12} e α_T são, respectivamente, os coeficientes de viscosidade, condutividade térmica, difusão e termo-difusão da mistura. As expressões para esses coeficientes de transporte podem ser encontradas nas Refs. [68, 70].

As equações (5.37) e (5.38) são incompletas porque existem termos de ordem $1/\delta$ que aparecem na aproximação de ordem $1/\delta^2$ de Chapman-Enskog [7]. Assim, se utilizarmos as equações (5.37) e (5.38) a fim de obter os coeficientes cinéticos Λ_{CP} e Λ_{TP} não teremos a relação de reciprocidade (4.3) satisfeita. Porém, a equação (5.36) contém todos os termos de ordem $1/\delta$ e através dela podemos calcular os coeficientes cinéticos Λ_{PT} e Λ_{CP} e através da relação de reciprocidade (4.3) calcular Λ_{TP} e Λ_{PC} .

A relação entre a velocidade hidrodinâmica da mistura, u'_x , e as velocidades das espécies constituintes da mistura é dada na Eq. (2.8). Na forma adimensional essa relação é escrita do seguinte modo:

$$u_x = C_0 \frac{m_1}{m} u_{1x} + (1 - C_0) \frac{m_2}{m} u_{2x}, \quad (5.39)$$

onde as velocidades adimensionais são definidas como

$$u_{\alpha x} = \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2} u'_{\alpha x}, \quad u_x = \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2} u'_x. \quad (5.40)$$

Adimensionalizando as Eqs. (5.36) e (5.38) e utilizando a relação (5.39) obtemos o seguinte sistema de equações para as velocidades das espécies constituintes da mistura:

$$\begin{cases} C_0 \frac{m_1}{m} u_{1x} + (1 - C_0) \frac{m_2}{m} u_{2x} = -\frac{\delta}{4} \left(1 - r^2 + 2 \frac{\sigma_P}{\delta} \right) X_P + \frac{\sigma_T}{2\delta} X_T + \frac{\sigma_C}{2\delta} X_C \\ u_{1x} - u_{2x} = -\frac{D_{12}}{R} \left(\frac{m}{2kT_0} \right)^{1/2} \left[\frac{m_2 - m_1}{m} X_P + \alpha_T X_T + \frac{1}{(1 - C_0)} X_C \right] \end{cases} \quad (5.41)$$

Novamente podemos utilizar a relação linear:

$$u_{\alpha x} = u_{\alpha x}^{(P)} X_P + u_{\alpha x}^{(C)} X_C + u_{\alpha x}^{(T)} X_T. \quad (5.42)$$

A resolução do sistema (5.41) permite encontrarmos expressões para as velocidades $u_{\alpha x}^{(P)}$, $u_{\alpha x}^{(C)}$ e $u_{\alpha x}^{(T)}$ e, a seguir, substituindo essas expressões nas Eqs. (4.14) e (4.16) encontramos as seguintes expressões para os coeficientes cinéticos:

$$\Lambda_{PP} = \frac{\delta}{4} + \sigma_P, \quad (5.43)$$

$$\Lambda_{cc} = \frac{C_0 \rho D_{12}}{(1 - C_0) \mu} \frac{1}{\delta}, \quad (5.44)$$

$$\Lambda_{pc} = \Lambda_{cp} = \left[C_0 \frac{(m_2 - m_1)}{m} \frac{\rho D_{12}}{\mu} - \sigma_c \right] \frac{1}{\delta}, \quad (5.45)$$

$$\Lambda_{pt} = \Lambda_{tp} = \left[C_0 (1 - C_0) \frac{(m_2 - m_1)}{m} \frac{\rho \alpha_T D_{12}}{\mu} - \sigma_T \right] \frac{1}{\delta}, \quad (5.46)$$

$$\Lambda_{tc} = \Lambda_{ct} = C_0 \frac{\rho \alpha_T D_{12}}{\mu} \frac{1}{\delta}. \quad (5.47)$$

O coeficiente Λ_{TT} é obtido diretamente da equação de Fourier (5.37) pois esse coeficiente está relacionado ao fluxo ordinário de calor e os termos de ordem $(1/\delta)$ que aparecem na aproximação de segunda ordem de Chapman-Enskog não são proporcionais ao gradiente de temperatura. Assim, substituindo a Eq. (5.37) em (4.15) para $i = T$ obtemos a seguinte expressão:

$$\Lambda_{TT} = \frac{\rho}{\mu} \left[\kappa \frac{T_0}{P_0} + C_0 (1 - C_0) \alpha_T^2 D_{12} \right] \frac{1}{\delta}, \quad (5.48)$$

Para determinar numericamente os coeficientes cinéticos dados nas Eqs. (5.43)-(5.48) precisamos conhecer os valores dos coeficientes de deslizamento viscoso σ_p , difuso σ_c e térmico σ_T para as misturas consideradas neste trabalho. Esses coeficientes são determinados numericamente no presente trabalho em função da concentração das misturas consideradas. A seguir, apresenta-se a metodologia utilizada para calcular os coeficientes de deslizamento e no Capítulo 7 os resultados obtidos são apresentados e analisados.

Os resultados obtidos via Eqs. (5.43)-(5.48) para os coeficientes cinéticos também são apresentados e analisados no Capítulo 7.

5.2.1 Cálculo dos coeficientes de deslizamento

Como apresentado no Capítulo 2, o fenômeno de deslizamento viscoso está associado à presença de um gradiente de velocidade normal à superfície sólida e os fenômenos de deslizamento difuso e térmico estão associados, respectivamente, à presença de gradientes de concentração e temperatura longitudinais à superfície sólida. Para calcular os coeficientes de deslizamento viscoso σ_p , térmico σ_T e difuso σ_c consideramos um fluxo estacionário de mistura binária de gases no espaço semi-infinito $x' \geq 0$ sobre uma superfície sólida fixa em $x' = 0$ como ilustrado na Figura 5.2.

Assumimos que a superfície sólida da Figura 5.2 possui largura e comprimento grandes e, conseqüentemente, os efeitos de borda podem ser desprezados.

A pressão da mistura é assumida como sendo constante e igual ao valor no estado de equilíbrio P_0 .

Na direção longitudinal (direção de y') existe um gradiente de temperatura ξ_T e também um gradiente de concentração ξ_c . Conseqüentemente, a temperatura e a concentração da mistura dependem linearmente da coordenada y' , ou seja,

$$T(y') = T_0 \left(1 + \frac{y'}{\ell_0} \xi_T \right), \quad \xi_T = \ell_0 \frac{\partial \ln T}{\partial y'} \ll 1, \quad (5.49)$$

$$C(y') = C_0 \left(1 + \frac{y'}{\ell_0} \xi_c \right), \quad \xi_c = \ell_0 \frac{\partial \ln C}{\partial y'} \ll 1. \quad (5.50)$$

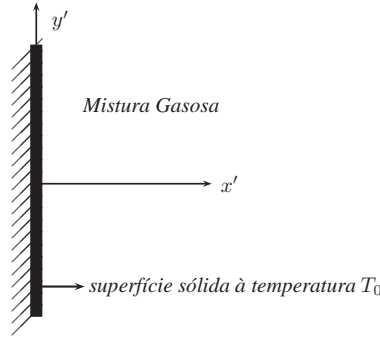


Figura 5.2: Esquema para cálculo dos coeficientes de deslizamento

Por questão de conveniência introduzimos as coordenadas adimensionais

$$x = \frac{x'}{\ell_0}, \quad y = \frac{y'}{\ell_0}, \quad (5.51)$$

onde ℓ_0 é uma quantidade da ordem do livre caminho médio entre as partículas, definida como

$$\ell_0 = \frac{\mu_0 v_0}{P_0}. \quad (5.52)$$

μ_0 denota a viscosidade da mistura no estado de equilíbrio caracterizado pela temperatura T_0 , pressão P_0 e concentração C_0 , e a quantidade

$$v_0 = \left(\frac{2kT_0}{m} \right)^{1/2} \quad (5.53)$$

é a velocidade característica da mistura. Também introduzimos as velocidades adimensionais

$$\mathbf{c}_\alpha = \left(\frac{m_\alpha}{2kT_0} \right)^{1/2} \mathbf{v}_\alpha, \quad u_y(x) = \frac{u_y(x')}{v_0}. \quad (5.54)$$

Como o fluxo é completamente desenvolvido na direção y , a velocidade da mistura possui somente a componente longitudinal denotada por $u_y(x)$. Distante da superfície sólida assumimos que a velocidade $u_y(x)$ depende linearmente da coordenada x , ou seja,

$$\lim_{x \rightarrow \infty} u_y(x) = x\xi_u, \quad (5.55)$$

onde $\xi_u \ll 1$ denota um pequeno gradiente de velocidade normal à superfície sólida.

É importante notar que $x \rightarrow \infty$ significa que $x' \gg \ell_0$ e, portanto, a velocidade u_y satisfaz a Eq. (5.55) fora da camada de Knudsen (camada cuja espessura é da ordem do livre caminho médio ℓ_0). Do ponto de vista macroscópico ou hidrodinâmico, a condição de contorno de deslizamento dada na Eq. (2.32) é válida em $x' = 0$. Como do ponto de vista macroscópico a camada de Knudsen é desprezível, a velocidade hidrodinâmica na superfície é assumida como sendo igual à velocidade fora da camada de Knudsen. Porém, do ponto de vista cinético a camada de Knudsen não pode ser desprezada pois possui espessura considerável. Consequentemente, no nível cinético a Eq. (2.32) corresponde ao comportamento assintótico da velocidade distante da superfície sólida.

Portanto, para considerar o efeito de deslizamento a Eq. (5.55) deve ser reescrita com o auxílio da condição de contorno (2.32) no nível cinético do seguinte modo:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} u_y(x) = (\sigma_p + x)\xi_u + \frac{\sigma_T}{2}\xi_T + \frac{\sigma_c}{2}\xi_c. \quad (5.56)$$

Para calcular os coeficientes de deslizamento viscoso σ_p , térmico σ_T e difuso σ_c precisamos conhecer o perfil de velocidade $u_y(x)$ na camada de Knudsen e esse perfil é determinado através da solução da equação cinética na camada de Knudsen. Conhecendo o perfil da velocidade $u_y(x)$ na camada de Knudsen os coeficientes de deslizamento são determinados via Eq. (5.56).

A seguir apresenta-se o método utilizado para resolver a equação cinética a fim de determinar o perfil da velocidade hidrodinâmica $u_y(x)$ para posterior cálculo dos coeficientes de deslizamento.

5.2.2 Equações de entrada

O primeiro passo para resolver a equação cinética consiste em linearizá-la. Como assumimos que os gradientes de velocidade ξ_u , temperatura ξ_T e concentração ξ_c são pequenos, ou seja, consideramos que o estado da mistura gasosa foi fracamente desequilibrado, podemos escrever a função de distribuição de cada constituinte da mistura do seguinte modo:

$$f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{c}) = f_\alpha^M(x, y, \mathbf{c})[1 + h_\alpha(x, \mathbf{c})], \quad |h_\alpha| \ll 1, \quad \alpha = 1, 2, \quad (5.57)$$

onde

$$f_\alpha^M(x, y, \mathbf{c}) = n_\alpha(y) \left[\frac{m_\alpha}{2\pi kT(y)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{c_{\alpha x}^2 + [c_{\alpha y}^2 - (m_\alpha/m)^{1/2} x \xi_u]^2 + c_{\alpha z}^2}{T(y)/T_0} \right\}, \quad (5.58)$$

é a função Maxwelliana local correspondente ao estado da mistura distante da superfície sólida.

Substituindo a Eq. (5.57) em (2.20) e utilizando as quantidades adimensionais dadas nas Eqs. (5.51) e (5.54) obtemos a seguinte equação:

$$c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha}{\partial x} = \frac{\mu}{P_0} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^2 \hat{L}_{\alpha\beta} h_\alpha - c_{\alpha y} \left[2 \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} c_{\alpha x} \xi_u + \eta_\alpha \xi_c + \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) \xi_T \right] \quad (5.59)$$

onde η_α ($\alpha = 1, 2$) é dado na Eq. (5.7).

$\hat{L}_{\alpha\beta}$ denota a integral de colisões entre as espécies α e β na forma linearizada. No presente trabalho utilizamos o modelo de McCormack [39] para a integral de colisões cuja expressão é dada no Apêndice A.

Como a Eq. (5.59) é linear podemos escrever sua solução como uma combinação linear, ou seja:

$$h_\alpha = h_\alpha^{(u)} \xi_u + h_\alpha^{(c)} X_c + h_\alpha^{(T)} X_T, \quad (5.60)$$

e, conseqüentemente, os momentos que aparecem na integral de colisões também são escritos como combinações lineares tal que

$$u_\alpha(x) = u_\alpha^{(u)} \xi_u + u_\alpha^{(c)} \xi_c + u_\alpha^{(T)} \xi_T, \quad (5.61)$$

$$q_\alpha(x) = q_\alpha^{(u)}\xi_u + q_\alpha^{(C)}\xi_C + q_\alpha^{(T)}\xi_T, \quad (5.62)$$

$$\Pi_\alpha(x) = \Pi_\alpha^{(u)}\xi_u + \Pi_\alpha^{(C)}\xi_C + \Pi_\alpha^{(T)}\xi_T. \quad (5.63)$$

Desse modo, a Eq. (5.59) é dividida em três equações independentes, ou seja:

$$c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha^{(u)}}{\partial x} = \frac{\mu}{P_0} \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^2 \hat{L}_{\alpha\beta} h_\alpha^{(u)} - 2 \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} c_{\alpha x} c_{\alpha y}, \quad (5.64)$$

$$c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha^{(C)}}{\partial x} = \frac{\mu}{P_0} \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^2 \hat{L}_{\alpha\beta} h_\alpha^{(C)} - \eta_\alpha c_{\alpha y}, \quad (5.65)$$

$$c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha^{(T)}}{\partial x} = \frac{\mu}{P_0} \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^2 \hat{L}_{\alpha\beta} h_\alpha^{(T)} - \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2}\right) c_{\alpha y}, \quad (5.66)$$

As Eqs. (5.64)-(5.66) são resolvidas utilizando-se as seguintes condições de contorno:

- (i) Como assumimos que as partículas gasosas são refletidas de forma difusa, para $x = 0$ e $c_{\alpha x} \geq 0$ condição de contorno de reflexão difusa (dada na seção 2.3) é escrita da seguinte forma:

$$h_\alpha^{(n)}(x, \mathbf{c}_\alpha) = 0, \quad \text{em} \quad x = 0, \quad \alpha = 1, 2, \quad n = u, C, T. \quad (5.67)$$

- (ii) Para $x \rightarrow \infty$ e $c_{\alpha x} < 0$ as soluções das Eqs. (5.64)-(5.66) foram obtidas via método de Chapman-Enskog. Portanto, para $x \rightarrow \infty$ temos que:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} h_\alpha^{(n)}(x, \mathbf{c}_\alpha) = h_{\alpha\text{C.E.}}^{(n)}, \quad \alpha = 1, 2, \quad n = u, C, T, \quad (5.68)$$

onde

$$h_{\alpha\text{C.E.}}^{(u)} = 2c_{\alpha y} \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} u_\alpha + 4c_{\alpha x} c_{\alpha y} [(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)})\Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)}\Pi_\beta] - \frac{2}{\mathcal{A}_\alpha} \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} c_{\alpha x} c_{\alpha y}, \quad (5.69)$$

$$h_{\alpha\text{C.E.}}^{(C)} = \mathcal{H}_\alpha^{(C)} - \frac{\eta_\alpha}{\mathcal{A}_\alpha} c_{\alpha y}, \quad (5.70)$$

$$h_{\alpha\text{C.E.}}^{(T)} = \mathcal{H}_\alpha^{(T)} - \frac{1}{\mathcal{A}_\alpha} c_{\alpha y} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2}\right), \quad (5.71)$$

onde

$$\mathcal{A}_\alpha = \frac{\mu}{P_0} \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} \gamma_\alpha, \quad (5.72)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\alpha = & 2c_{\alpha y} \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} \left[u_\alpha^{(n)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)}(u_\alpha^{(n)} - u_\beta^{(n)}) - \frac{1}{2}\nu_{\alpha\beta}^{*(2)} \left(q_\alpha^{(n)} - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta^{(n)} \right) \right] \\ & + \frac{4}{5} c_{\alpha y} \left(\frac{m_\alpha}{m}\right)^{1/2} \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)}) q_\alpha^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha}\right)^{1/2} q_\beta^{(n)} \right. \\ & \left. - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)}(u_\alpha^{(n)} - u_\beta^{(n)}) \right] \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2}\right) \quad n = u, C, T. \end{aligned} \quad (5.73)$$

Consideramos que as partículas incidentes na superfície sólida possuem velocidade $c_{\alpha x}$ negativa enquanto que as partículas refletidas da superfície sólida possuem velocidade $c_{\alpha x}$ positiva.

Na integral de colisões $\hat{L}_{\alpha\beta}h_\alpha$ (cuja expressão é dada no Apêndice A) que aparece nas Eqs. (5.64)-(5.66) existe uma quantidade denotada por $\nu_{\alpha\beta}^{(i)}$ ($i = 1, 2, \dots, 6$) que possui a mesma dimensão de γ_α e, visando adimensionalizá-la, introduzimos a quantidade adimensional

$$\nu_{\alpha\beta}^{*(i)} = \frac{\nu_{\alpha\beta}^{(i)}}{\gamma_\alpha}. \quad (5.74)$$

O parâmetro γ_α , cuja expressão é dada no Apêndice A, é proporcional à frequência das colisões entre as partículas. Temos liberdade na escolha desse parâmetro pois os coeficientes de transporte não dependem desse parâmetro. Na Ref. [8] é mostrado que na solução da equação cinética para um gás único via modelo de Shakov o parâmetro γ é escolhido como a razão entre a pressão e a viscosidade do gás, e também é mostrado que esse modelo fornece resultados confiáveis. Como no limite para um gás único o modelo de McCormack tende ao modelo de Shakov, escolhemos o parâmetro γ_α do mesmo modo, ou seja

$$\gamma_\alpha = \frac{P_\alpha}{\mu_\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \quad (5.75)$$

onde P_α e μ_α denotam, respectivamente, a pressão e a viscosidade parciais da mistura. A expressão para a viscosidade parcial μ_α pode ser encontrada na Ref. [30].

A seguir mostra-se como as equações foram discretizadas no espaço físico e no espaço das velocidades e o esquema numérico utilizado para resolvê-las.

5.2.3 Discretização das equações e solução numérica

Como o fluxo é unidimensional e completamente desenvolvido na direção y , podemos eliminar as componentes $c_{\alpha y}$ e $c_{\alpha z}$ da velocidade \mathbf{c}_α através da introdução das seguintes funções:

$$\Phi_\alpha^{(n)}(x, c_{\alpha x}) = \frac{1}{\pi} \int \int c_{\alpha y} h_\alpha^{(n)}(x, \mathbf{c}_\alpha) \exp(-c_{\alpha y}^2 - c_{\alpha z}^2) dc_{\alpha y} dc_{\alpha z}, \quad (5.76)$$

$$\Psi_\alpha^{(n)}(x, c_{\alpha x}) = \frac{1}{\pi} \int \int c_{\alpha y} (c_{\alpha y}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2) h_\alpha^{(n)}(x, \mathbf{c}_\alpha) \exp(-c_{\alpha y}^2 - c_{\alpha z}^2) dc_{\alpha y} dc_{\alpha z}. \quad (5.77)$$

Assim, multiplicando a Eq. (5.59) por $c_{\alpha y} \exp(-c_{\alpha y}^2 - c_{\alpha z}^2)/\pi$ e integrando em relação a $c_{\alpha y}$ e $c_{\alpha z}$, a seguinte equação é obtida:

$$\begin{aligned} c_{\alpha x} \frac{\partial \Phi_\alpha^{(n)}}{\partial x} = & \mathcal{A}_\alpha \left\{ -\Phi_\alpha^{(n)} + \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[u_\alpha^{(n)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)} (u_\alpha^{(n)} - u_\beta^{(n)}) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} \left(q_\alpha^{(n)} - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta^{(n)} \right) \right] \right. \\ & + 2 \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)}) \Pi_\alpha^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)} \Pi_\beta^{(n)} \right] c_{\alpha x} + \frac{2}{5} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[\left(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} \right. \right. \\ & \left. \left. - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \right) q_\alpha^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_\beta^{(n)} - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_\alpha^{(n)} - u_\beta^{(n)}) \right] \left(c_{\alpha x}^2 - \frac{1}{2} \right) \left. \right\} \\ & - \mathcal{L}_\Phi^{(n)}, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad \alpha \neq \beta, \quad (5.78) \end{aligned}$$

onde γ_α denota a combinação entre as frequências de colisões das partículas e sua expressão é dada no Apêndice A.

Do mesmo modo, multiplicando a Eq. (5.59) por $c_{\alpha y}(c_{\alpha y}^2 + c_{\alpha z}^2 - 2) \exp(-c_{\alpha y}^2 - c_{\alpha z}^2)/\pi$ e integrando em $c_{\alpha y}$ e $c_{\alpha z}$ a seguinte equação para Ψ_α é obtida:

$$c_{\alpha x} \frac{\partial \Psi_\alpha^{(n)}}{\partial x} = \mathcal{A}_\alpha \left\{ -\Psi_\alpha^{(n)} + \frac{4}{5} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)}) q_\alpha^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_\beta^{(n)} - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_\alpha^{(n)} - u_\beta^{(n)}) \right] \right\} - \mathcal{L}_\Psi^{(n)}, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad \alpha \neq \beta. \quad (5.79)$$

\mathcal{A}_α é dado na Eq. (5.72), $\mathcal{L}_\Phi^{(n)}$ e $\mathcal{L}_\Psi^{(n)}$ denotam os seguintes termos livres:

$$\mathcal{L}_\Phi^{(u)} = \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} c_{\alpha x}, \quad \mathcal{L}_\Phi^{(C)} = \frac{1}{2} \eta_\alpha, \quad \mathcal{L}_\Phi^{(T)} = \frac{1}{2} \left(c_{\alpha x}^2 - \frac{1}{2} \right), \quad (5.80)$$

$$\mathcal{L}_\Psi^{(u)} = 0, \quad \mathcal{L}_\Psi^{(C)} = 0, \quad \mathcal{L}_\Psi^{(T)} = \mathcal{L}_\Phi^{(T)}. \quad (5.81)$$

Os momentos dados nas Eqs. (A.5)-(A.7) são reescritos em função de Φ_α e Ψ_α do seguinte modo:

$$u_\alpha^{(n)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} \int \Phi_\alpha^{(n)} \exp(-c_{\alpha x}) \, dc_{\alpha x}, \quad (5.82)$$

$$q_\alpha^{(n)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} \int \left[\Psi_\alpha^{(n)} + \left(c_{\alpha x}^2 - \frac{1}{2} \right) \Phi_\alpha^{(n)} \right] \exp(-c_{\alpha x}) \, dc_{\alpha x}, \quad (5.83)$$

$$\Pi_\alpha^{(n)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int c_{\alpha x} \Phi_\alpha^{(n)} \exp(-c_{\alpha x}) \, dc_{\alpha x}. \quad (5.84)$$

Para resolver as Eqs. (5.78) e (5.79) introduzimos uma malha regular para a variável x , ou seja

$$x_{k+1} = x_k + \Delta x, \quad 1 \leq k \leq N_x + 1, \quad x_1 = 0, \quad \Delta x = x_{max}/N_x, \quad (5.85)$$

onde N_x é um número inteiro e corresponde ao número de divisões utilizado na discretização da coordenada x .

Como consideramos o fluxo gasoso num espaço semi-infinito, x pode variar de zero até infinito. Para realizar os cálculos numéricos precisamos estabelecer um valor máximo para a coordenada x , ou seja, $0 \leq x \leq x_{max}$. Na camada de Knudsen a velocidade da mistura apresenta um perfil não linear devido aos gradientes de velocidade, temperatura e concentração mas fora da camada de Knudsen o perfil da velocidade da mistura é linear. Portanto, x_{max} corresponde à uma distância na qual o desvio de velocidade $u_\alpha^{(u)}$ e as velocidades $u_\alpha^{(C)}$ e $u_\alpha^{(T)}$ apresentam valores constantes no ponto $k = N_x$. No Capítulo 7 mostra-se que $x_{max} = 20$ é suficiente nos cálculos numéricos. Uma distância maior que $x = 20$ pode ser utilizada mas computacionalmente é desvantajoso.

No espaço de velocidades $c_{\alpha x}$ utilizamos o método de velocidades discretas [40]. Nesse método, as raízes de um polinômio de ordem N_c são escolhidas para definir um conjunto de velocidades $c_{\alpha x \ell}$ ($\ell = 1, 2, \dots, N_c$) para o α -ésimo constituinte da mistura e, de acordo com um método de Quadratura Gaussiana esses pontos $c_{\alpha x \ell}$ são simétricos no intervalo $(-\infty, +\infty)$.

Os momentos dados nas Eqs. (5.82)-(5.84) são aproximados pelas seguintes fórmulas de quadratura:

$$u_{\alpha k}^{(n)} = \left(\frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} \sum_{\ell=1}^{N_c} \Phi_\alpha^{(n)}(x_k, c_{\alpha x \ell}) \mathcal{W}_\ell, \quad (5.86)$$

$$q_{\alpha k}^{(n)} = \left(\frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} \sum_{\ell=1}^{N_c} \left[\Psi_\alpha^{(n)}(x_k, c_{\alpha x \ell}) + \left(c_{\alpha x \ell}^2 - \frac{1}{2} \right) \Phi_\alpha^{(n)}(x_k, c_{\alpha x \ell}) \right] \mathcal{W}_\ell, \quad (5.87)$$

$$\Pi_{\alpha k}^{(n)} = \sum_{\ell=1}^{N_c} c_{\alpha x \ell} \Phi_\alpha^{(n)}(x_k, c_{\alpha x \ell}) \mathcal{W}_\ell, \quad (5.88)$$

onde \mathcal{W}_ℓ são os pesos gaussianos correspondentes às abscissas gaussianas $c_{\alpha x \ell}$ e N_c denota o número de pontos de quadratura no espaço de velocidades.

As derivadas que aparecem nas Eqs. (5.78) e (5.79) são aproximadas através do método explícito de diferenças finitas de primeira ordem. Assim, discretizando a Eq. (5.78), a função $\Phi_\alpha^{(n)}$ é calculada do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \Phi_\alpha^{(n)}(x_{k+\epsilon}, c_{\alpha x \ell}) = & \left\{ \mathcal{A}_\alpha \left\{ \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[u_{\alpha k}^{(n)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)}(u_{\alpha k}^{(n)} - u_{\beta k}^{(n)}) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} \left(q_{\alpha k}^{(n)} - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_{\beta k}^{(n)} \right) \right] \right. \right. \\ & + 2[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)}) \Pi_{\alpha k}^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)} \Pi_{\beta k}^{(n)}] c_{\alpha x \ell} + \frac{2}{5} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} \right. \\ & \left. \left. + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)}) q_{\alpha k}^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_{\beta k}^{(n)} - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_{\alpha k}^{(n)} - u_{\beta k}^{(n)}) \right] \left(c_{\alpha x \ell}^2 - \frac{1}{2} \right) \right\} + \Phi_{\alpha k, \ell}^{(n)} \\ & \times \left(\frac{c_{\alpha x \ell}}{\epsilon \Delta x} - \mathcal{A}_\alpha \right) - \mathcal{L}_{\Phi_\ell}^{(n)} \left\} \left(\frac{c_{\alpha x \ell}}{\epsilon \Delta x} \right)^{-1}, \quad (5.89) \end{aligned}$$

onde $k = 1, \dots, N_x + 1$, $\ell = 1, \dots, N_c$ e $\epsilon = \text{sinal}(c_{\alpha x \ell})$.

Fazendo a discretização da Eq. (5.79) obtemos que:

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha^{(n)}(x_{k+\epsilon}, c_{\alpha x \ell}) = & \left\{ \frac{4}{5} \mathcal{A}_\alpha \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)}) q_{\alpha k}^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_{\beta k}^{(n)} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_{\alpha k}^{(n)} - u_{\beta k}^{(n)}) \right] + \Psi_{\alpha k, \ell} \left(\frac{c_{\alpha x \ell}}{\epsilon \Delta x} - \mathcal{A}_\alpha \right) - \mathcal{L}_{\Psi_\ell}^{(n)} \right\} \left(\frac{c_{\alpha x \ell}}{\epsilon \Delta x} \right)^{-1} \quad (5.90) \end{aligned}$$

Consideramos que as partículas que se movimentam na direção "parede $\rightarrow x_{max}$ " possuem velocidade $c_{\alpha x}$ positiva enquanto que as partículas que se movimentam na direção " $x_{max} \rightarrow$ parede" possuem velocidade $c_{\alpha x}$ negativa. Dessa forma, para cada valor de velocidade $c_{\alpha x}$ temos que considerar dois ciclos no espaço da coordenada x para resolver as Eqs. (5.89) e (5.90). Estes ciclos simulam, respectivamente, o movimento das partículas na direção "parede $\rightarrow x_{max}$ " e " $x_{max} \rightarrow$ parede". No primeiro ciclo o processo iterativo para a solução das Eqs. (5.89) e (5.90) é inicializado utilizando a condição de contorno dada na Eq. (5.67) reescrita da seguinte forma:

$$\Phi_\alpha^{(n)}(x_k, c_{\alpha x \ell}) = 0, \quad \Psi_\alpha^{(n)}(x_k, c_{\alpha x \ell}) = 0 \quad \text{para} \quad c_{\alpha x \ell} \geq 0 \quad \text{e} \quad x_k = 0. \quad (5.91)$$

No segundo ciclo o processo iterativo para a solução das Eqs. (5.89) e (5.90) é inicializado utilizando a solução de Chapman-Enskog para essas equações, ou seja,

$$\Phi_{\alpha}^{(n)}(x_k, c_{\alpha x_{\ell}}) = \Phi_{\alpha_{C,E}}^{(n)}, \quad \Psi_{\alpha}^{(n)}(x_k, c_{\alpha x_{\ell}}) = \Psi_{\alpha_{C,E}}^{(n)} \quad \text{para } c_{\alpha x_{\ell}} < 0 \quad \text{e } x_k = x_{max}. \quad (5.92)$$

O procedimento iterativo consiste em realizar, para cada valor de velocidade $c_{\alpha x}$, os seguintes passos:

- (i) Assume-se $u_{\alpha}^{(n)}$, $q_{\alpha}^{(n)}$ e $\Pi_{\alpha}^{(n)}$ e calcula-se $\Phi_{\alpha}^{(n)}$ e $\Psi_{\alpha}^{(n)}$ via Eqs. (5.89) e (5.90).
- (ii) Estima-se novos valores para os momentos $u_{\alpha}^{(n)}$, $q_{\alpha}^{(n)}$ e $\Pi_{\alpha}^{(n)}$ usando as Eqs. (5.86)-(5.88).
- (iii) Volta-se ao passo (i) e usa-se os valores dos momentos $u_{\alpha}^{(n)}$, $q_{\alpha}^{(n)}$ e $\Pi_{\alpha}^{(n)}$ obtidos na iteração anterior para calcular os novos valores das funções $\Phi_{\alpha}^{(n)}$ e $\Psi_{\alpha}^{(n)}$. O procedimento iterativo é terminado quando um critério de convergência é satisfeito.

O critério de convergência é expresso como:

$$\left| \frac{u_{k+1}^{(n)} - \tilde{u}_k^{(n)}}{\tilde{u}_k^{(n)}} \right| \leq \mathcal{E}, \quad (5.93)$$

onde \mathcal{E} denota um erro igual a 10^{-10} e $\tilde{u}_k^{(n)}$ denota o valor de $u_k^{(n)}$ na iteração anterior para a velocidade $c_{\alpha x}$.

Quando o procedimento iterativo é finalizado os coeficientes de deslizamento são calculados através da Eq. (5.56) como:

$$\sigma_P = \lim_{x \rightarrow \infty} u_y^{(u)}(x) = u_y^{(u)}(x_k) \Big|_{k=N_x}, \quad (5.94)$$

$$\sigma_C = 2 \lim_{x \rightarrow \infty} u_y^{(c)}(x) = 2u_y^{(c)}(x_k) \Big|_{k=N_x}, \quad (5.95)$$

$$\sigma_T = 2 \lim_{x \rightarrow \infty} u_y^{(t)}(x) = 2u_y^{(t)}(x_k) \Big|_{k=N_x}. \quad (5.96)$$

A precisão dos cálculos numéricos é 0.1% e é estimada via comparação dos resultados obtidos para diferentes valores dos parâmetros que caracterizam a malha utilizada. Essa precisão é atingida quando os parâmetros da malha possuem os seguintes valores: número de pontos no espaço de velocidades $N_c = 10$ e número de divisões no espaço físico $N_x = 20000$.

Os resultados obtidos para os coeficientes de deslizamento viscoso, difuso e térmico com a respectiva análise são apresentados no Capítulo 7.

CAPÍTULO 6

Solução no regime de transição

Como apresentado no Capítulo 2, no regime de transição não podemos desprezar a interação intermolecular como no regime de moléculas livres e também não podemos utilizar as equações da Mecânica dos Meios Contínuos como no regime hidrodinâmico. Por esse motivo o regime de transição é o regime que apresenta maior dificuldade no estudo dos fenômenos de transporte.

Para determinar os coeficientes cinéticos definidos nas Eqs. (4.14)-(4.16) precisamos dos momentos u_α e q_α , os quais são calculados numericamente via solução da equação cinética de McCormack [39].

A seguir mostra-se toda a metodologia utilizada para resolver a equação cinética de McCormack e determinar os coeficientes cinéticos nesse regime.

6.1 Equações de entrada

Assim como no capítulo anterior, o primeiro passo para resolver a equação cinética consiste em linearizá-la. Como assumimos que as forças termodinâmicas dadas na Eq. (3.1) são muito pequenas, de acordo com a Ref. [69] podemos linearizar a equação de Boltzmann para fluxos unidimensionais de um modo fixo no qual a função de distribuição é representada do seguinte modo:

$$f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_\alpha^0(x', \mathbf{v})[1 + h_\alpha(y', z', \mathbf{v})], \quad |h_\alpha| \ll 1, \quad (6.1)$$

onde

$$f_\alpha^0(x', \mathbf{v}) = n_\alpha(x') \left[\frac{m_\alpha}{2\pi kT(x')} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{m_\alpha \mathbf{v}_\alpha^2}{2kT(x')} \right] \quad (6.2)$$

é a Maxwelliana local e h_α é a função de perturbação.

Substituindo a Eq. (6.1) em (2.20), utilizando as quantidades adimensionais dadas nas Eqs. (5.4) e (5.5), e utilizando as coordenadas cilíndricas esquematizadas na Figura 5.1 obtemos a seguinte equação para o problema em questão:

$$c_{\alpha r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial r} - \frac{c_{\alpha\varphi}}{r} \frac{\partial h_\alpha}{\partial \theta} = R \left(\frac{m_\alpha}{2kT} \right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^2 \hat{L}_{\alpha\beta} h_\alpha - c_{\alpha x} \left[X_P + \eta_\alpha X_C + \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) X_T \right], \quad \alpha = 1, 2, \quad (6.3)$$

onde $c_{\alpha r}$ e $c_{\alpha\varphi}$ denotam, respectivamente, as componentes radial e azimutal da velocidade de uma partícula α e suas expressões são dadas na Eq. (5.9).

$\hat{L}_{\alpha\beta}$ denota a integral de colisões linearizada e a expressão de McCormack [39] para essa integral é dada no Apêndice A.

Para resolver a equação (6.3) utilizamos as seguintes condições de contorno:

- (i) Na superfície do tubo assumimos que as partículas são refletidas de forma difusa e, utilizando os conceitos sobre interação gás-superfície apresentados no Capítulo 2, essa condição é escrita do seguinte modo:

$$h_\alpha(r, c_{\alpha x}, c_{\alpha p}, \theta) = 0 \quad \text{em } r = 1 \quad \text{e} \quad \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi. \quad (6.4)$$

- (ii) Da simetria do problema podemos escrever a seguinte condição de contorno:

$$h_\alpha(r, c_{\alpha x}, c_{\alpha p}, \theta) = h_\alpha(r, c_{\alpha x}, c_{\alpha p}, \pi) \quad \text{em } r = 0 \quad \text{e} \quad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}. \quad (6.5)$$

A seguir apresenta-se a discretização das equações no espaço físico e no espaço de velocidades e o método numérico aplicado para resolvê-las.

6.2 Discretização das equações e solução numérica

Visando eliminar a variável $c_{\alpha x}$ introduzimos as seguintes funções:

$$\Theta_\alpha(r, c_{\alpha r}, c_{\alpha\varphi}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c_{\alpha x} h_\alpha(r, c_{\alpha x}, c_{\alpha p}, \theta) \exp(-c_{\alpha x}^2) dc_{\alpha x}, \quad (6.6)$$

$$\Xi_\alpha(r, c_{\alpha r}, c_{\alpha\varphi}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c_{\alpha x}^3 h_\alpha(r, c_{\alpha x}, c_{\alpha p}, \theta) \exp(-c_{\alpha x}^2) dc_{\alpha x}. \quad (6.7)$$

Para escrever todas as equações em função de Θ_α e Ξ_α , primeiramente multiplicamos a Eq. (6.3) por $c_{\alpha x} \exp(-c_{\alpha x}^2)/\sqrt{\pi}$ e integramos em relação a $c_{\alpha x}$ obtendo a seguinte equação:

$$\begin{aligned} c_{\alpha r} \frac{\partial \Theta_\alpha}{\partial r} - \frac{c_{\alpha\varphi}}{r} \frac{\partial \Theta_\alpha}{\partial \theta} = R \left(\frac{m_\alpha}{2kT} \right)^{1/2} \gamma_\alpha \left\{ -\Theta_\alpha + \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[u_\alpha - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)}(u_\alpha - u_\beta) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} \right. \right. \\ \times \left. \left(q_\alpha - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta \right) \right] + 2[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)})\Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)}\Pi_\beta] c_{\alpha r} + \frac{2}{5} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \\ \times \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)}) q_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_\beta - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)}(u_\alpha - u_\beta) \right] \\ \times (c_{\alpha p}^2 - 1) \left. \right\} - \frac{1}{2} \left[X_p + \eta_\alpha X_c + (c_{\alpha p}^2 - 1) X_T \right]. \quad (6.8) \end{aligned}$$

A seguir, multiplicando a Eq. (6.3) por $c_{\alpha x}^3 \exp(-c_{\alpha x}^2)/\sqrt{\pi}$ e integrando em $c_{\alpha x}$ obtemos a seguinte equação para Ξ_α :

$$\begin{aligned} c_{\alpha r} \frac{\partial \Xi_\alpha}{\partial r} - \frac{c_{\alpha\varphi}}{r} \frac{\partial \Xi_\alpha}{\partial \theta} = R \left(\frac{m_\alpha}{2kT} \right)^{1/2} \gamma_\alpha \left\{ -\Xi_\alpha + \frac{3}{5} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[u_\alpha - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)}(u_\alpha - u_\beta) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} \right. \right. \\ \times \left. \left(q_\alpha - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta \right) \right] + 3[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)})\Pi_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)}\Pi_\beta] c_{\alpha r} + \frac{3}{5} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \end{aligned}$$

$$\times \left[\left(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)} \right) q_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_\beta - \frac{15}{12} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_\alpha - u_\beta) \right] c_{\alpha p}^2 \left\{ -\frac{3}{4} \left[X_P + \eta_\alpha X_C + c_{\alpha p}^2 X_T \right] \right\} \quad (6.9)$$

Os momentos dados nas Eqs. (A.5)-(A.7) são reescritos em coordenadas cilíndricas e como funções de Θ_α e Ξ_α do seguinte modo:

$$u_\alpha(r) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty c_{\alpha p} \Theta_\alpha \exp(-c_{\alpha p}^2) dc_{\alpha p} d\theta, \quad (6.10)$$

$$q_\alpha(r) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty c_{\alpha p} \left[\Xi_\alpha + \Theta_\alpha \left(c_{\alpha p}^2 - \frac{5}{2} \right) \right] \exp(-c_{\alpha p}^2) dc_{\alpha p} d\theta, \quad (6.11)$$

$$\Pi_\alpha(r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty c_{\alpha r} \Theta_\alpha \exp(-c_{\alpha p}^2) dc_{\alpha p} d\theta. \quad (6.12)$$

O parâmetro γ_α é escolhido do mesmo modo que no Capítulo 5 e sua expressão é dada na Eq. (5.75). A quantidade adimensional $\nu_{\alpha\beta}^{*(i)}$ é definida na Eq. (5.74).

Devido ao fato das Eqs. (6.8) e (6.9) serem lineares podemos escrever suas soluções como combinações lineares das contribuições de cada gradiente, i.e.

$$\Theta_\alpha(r, c_{\alpha r}, c_{\alpha\varphi}) = \Theta_\alpha^{(P)} X_P + \Theta_\alpha^{(C)} X_C + \Theta_\alpha^{(T)} X_T, \quad (6.13)$$

$$\Xi_\alpha(r, c_{\alpha r}, c_{\alpha\varphi}) = \Xi_\alpha^{(P)} X_P + \Xi_\alpha^{(C)} X_C + \Xi_\alpha^{(T)} X_T. \quad (6.14)$$

Conseqüentemente, os momentos dados nas Eqs. (6.10)-(6.12) também podem ser escritos como combinações lineares, ou seja,

$$u_\alpha(r) = u_\alpha^{(P)} X_P + u_\alpha^{(C)} X_C + u_\alpha^{(T)} X_T, \quad (6.15)$$

$$q_\alpha(r) = q_\alpha^{(P)} X_P + q_\alpha^{(C)} X_C + q_\alpha^{(T)} X_T, \quad (6.16)$$

$$\Pi_\alpha(r) = \Pi_\alpha^{(P)} X_P + \Pi_\alpha^{(C)} X_C + \Pi_\alpha^{(T)} X_T. \quad (6.17)$$

Substituindo as Eqs. (6.13)-(6.17) nas Eqs. (6.8) e (6.9) obtemos:

(i) Equação para $\Theta_\alpha^{(n)}(r, c_{\alpha r}, c_{\alpha\varphi})$ com $n = P, C, T$:

$$c_{\alpha r} \frac{\partial \Theta_\alpha^{(n)}}{\partial r} - \frac{c_{\alpha\varphi}}{r} \frac{\partial \Theta_\alpha^{(n)}}{\partial \theta} = \delta_\alpha \left\{ -\Theta_\alpha^{(n)} + \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[u_\alpha^{(n)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)} (u_\alpha^{(n)} - u_\beta^{(n)}) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} \left(q_\alpha^{(n)} - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta^{(n)} \right) \right] \right. \\ \left. + 2 \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)}) \Pi_\alpha^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)} \Pi_\beta^{(n)} \right] c_{\alpha r} + \frac{2}{5} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)}) q_\alpha^{(n)} \right. \right. \\ \left. \left. + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_\beta^{(n)} - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_\alpha^{(n)} - u_\beta^{(n)}) \right] (c_{\alpha p}^2 - 1) \right\} - \frac{1}{2} \mathcal{L}_\Theta^{(n)} \quad (6.18)$$

(ii) Equação para $\Xi_\alpha^{(n)}(r, c_{\alpha r}, c_{\alpha\varphi})$ com $n = P, C, T$:

$$c_{\alpha r} \frac{\partial \Xi_\alpha^{(n)}}{\partial r} - \frac{c_{\alpha\varphi}}{r} \frac{\partial \Xi_\alpha^{(n)}}{\partial \theta} = \delta_\alpha \left\{ -\Xi_\alpha^{(n)} + \frac{3}{2} \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[u_\alpha^{(n)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)} (u_\alpha^{(n)} - u_\beta^{(n)}) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} \left(q_\alpha^{(n)} - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta^{(n)} \right) \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& +3[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)})\Pi_{\alpha}^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)}\Pi_{\beta}^{(n)}]c_{\alpha r} + \frac{3}{5} \left(\frac{m_{\alpha}}{m}\right)^{1/2} \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)})q_{\alpha}^{(n)} \right. \\
& \left. + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}}\right)^{1/2} q_{\beta}^{(n)} - \frac{15}{12}\nu_{\alpha\beta}^{*(2)}(u_{\alpha}^{(n)} - u_{\beta}^{(n)}) \right] c_{\alpha p}^2 \Big\} - \frac{3}{4}\mathcal{L}_{\Xi}^{(n)}, \quad (6.19)
\end{aligned}$$

onde

$$\delta_{\alpha} = R \left(\frac{m_{\alpha}}{2kT}\right)^{1/2} \gamma_{\alpha}, \quad (6.20)$$

e, $\mathcal{L}_{\Theta}^{(n)}$ e $\mathcal{L}_{\Xi}^{(n)}$ denotam os seguintes termos livres:

$$\mathcal{L}_{\Theta}^{(p)} = 1, \quad \mathcal{L}_{\Theta}^{(c)} = \eta_{\alpha}, \quad \mathcal{L}_{\Theta}^{(T)} = c_{\alpha p}^2 - 1, \quad (6.21)$$

$$\mathcal{L}_{\Xi}^{(p)} = 1, \quad \mathcal{L}_{\Xi}^{(c)} = \eta_{\alpha}, \quad \mathcal{L}_{\Xi}^{(T)} = c_{\alpha p}^2. \quad (6.22)$$

O parâmetro δ_{α} corresponde ao parâmetro de rarefação do constituinte α da mistura. Em nosso código numérico utilizamos o parâmetro de rarefação da mistura, denotado por δ e definido na Eq. (2.4), como um parâmetro de entrada. Consequentemente, é necessário estabelecer um relação entre os parâmetros de rarefação da mistura e dos constituintes. Para isso utilizamos as Eqs. (2.4) e (6.20) e obtemos a seguinte relação:

$$\delta_{\alpha} = \frac{\mu}{\mu_{\alpha}} \frac{P_{\alpha}}{P} \left(\frac{m_{\alpha}}{m}\right)^{1/2} \delta, \quad (6.23)$$

onde μ e μ_{α} denotam, respectivamente, a viscosidade da mistura e a viscosidade parcial, cujas expressões são dadas na Ref. [30].

Para resolver numericamente as Eqs. (6.18) e (6.19) precisamos discretizá-las no espaço de velocidades e no espaço físico.

A Figura 6.1-(a) mostra a discretização de uma seção transversal do tubo e a Figura 6.1-(b) mostra que a cada ponto da malha esquematizada na Figura 6.1-(a) está associada uma velocidade $c_{\alpha p}$ com componentes radial $c_{\alpha r}$ e azimutal $c_{\alpha \varphi}$ tal que

$$c_{\alpha r} = c_{\alpha p} \cos \theta, \quad c_{\alpha \varphi} = c_{\alpha p} \sin \theta. \quad (6.24)$$

De acordo com a Figura 6.1-(a), a discretização da coordenada radial r é a seguinte

$$r_k = r_{k-1} + \Delta r, \quad 1 \leq k \leq N_r, \quad r_0 = 0, \quad \Delta r = 1/N_r, \quad (6.25)$$

onde N_r é um número inteiro e corresponde ao número de subdivisões no espaço da coordenada radial r .

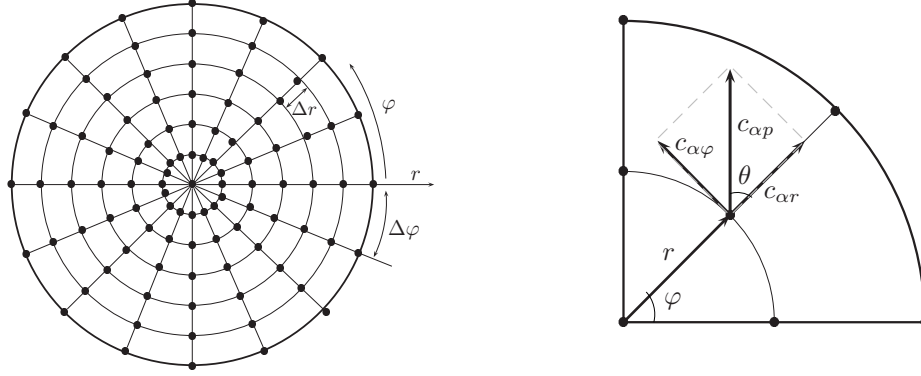
A solução das Eqs. (6.18) e (6.19) não depende do ângulo φ , há dependência somente no ângulo θ . A discretização do ângulo θ é realizado do seguinte modo:

$$\theta_n = \theta_{n-1} + \Delta \theta, \quad 1 \leq n \leq N_{\theta}, \quad \theta_0 = 0, \quad \Delta \theta = \pi/N_{\theta}, \quad (6.26)$$

onde N_{θ} é o número de subdivisões no espaço do ângulo θ .

Note que, de acordo com a Eq. (6.26), a varredura do ângulo θ é feita somente de 0 a π . Os cálculos para θ variando de π a 2π são obtidos considerando-se a simetria do problema.

A discretização no espaço de velocidades $c_{\alpha p}$ é realizada do mesmo modo que na seção 5.2.3.



(a) Seção transversal do tubo discretizada

(b) Partícula num ponto com coordenadas $(r, \varphi, c_{\alpha r}, \theta)$

Figura 6.1: Esquema utilizado para discretização das equações

Considera-se que de $\theta = 0$ até $\theta = \pi/2$ as partículas gasosas se movimentam na direção "centro \rightarrow superfície" enquanto que de $\theta = \pi/2$ até $\theta = \pi$ o movimento se dá na direção "superfície \rightarrow centro".

As derivadas que aparecem nas equações (6.18) e (6.19) são aproximadas via método explícito de diferenças finitas de primeira ordem. Assim, fazendo a discretização dessas equações obtemos:

(i) Equação discretizada para $\Theta_{\alpha}^{(n)}(r, c_{\alpha r}, c_{\alpha \varphi})$:

$$\begin{aligned}
c_{\alpha p_{\ell}} \cos \theta_m \left[\frac{\Theta_{\alpha_{k,l,m}}^{(n)} - \Theta_{\alpha_{k-\epsilon,l,m}}^{(n)}}{\epsilon \Delta r} \right] - \frac{c_{\alpha p_{\ell}} \sin \theta_m}{r_k} \left[\frac{\Theta_{\alpha_{k,l,m}}^{(n)} - \Theta_{\alpha_{k,l,m-1}}^{(n)}}{\Delta \theta} \right] = \delta_{\alpha} \left\{ -\Theta_{\alpha_{k,l,m}}^{(n)} \right. \\
+ \left(\frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left[u_{\alpha_k}^{(n)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)} (u_{\alpha_k}^{(n)} - u_{\beta_k}^{(n)}) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} \left(q_{\alpha_k}^{(n)} - \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} q_{\beta_k}^{(n)} \right) \right] + 2 \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} \right. \\
\left. - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)}) \Pi_{\alpha_k}^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)} \Pi_{\beta_k}^{(n)} \right] c_{\alpha r_{\ell}} + \frac{2}{5} \left(\frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)}) q_{\alpha_k}^{(n)} \right. \\
\left. + \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}} \right)^{1/2} q_{\beta_k}^{(n)} - \frac{5}{4} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_{\alpha_k}^{(n)} - u_{\beta_k}^{(n)}) \right] (c_{\alpha p_{\ell}} - 1) \left. \right\} - \frac{1}{2} \mathcal{L}_{\Theta_{\ell}}^{(n)}. \quad (6.27)
\end{aligned}$$

(ii) Equação discretizada para $\Xi_{\alpha}^{(n)}(r, c_{\alpha r}, c_{\alpha \varphi})$:

$$\begin{aligned}
c_{\alpha p_{\ell}} \cos \theta_m \left[\frac{\Xi_{\alpha_{k,l,m}}^{(n)} - \Xi_{\alpha_{k-\epsilon,l,m}}^{(n)}}{\epsilon \Delta r} \right] - \frac{c_{\alpha p_{\ell}} \sin \theta_m}{r_k} \left[\frac{\Xi_{\alpha_{k,l,m}}^{(n)} - \Xi_{\alpha_{k,l,m-1}}^{(n)}}{\Delta \theta} \right] = \delta_{\alpha} \left\{ -\Xi_{\alpha_{k,l,m}}^{(n)} \right. \\
+ \frac{3}{2} \left(\frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left[u_{\alpha_k}^{(n)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(1)} (u_{\alpha_k}^{(n)} - u_{\beta_k}^{(n)}) - \frac{1}{2} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} \left(q_{\alpha_k}^{(n)} - \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} q_{\beta_k}^{(n)} \right) \right] + 3 \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(3)} \right. \\
\left. - \nu_{\alpha\beta}^{*(3)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(4)}) \Pi_{\alpha_k}^{(n)} + \nu_{\alpha\beta}^{*(4)} \Pi_{\beta_k}^{(n)} \right] c_{\alpha r_{\ell}} + \frac{3}{5} \left(\frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left[(1 - \nu_{\alpha\alpha}^{*(5)} - \nu_{\alpha\beta}^{*(5)} + \nu_{\alpha\alpha}^{*(6)}) q_{\alpha_k}^{(n)} \right.
\end{aligned}$$

$$+ \nu_{\alpha\beta}^{*(6)} \left(\frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} \left[q_{\beta k}^{(n)} - \frac{15}{12} \nu_{\alpha\beta}^{*(2)} (u_{\alpha k}^{(n)} - u_{\beta k}^{(n)}) \right] c_{\alpha p_\ell}^2 \left. \right\} - \frac{3}{4} \mathcal{L}_{\Xi_\ell}^{(n)}, \quad (6.28)$$

onde os índices k, l, m estão associados, respectivamente, à discretização da coordenada radial r , da velocidade $c_{\alpha p}$ e do ângulo θ , e $\epsilon = \text{sin}(\cos \theta)$. O parâmetro de rarefação δ_α é dado na Eq. (6.23) e os termos livres \mathcal{L}_Θ e \mathcal{L}_Ξ são dados nas Eqs. (6.21) e (6.22).

As condições de contorno utilizadas para resolver as Eqs. (6.27) e (6.28) são obtidas via Eqs. (6.4) e (6.5). Então temos:

(i) Em $r_k = 1$ e $\frac{\pi}{2} \leq \theta_m \leq \pi$:

$$\Theta_\alpha(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \theta_m) = 0 \quad \text{e} \quad \Xi_\alpha(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \theta_m) = 0. \quad (6.29)$$

(ii) Em $r_k = 0$ e $0 \leq \theta_m \leq \frac{\pi}{2}$:

$$\Theta_\alpha(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \theta_m) = \Theta_\alpha(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \pi) \quad \text{e} \quad \Xi_\alpha(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \theta_m) = \Xi_\alpha(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \pi). \quad (6.30)$$

Os momentos $u_{\alpha k}^{(n)}$, $q_{\alpha k}^{(n)}$ e $\Pi_{\alpha k}^{(n)}$ que aparecem nas Eqs. (6.27) e (6.28) são calculados com o auxílio das Eqs. (6.10)-(6.12) utilizando-se as seguintes fórmulas de quadratura:

$$u_{\alpha k}^{(n)} = \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \sum_{\ell=1}^{N_c} \sum_{m=0}^{N_\theta} \Theta_\alpha^{(n)}(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \theta_m) \mathcal{W}_\ell \mathcal{P}_m \Delta\theta, \quad (6.31)$$

$$q_{\alpha k}^{(n)} = \left(\frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \sum_{\ell=1}^{N_c} \sum_{m=0}^{N_\theta} \left[\Xi_\alpha^{(n)}(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \theta_m) + \Theta_\alpha^{(n)}(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \theta_m) \left(c_{\alpha p_\ell}^2 - \frac{5}{2} \right) \right] \times \mathcal{W}_\ell \mathcal{P}_m \Delta\theta, \quad (6.32)$$

$$\Pi_{\alpha k}^{(n)} = \sum_{\ell=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{N_\theta} c_{\alpha p_\ell} \cos \theta_m \Theta_\alpha^{(n)}(r_k, c_{\alpha p_\ell}, \theta_m) \mathcal{W}_\ell \mathcal{P}_m \Delta\theta, \quad (6.33)$$

onde \mathcal{W}_ℓ são os pesos gaussianos associados às abcissas gaussianas $c_{\alpha p}$ e

$$\mathcal{P}_m = \begin{cases} 0.5 & \text{se } m = 0 \quad \text{ou} \quad m = N_\theta \\ 1 & \text{se } 0 < m < N_\theta. \end{cases} \quad (6.34)$$

O processo iterativo para solução das Eqs. (6.27) e (6.28) consiste, para cada valor de $c_{\alpha p}$, nos seguintes passos:

- (i) Assume-se $u_\alpha^{(n)}$, $q_\alpha^{(n)}$ e $\Pi_\alpha^{(n)}$ e calcula-se as funções $\Theta_\alpha^{(n)}$ e $\Xi_\alpha^{(n)}$ via Eqs. (6.27) e (6.28);
- (ii) Estima-se novos valores para os momentos $u_\alpha^{(n)}$, $q_\alpha^{(n)}$ e $\Pi_\alpha^{(n)}$ via Eqs. (6.31)-(6.33);
- (iii) Volta-se ao passo (i) e utiliza-se os valores dos momentos $u_\alpha^{(n)}$, $q_\alpha^{(n)}$ e $\Pi_\alpha^{(n)}$ calculados na iteração anterior para calcular novos valores para as funções $\Theta_\alpha^{(n)}$ e $\Xi_\alpha^{(n)}$. O processo iterativo é finalizado quando um critério de convergência é satisfeito.

Para estabelecer um critério de convergência reescrevemos as expressões (4.14)-(4.16) para os coeficientes cinéticos do seguinte modo:

$$\Lambda_{pn} = CG_1^{(n)} + (1 - C)G_2^{(n)}, \quad (6.35)$$

$$\Lambda_{Tn} = CQ_1^{(n)} + (1 - C)Q_2^{(n)}, \quad (6.36)$$

$$\Lambda_{cn} = C[G_1^{(n)} - G_2^{(n)}], \quad (6.37)$$

onde

$$G_\alpha^{(n)} = -4 \int_0^1 u_\alpha^{(n)}(r)r \, dr \quad (6.38)$$

é taxa reduzida de fluxo de massa da espécie α e

$$Q_\alpha^{(n)} = -4 \int_0^1 q_\alpha^{(n)}(r)r \, dr \quad (6.39)$$

é a taxa reduzida de fluxo de calor da espécie α . Assim, o critério de convergência para os cálculos numéricos é escrito do seguinte modo:

$$\left| \frac{G_\alpha^{(n)} - \tilde{G}_\alpha^{(n)}}{\tilde{G}_\alpha^{(n)}} \right| \leq \mathcal{E}, \quad \left| \frac{Q_\alpha^{(n)} - \tilde{Q}_\alpha^{(n)}}{\tilde{Q}_\alpha^{(n)}} \right| \leq \mathcal{E}, \quad (6.40)$$

onde $\tilde{G}_\alpha^{(n)}$ e $\tilde{Q}_\alpha^{(n)}$ denotam, respectivamente, os valores das taxas reduzidas de fluxos de massa e calor obtidos na iteração anterior para a velocidade $c_{\alpha p}$ e $\mathcal{E} = 10^{-10}$ é o erro aceitável.

Portanto, quando o critério de convergência (6.40) é satisfeito o processo iterativo é finalizado e os coeficientes cinéticos são calculados via Eqs. (6.35)-(6.37).

A precisão dos cálculos numéricos é 0.1% e é estimada através da comparação dos resultados obtidos para diferentes valores dos parâmetros da malha. Essa precisão foi atingida com os seguintes parâmetros da malha: $N_c = 10$, $N_r = 40000$ e $N_\theta = 200$. Também verificamos que as relações de reciprocidade de Onsager-Casimir dadas na Eq. (4.17) são satisfeitas.

Os resultados numéricos obtidos para os coeficientes cinéticos no regime de transição são apresentados no Capítulo 7.

CAPÍTULO 7

Resultados e discussão

Todos os cálculos numéricos foram realizados para três misturas de gases nobres: Neônio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio. As espécies que compõem essas misturas possuem as seguintes massas atômicas: $m_{He} = 4.0026$, $m_{Ne} = 20.183$, $m_{Ar} = 39.948$ e $m_{Xe} = 131.30$ unidades de massa atômica. A escolha dessas misturas foi feita visando analisar a influência do parâmetro m_2/m_1 , onde m_1 é a massa da espécie leve e m_2 é a massa da espécie pesada, nos coeficientes de deslizamento e também nos coeficientes cinéticos já que esse conjunto de misturas possui os seguintes valores para esse parâmetro: $(m_2/m_1)_{Ne-Ar} = 1.979$, $(m_2/m_1)_{He-Ar} = 9.980$ e $(m_2/m_1)_{He-Xe} = 32.804$.

A análise da sensibilidade dos coeficientes de deslizamento ao potencial de interação entre as partículas é realizada e, para isso, utilizamos dois potenciais de interação: o modelo de esferas-rígidas e um potencial realístico [67] de interação. O modelo de esferas-rígidas é muito utilizado devido a sua simplicidade enquanto que o potencial realístico fornece uma descrição mais física da interação entre as partículas. Em nosso código numérico, os diâmetros das espécies constituintes das misturas consideradas são parâmetros de entrada e dependem do potencial de interação entre as partículas. No Apêndice A mostramos como calculamos os diâmetros para o modelo de esferas-rígidas. Para o caso de potencial realístico os valores são tabelados na Ref. [67].

Como será visto mais adiante, os coeficientes de deslizamento difuso e térmico dependem do potencial de interação entre as partículas e o uso do modelo de esferas-rígidas não é aconselhável. Por isso, como no regime hidrodinâmico as expressões para os coeficientes cinéticos dependem dos coeficientes de deslizamento, os cálculos numéricos para os coeficientes cinéticos foram feitos somente para o potencial realístico [67] de interação entre as partículas. Na Ref. [31] é mostrado que os coeficientes cinéticos são sensíveis ao potencial de interação entre as partículas tal que o modelo de esferas-rígidas deve ser evitado nos cálculos referentes a misturas gasosas, principalmente quando o estudo se refere a fluxos difusivos de misturas gasosas.

7.1 Coeficientes de deslizamento

Nesta seção apresenta-se os resultados obtidos no presente trabalho para os coeficientes de deslizamento viscoso, difuso e térmico das misturas em questão. A Ref. [94] fornece expressões para os coeficientes de deslizamento viscoso, difuso e térmico de misturas binárias de gases rarefeitos obtidas através da aplicação do método dos momentos para a solução analítica

da equação de Boltzmann. Nossos resultados são comparados com os obtidos na Ref. [94] utilizando as seguintes relações:

$$\sigma_p = \frac{8}{5\sqrt{\pi}}c_m, \quad \sigma_c = \frac{C_{\rho}D_{12}}{2\mu}c_{Dsl}, \quad \sigma_T = c_{Tsl}, \quad (7.1)$$

onde c_m , c_{Dsl} e c_{Tsl} denotam, respectivamente, os coeficientes de deslizamento viscoso, difuso e térmico obtidos na Ref. [94].

É importante esclarecer o porquê do cálculo numérico dos coeficientes de deslizamento se a Ref. [94] nos fornece expressões analíticas para esses coeficientes. Na Ref. [94] as expressões para os coeficientes de deslizamento foram obtidas via solução analítica da equação de Boltzmann, a qual foi linearizada através do uso da seguinte expressão para a função de distribuição das partículas refletidas (+) e incidentes (-):

$$f_{\alpha}^{\pm} = f_{\alpha}^0[1 + \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{c}_{\alpha}) + \Phi_{\alpha}^{\pm}(x, \mathbf{c}_{\alpha})],$$

onde f_{α}^0 corresponde à função Maxwelliana local, $\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{c}_{\alpha})$ é a aproximação de Chapman-Enskog de primeira ordem e $\Phi_{\alpha}^{\pm}(x, \mathbf{c})$ é uma função associada à influência da parede cuja expressão também é uma aproximação.

Portanto, estamos comparando resultados obtidos através do uso de uma equação aproximada (equação cinética de McCormack) com resultados obtidos através de uma aproximação para a solução da equação linearizada de Boltzmann.

7.1.1 Coeficiente de deslizamento viscoso

As Figuras 7.1-7.3 mostram, respectivamente, o perfil do coeficiente de deslizamento viscoso σ_p em função da concentração C_0 das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe para os dois potenciais de interação considerados: modelo de esferas-rígidas e potencial realístico. Essas figuras também apresentam o perfil do coeficiente de deslizamento viscoso σ_p obtido na Ref. [94] para cada uma das misturas consideradas neste trabalho e para ambos os potenciais de interação. Dessas figuras podemos observar que:

- (i) O coeficiente de deslizamento viscoso σ_p depende fracamente do potencial de interação entre as partículas. A diferença entre os valores de σ_p obtidos para o modelo de esferas-rígidas e para o potencial realístico é menor que 0.4% para todas as misturas consideradas neste trabalho (para uma verificação mais precisa consulte as Tabelas B.1-B.2 dadas no Apêndice C). Observe que o mesmo pode ser dito a respeito dos resultados obtidos na Ref. [94].
- (ii) Os resultados obtidos através de métodos diferentes estão em boa concordância entre si. Nossos resultados foram obtidos via solução da equação cinética de McCormack [39] com a aplicação do método de velocidades discretas [40] enquanto que na Ref. [94] os resultados foram obtidos analiticamente via método dos momentos. Com o auxílio das Tabelas B.1-B.2, dadas no Apêndice C, podemos verificar que a máxima diferença entre os nossos resultados e os obtidos na Ref. [94] é aproximadamente 1%. Do ponto de vista computacional, calcular o coeficiente de deslizamento viscoso via solução da equação cinética de McCormack é mais vantajoso do que calculá-lo via método dos momentos.

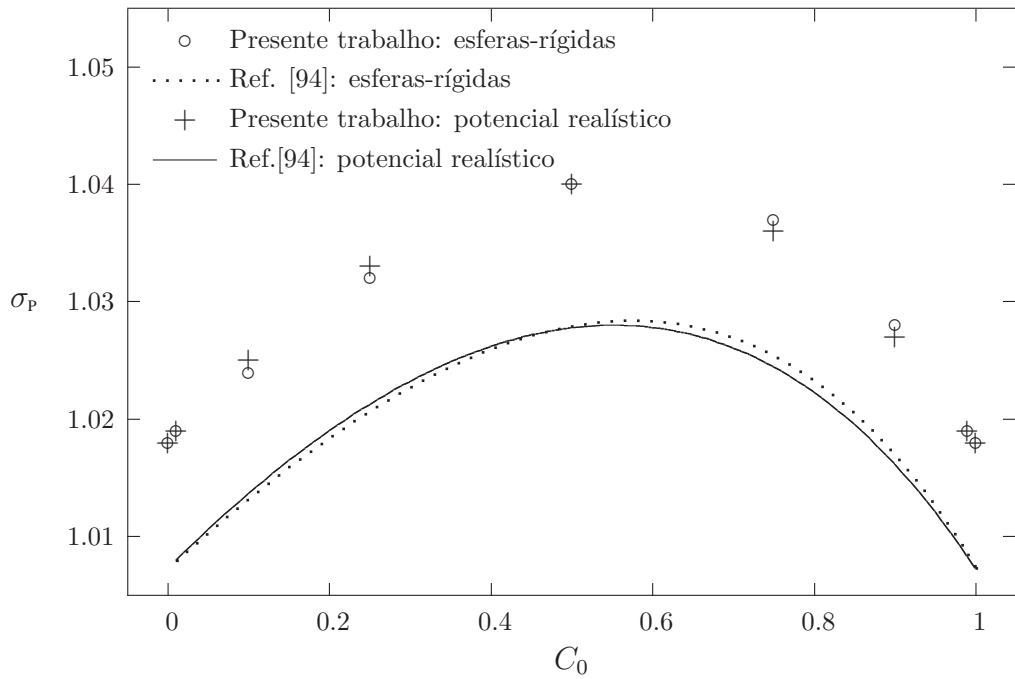


Figura 7.1: Coeficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração molar C_0 para a mistura Ne-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação

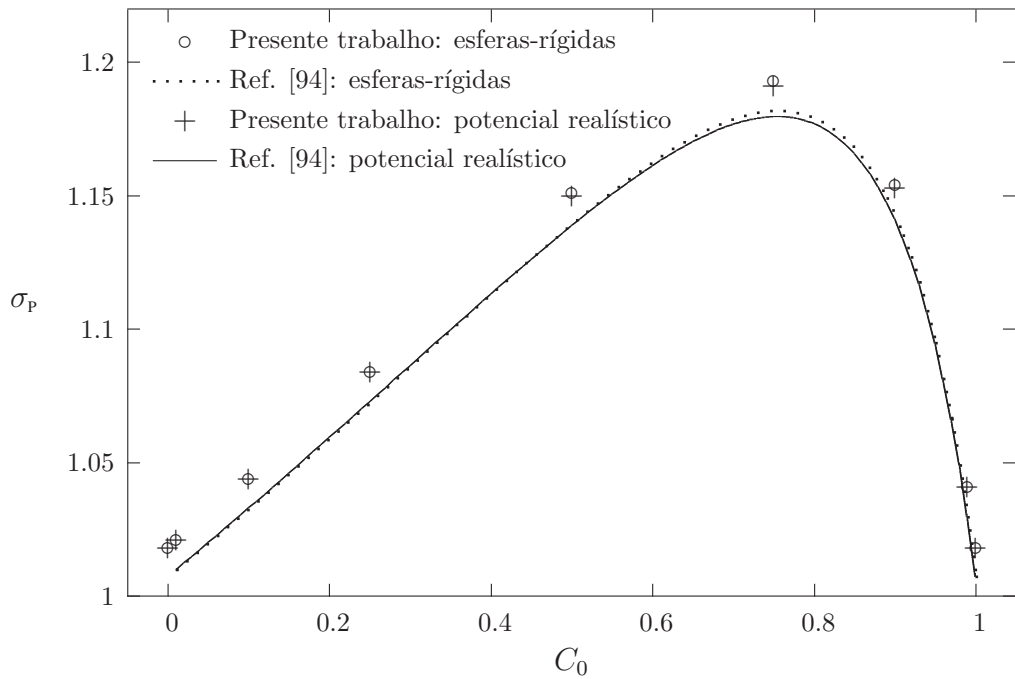


Figura 7.2: Coeficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração molar C_0 para a mistura He-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação

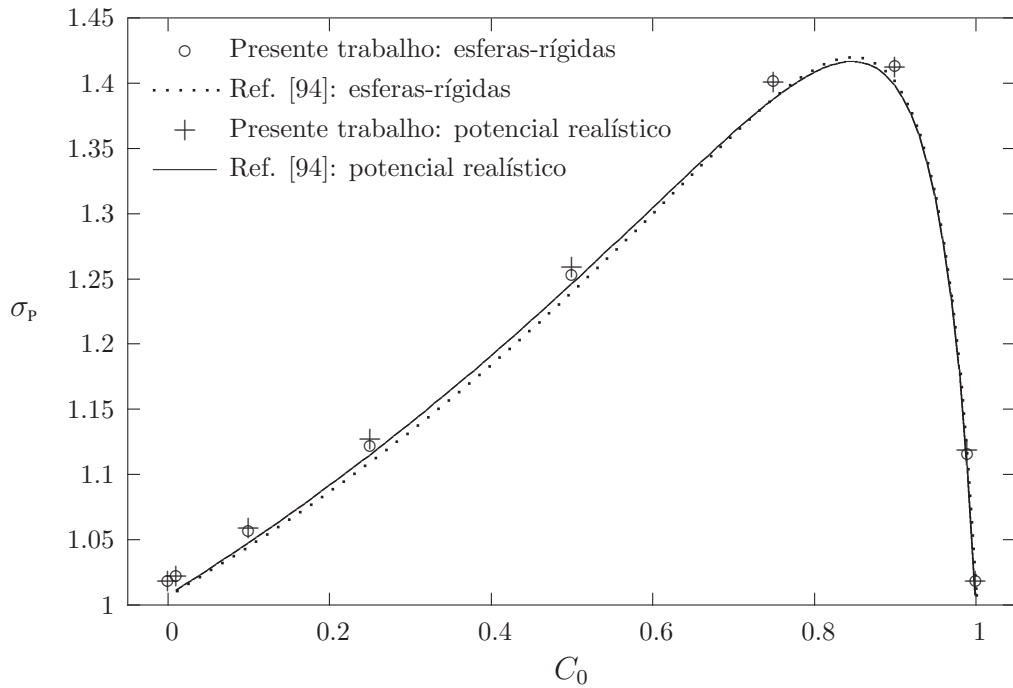


Figura 7.3: Coeficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração molar C_0 para a mistura He-Xe, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação

- (iii) Nos limites de gás único, i.e. quando $C_0 = 0$ e $C_0 = 1$, os valores obtidos para o coeficiente de deslizamento viscoso σ_p são exatamente iguais aos valores obtidos nas Refs. [49, 50] para um gás único via modelo de Shakov e condição de reflexão difusa das partículas na superfície. Esse resultado é previsto pois o modelo de McCormack tende ao modelo de Shakov quando a concentração de uma das espécies que constituem a mistura é muito pequena.
- (iv) Para a mistura de Ne-Ar, a máxima variação de σ_p em relação ao valor para um gás único é aproximadamente 2%. Para a mistura de He-Ar a máxima variação é aproximadamente 17% e para a mistura de He-Xe é aproximadamente 39%. Isso significa que quanto maior a razão entre as massas das espécies que constituem a mistura maior a variação do coeficiente de deslizamento viscoso σ_p em relação ao valor de um gás único.
- (v) Para a mistura com maior razão entre as massas das espécies, ou seja m_2/m_1 , uma pequena concentração da espécie pesada muda significativamente o valor de σ_p em relação ao valor para um gás único. Em nosso trabalho a mistura de He-Xe possui a maior razão entre as massas das espécies e para uma concentração $C_0 = 0.99$ por exemplo, temos somente 1% de Xe e σ_p varia em aproximadamente 10% em relação ao valor para gás único.
- (vi) O coeficiente de deslizamento viscoso σ_p sempre apresenta maiores valores para a mistura com maior razão entre as massas das espécies constituintes e para as misturas consideradas neste trabalho σ_p varia no intervalo $[1.018, 1.4]$ para qualquer valor de concentração

C_0 . A nível de curiosidade podemos dizer que se tivéssemos uma mistura formada por duas espécies gasosas atómicamente diferentes mas com massas iguais, o valor do coeficiente de deslizamento viscoso seria exatamente igual ao valor obtido para o caso de um único gás, ou seja, $\sigma_p = 1.018$.

As Tabelas 7.1-7.3 apresentam alguns valores obtidos no presente trabalho para os desvios de velocidade de cada espécie constituinte das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe em função da distância x normal à parede considerando o modelo de esferas-rígidas.

Tabela 7.1: Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne - Ar devido ao gradiente de velocidade, modelo de esferas-rígidas

x	$C_0 = 0.1$		$C_0 = 0.5$		$C_0 = 0.9$	
	$u_1^{(u)}$	$u_2^{(u)}$	$u_1^{(u)}$	$u_2^{(u)}$	$u_1^{(u)}$	$u_2^{(u)}$
0.001	0.775	0.703	0.757	0.687	0.722	0.653
0.1	0.838	0.784	0.826	0.775	0.796	0.750
0.2	0.868	0.823	0.859	0.817	0.834	0.797
0.5	0.919	0.890	0.917	0.892	0.898	0.878
1.0	0.960	0.945	0.964	0.952	0.950	0.941
2.0	0.994	0.989	1.004	1.001	0.993	0.991
5.0	1.019	1.019	1.034	1.033	1.023	1.023
10.0	1.024	1.024	1.039	1.039	1.028	1.028

Tabela 7.2: Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura He - Ar devido ao gradiente de velocidade, modelo de esferas-rígidas

x	$C_0 = 0.1$		$C_0 = 0.5$		$C_0 = 0.9$	
	$u_1^{(u)}$	$u_2^{(u)}$	$u_1^{(u)}$	$u_2^{(u)}$	$u_1^{(u)}$	$u_2^{(u)}$
0.001	0.799	0.720	0.848	0.781	0.809	0.779
0.1	0.862	0.801	0.919	0.869	0.890	0.871
0.2	0.889	0.840	0.954	0.913	0.930	0.916
0.5	0.940	0.908	1.015	0.989	1.000	0.994
1.0	0.979	0.963	1.066	1.052	1.059	1.057
2.0	1.013	1.007	1.111	1.105	1.109	1.109
5.0	1.040	1.038	1.143	1.143	1.146	1.146
10.0	1.043	1.043	1.150	1.150	1.153	1.153

Tabela 7.3: Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura He - Xe devido ao gradiente de velocidade, modelo de esferas-rígidas

x	$C_0 = 0.1$		$C_0 = 0.5$		$C_0 = 0.9$	
	$u_1^{(u)}$	$u_2^{(u)}$	$u_1^{(u)}$	$u_2^{(u)}$	$u_1^{(u)}$	$u_2^{(u)}$
0.001	0.865	0.729	0.970	0.846	0.996	0.960
0.1	0.920	0.810	1.036	0.936	1.084	1.058
0.2	0.942	0.849	1.069	0.982	1.129	1.108
0.5	0.985	0.917	1.122	1.063	1.208	1.197
1.0	1.012	0.972	1.172	1.133	1.280	1.274
2.0	1.040	1.019	1.213	1.194	1.345	1.343
5.0	1.050	1.051	1.246	1.241	1.399	1.398
10.0	1.056	1.056	1.252	1.252	1.411	1.411

Desses dados podemos observar que nas proximidades da superfície, ou seja, na camada de Knudsen, a espécie leve se movimenta mais rapidamente que a espécie pesada em todas as situações tabeladas. Isso ocorre porque ao colidir com a parede as partículas gasosas são termalizadas, ou seja, a energia cinética da partícula é igual a kT_w (k é a constante de Boltzmann e T_w denota a temperatura da parede) e, conseqüentemente, a espécie leve sempre terá velocidade maior nas proximidades da parede.

Distante da superfície, ou seja, fora da camada de Knudsen, as velocidades de ambas as espécies são iguais e este valor corresponde ao valor do coeficiente de deslizamento viscoso σ_p .

Para visualizarmos o comportamento não linear do desvio da velocidade $u_y^{(u)}$ das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe na camada de Knudsen plotamos as curvas dadas na Figura 7.4. Os perfis da velocidade $u_y^{(u)}$ mostrados nessa figura foram plotados utilizando-se a seguinte relação entre a velocidade da mistura $u_y^{(u)}$ e a velocidade dos constituintes $u_1^{(u)}$ e $u_2^{(u)}$:

$$u_y^{(u)} = C_0 \frac{m_1}{m} u_1^{(u)} + (1 - C_0) \frac{m_2}{m} u_2^{(u)}, \quad (7.2)$$

onde as velocidades $u_1^{(u)}$ e $u_2^{(u)}$ são dadas nas Tabelas 7.1, 7.2 e 7.3.

A Figura 7.4 permite visualizarmos perfeitamente a não linearidade nas proximidades da parede, ou seja, na camada de Knudsen. Fora da camada de Knudsen temos um perfil linear constante.

Também deve ser notado que em $x = 20$ a velocidade $u_y^{(u)}$ apresenta um perfil linear constante para as três misturas consideradas no presente trabalho e, portanto, o valor máximo de x considerado nos cálculos numéricos é 20. Como dito anteriormente, realizar os cálculos numéricos com $x_{max} > 20$ é possível mas computacionalmente é desvantajoso.

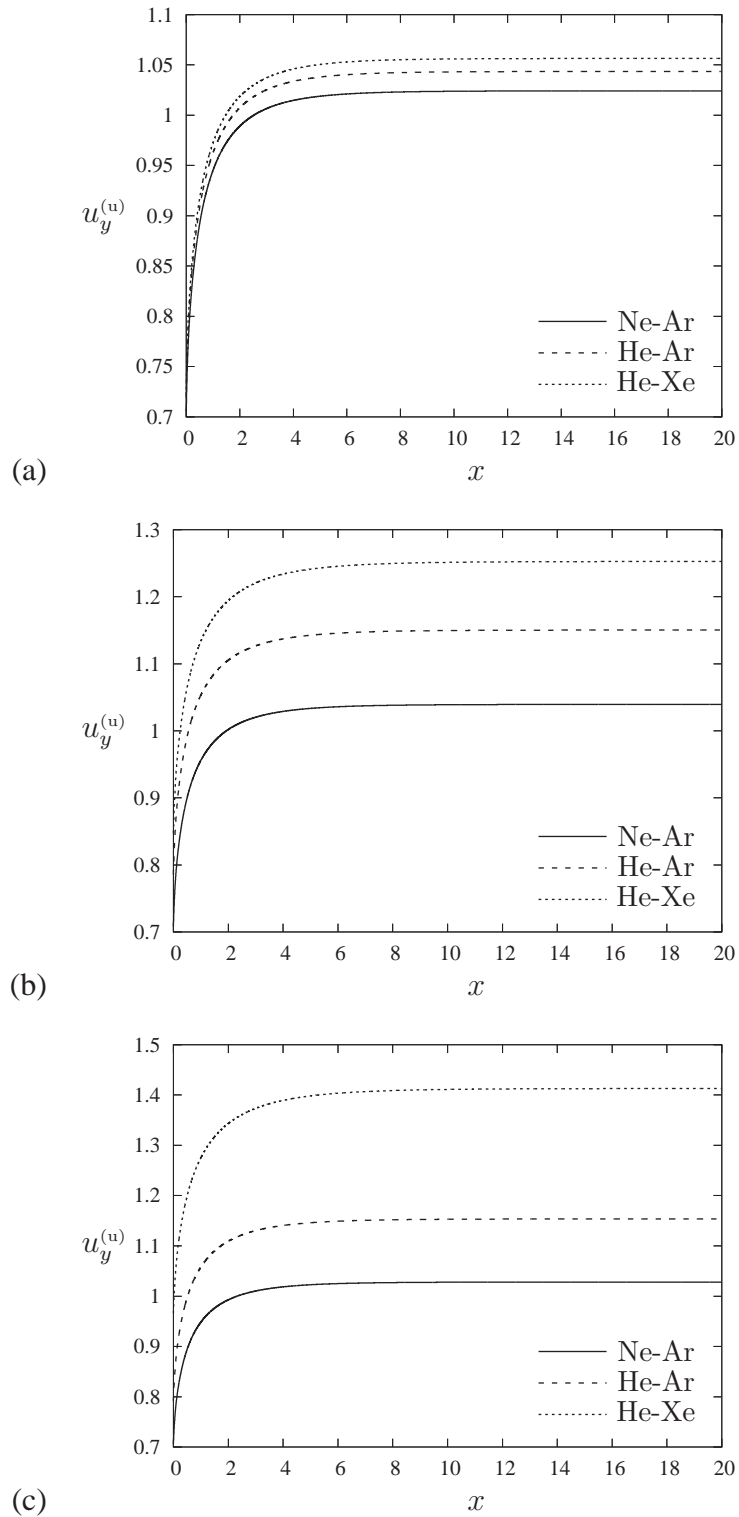


Figura 7.4: Perfil do desvio de velocidade $u_y^{(u)}$ das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe em função da distância x normal à parede para concentração: (a) $C_0 = 0.1$, (b) $C_0 = 0.5$ e (c) $C_0 = 0.9$

7.1.2 Coeficiente de deslizamento difuso

As Figuras 7.5, 7.6 e 7.7 mostram, respectivamente, o perfil do coeficiente de deslizamento difuso σ_c em função da concentração molar C_0 para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe para os dois potenciais de interação considerados: modelo de esferas-rígidas e potencial realístico.

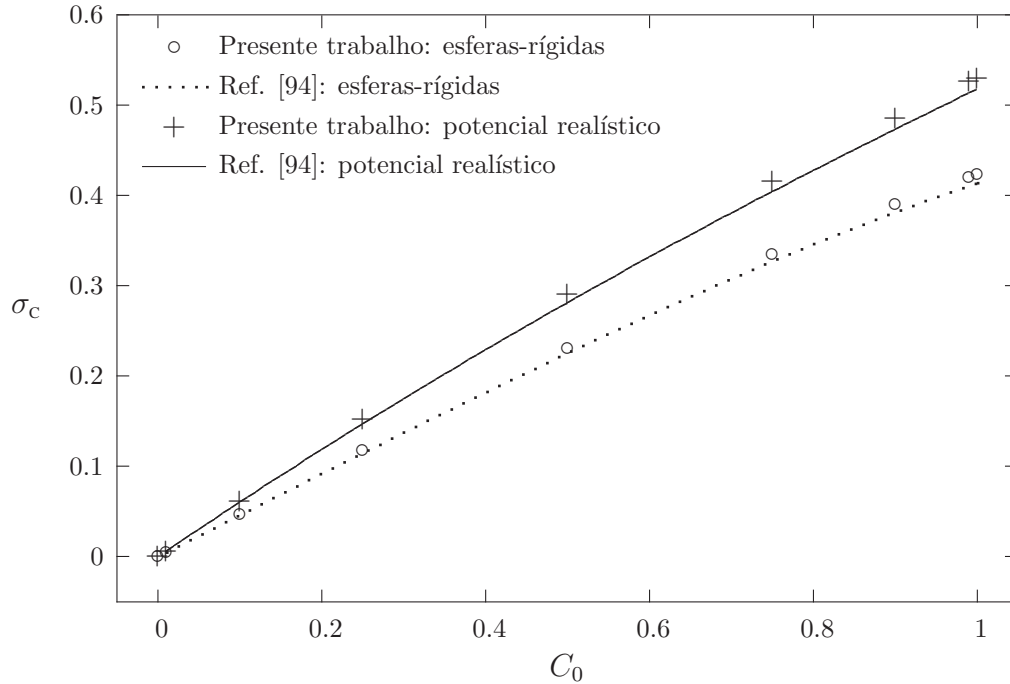


Figura 7.5: Coeficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração molar C_0 para a mistura de Ne-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.

Dessas figuras podemos observar que:

- (i) Para as três misturas consideradas no presente trabalho o coeficiente de deslizamento difuso σ_c é sempre positivo. Fisicamente isso significa que a mistura sempre flui da região de menor concentração para a região de maior concentração da espécie leve.
- (ii) O coeficiente de deslizamento difuso é uma função monotônica da concentração molar e atinge seu valor máximo quando C_0 tende a um.
- (iii) Nos limites $C_0 = 0$ e $C_0 = 1$ o fenômeno de deslizamento difuso não ocorre pois nessas concentrações temos uma única espécie gasosa e o fenômeno de deslizamento difuso está associado ao movimento de difusão entre as diferentes espécies que constituem a mistura.
- (iv) Esse coeficiente é sensível ao potencial de interação. A diferença entre os resultados obtidos para o modelo de esferas-rígidas e para o potencial realístico aumenta à medida que a razão das massas das espécies que constituem a mistura aumenta. Para a mistura de maior razão entre as massas das espécies (mistura de He-Xe com $m_2/m_1 = 32.804$) essa diferença alcança o valor de 30%. Essa sensibilidade ao potencial de interação foi notada

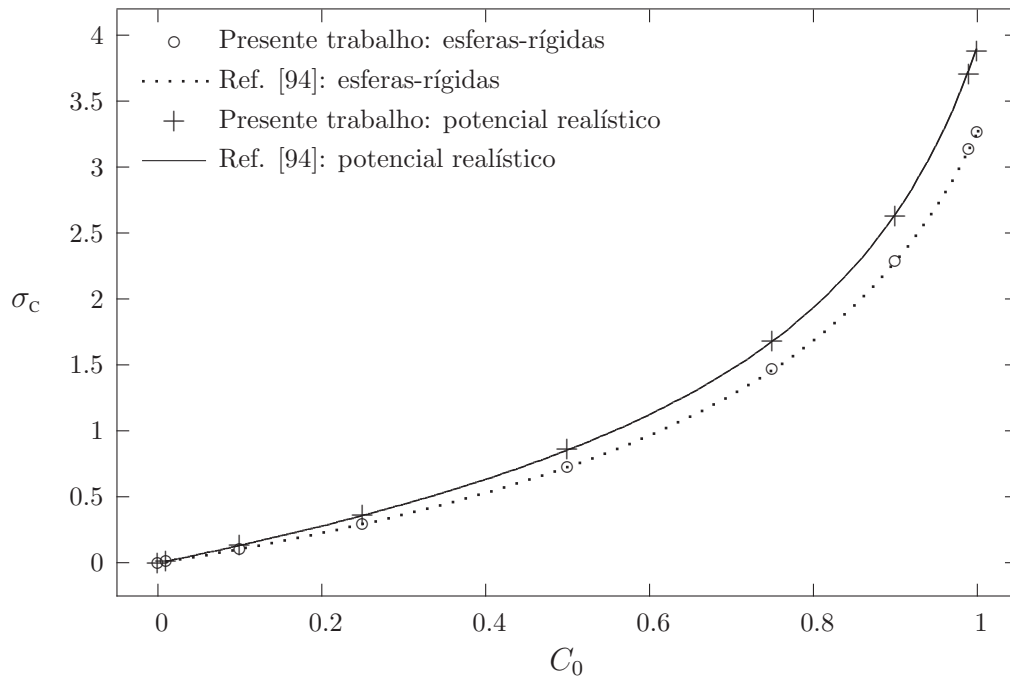


Figura 7.6: Coeficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração molar C_0 para a mistura de He-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.

previamente por Loyalka na Ref. [94]. Portanto, os resultados obtidos via modelo de esferas-rígidas podem ser considerados qualitativamente corretos mas quantitativamente estão bem distantes dos resultados aceitáveis.

- (v) Comparando os resultados obtidos no presente trabalho com os obtidos na Ref. [94] podemos observar que ambos possuem o mesmo comportamento qualitativo mas quantitativamente existe diferença entre os resultados. A máxima diferença entre os resultados obtidos neste trabalho e os obtidos na Ref. [94] é aproximadamente 2% para as três misturas consideradas ao assumirmos que as partículas interagem de acordo com o modelo de esferas-rígidas. Já para o caso de potencial realístico de interação entre as partículas, a máxima diferença entre os resultados é aproximadamente 2% para as misturas Ne-Ar e He-Ar e 8% para a mistura He-Xe. Como os resultados do presente trabalho e da Ref. [94] foram obtidos através de métodos diferentes, uma diferença de 2% entre os resultados é aceitável mas o mesmo não pode ser dito quando a diferença é de 8%. Portanto, no caso de potencial realístico o coeficiente de deslizamento viscoso σ_c apresenta uma sensibilidade ao método de solução quando a mistura considerada apresenta uma grande razão entre as massas das espécies constituintes. Para saber qual dos métodos fornece resultados mais próximos da realidade física precisamos comparar os resultados obtidos via ambos os métodos com dados obtidos experimentalmente ou via solução da equação de Boltzmann com a integral de colisões exata e um potencial de interação intermolecular mais próximo da realidade física. Mais adiante comparamos os nossos resultados com os obtidos em um trabalho no qual a equação de Boltzmann foi resolvida com a integral de colisões exata.

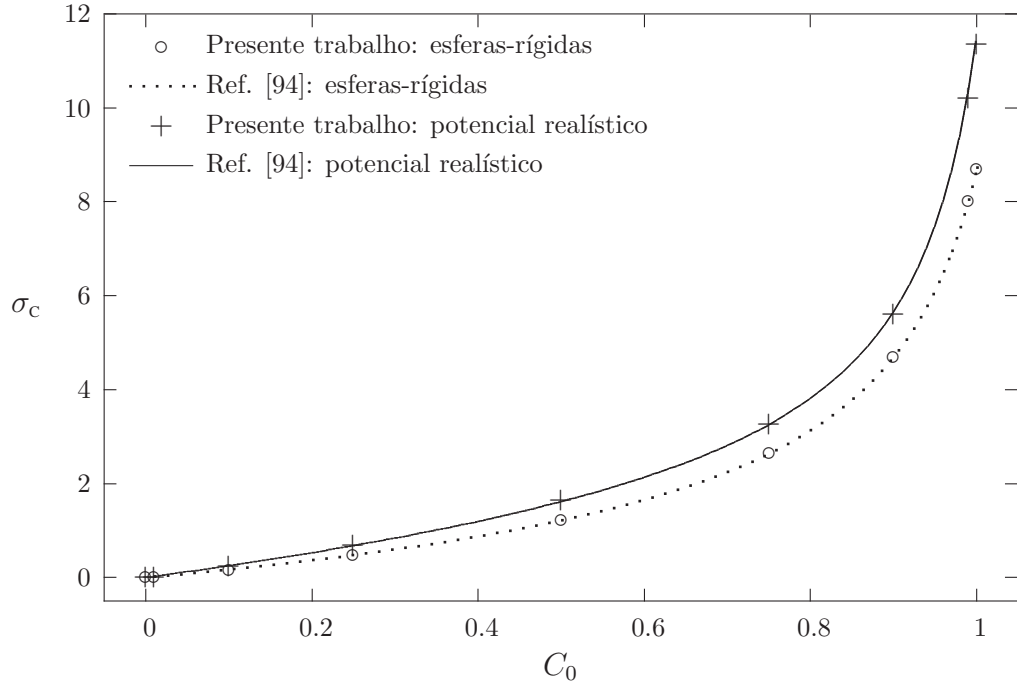


Figura 7.7: Coeficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração molar C_0 para a mistura de He-Xe, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.

- (vi) O coeficiente de deslizamento difuso σ_c aumenta à medida que o parâmetro m_2/m_1 aumenta. Para a mistura de He-Xe, que possui o maior valor de m_2/m_1 , σ_c atinge o valor de 11.355. Isso significa que o fenômeno de deslizamento difuso é muito significativo para misturas com grande razão entre as massas das espécies constituintes. Também é possível observar que quanto menor a concentração da espécie pesada maior o valor do coeficiente de deslizamento difuso.

Os resultados obtidos para o coeficiente de deslizamento difuso também foram comparados com os resultados obtidos nas Refs. [65, 85]. Nas Refs. [65, 85], o coeficiente de deslizamento difuso foi determinado para algumas misturas hipotéticas de gases rarefeitos via solução numérica da equação de Boltzmann com a integral de colisões exata e utilizando o modelo de esferas-rígidas para a interação entre as partículas. Nosso coeficiente de deslizamento difuso σ_c está relacionado ao coeficiente de deslizamento difuso definido na Ref. [85] e denotado por b_{II} do seguinte modo:

$$\sigma_c = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{mC_0}{\mu d_1^2} \left(\frac{2kT}{m_1} \right)^{1/2} b_{II}, \quad (7.3)$$

onde d_1 denota o diâmetro da espécie leve que constitui a mistura.

Para realizar essa comparação os cálculos foram realizados para misturas hipotéticas de gases rarefeitos com parâmetros m_2/m_1 iguais a 2, 5 e 10, e razão entre os diâmetros das espécies d_2/d_1 igual a unidade. Também assumiu-se o modelo de esferas-rígidas para interação entre as partículas gasosas. Os valores numéricos apresentados nas Refs. [65, 85] foram recalculados via Eq. (7.3). Os resultados obtidos se encontram na Tabela 7.4.

Tabela 7.4: Coeficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração C_0 , misturas hipotéticas com razão entre as massas das espécies igual a m_2/m_1

C_0	σ_c					
	$m_2/m_1 = 2$		$m_2/m_1 = 5$		$m_2/m_1 = 10$	
	Presente	Ref. [85, 65]	Presente	Ref. [85, 65]	Presente	Ref. [85, 65]
0.1	0.022	0.024	0.041	0.044	0.051	0.055
0.3	0.077	0.083	0.156	0.166	0.197	0.209
0.5	0.150	0.161	0.342	0.492	0.450	0.475
0.7	0.247	0.263	0.676	0.710	0.978	1.024
0.9	0.380	0.403	1.377	2.401	2.525	2.618

A análise dessa tabela mostra que a diferença entre os resultados obtidos no presente trabalho via modelo de McCormack e os obtidos via solução da equação de Boltzmann com a integral de colisões exata não excede 5% para as três misturas hipotéticas consideradas. Isso mostra que o modelo de McCormack fornece resultados precisos com a vantagem de que o esforço computacional necessário para os cálculos numéricos é bem menor comparado ao esforço computacional necessário para a solução da equação de Boltzmann.

Como o coeficiente de deslizamento difuso depende do potencial de interação entre as partículas seria recomendável fazer a comparação dos nossos resultados com os obtidos via equação de Boltzmann para o caso de potencial realístico de interação. No presente trabalho não foi possível fazer essa comparação porque ainda não existem trabalhos na literatura referentes à solução da equação de Boltzmann original para o caso de potenciais de interação diferentes do modelo de esferas-rígidas.

O perfil da velocidade de cada espécie constituinte das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe em função da distância x normal à parede é mostrado nas Tabelas 7.5-7.7 para concentrações $C_0 = 0.1, 0.5$ e 0.9 e potencial realístico de interação entre as partículas. Dos dados apresen-

Tabela 7.5: Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura Ne- Ar devido ao gradiente de concentração, potencial realístico de interação

x	$C_0 = 0.1$		$C_0 = 0.5$		$C_0 = 0.9$	
	$-u_1^{(c)}$	$u_2^{(c)}$	$-u_1^{(c)}$	$u_2^{(c)}$	$-u_1^{(c)}$	$u_2^{(c)}$
0.001	0.501	0.009	0.396	0.269	0.295	1.806
0.1	0.635	0.049	0.510	0.357	0.386	2.426
0.2	0.711	0.056	0.571	0.405	0.434	2.760
0.5	0.849	0.069	0.680	0.494	0.514	3.336
1.0	0.962	0.080	0.764	0.565	0.570	3.756
2.0	1.049	0.089	0.821	0.617	0.604	4.030
5.0	1.094	0.094	0.845	0.644	0.614	4.136
10.0	1.098	0.095	0.846	0.646	0.614	4.141
20.0	1.098	0.095	0.846	0.646	0.614	4.141

tados nessas tabelas observa-se que as velocidades das espécies constituintes de cada mistura possuem direções opostas. Para as três misturas consideradas no presente trabalho, quando $C_0 = 0.1$ a espécie leve possui maior velocidade. À medida que a concentração C_0 aumenta,

Tabela 7.6: Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura He- Ar devido ao gradiente de concentração, potencial realístico de interação

x	$C_0 = 0.1$		$C_0 = 0.5$		$C_0 = 0.9$	
	$-u_1^{(c)}$	$u_2^{(c)}$	$-u_1^{(c)}$	$u_2^{(c)}$	$-u_1^{(c)}$	$u_2^{(c)}$
0.001	1.193	0.039	0.966	0.289	0.590	1.621
0.1	1.495	0.051	1.214	0.370	0.753	2.061
0.2	1.667	0.057	1.357	0.417	0.849	2.315
0.5	1.984	0.070	1.622	0.505	1.032	2.793
1.0	2.253	0.085	1.850	0.582	1.194	3.209
2.0	2.470	0.090	2.035	0.646	1.332	3.556
5.0	2.591	0.096	2.141	0.685	1.416	3.762
10.0	2.605	0.097	2.151	0.689	1.426	3.784
20.0	2.605	0.097	2.152	0.690	1.426	3.785

Tabela 7.7: Perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura He- Xe devido ao gradiente de concentração, potencial realístico de interação.

x	$C_0 = 0.1$		$C_0 = 0.5$		$C_0 = 0.9$	
	$-u_1^{(c)}$	$u_2^{(c)}$	$-u_1^{(c)}$	$u_2^{(c)}$	$-u_1^{(c)}$	$u_2^{(c)}$
0.001	2.859	0.051	2.280	0.368	1.207	1.840
0.1	3.457	0.065	2.760	0.465	1.492	2.260
0.2	3.816	0.074	3.053	0.526	1.668	2.516
0.5	4.500	0.092	3.614	0.643	2.021	3.021
1.0	5.143	0.109	4.146	0.761	2.369	3.509
2.0	5.732	0.128	4.638	0.878	2.711	3.978
5.0	6.162	0.144	4.998	0.978	2.987	4.342
10.0	6.236	0.148	5.054	0.999	3.037	4.405
20.0	6.242	0.148	5.059	1.002	3.041	4.410

a velocidade da espécie leve tende a diminuir enquanto que a velocidade da espécie pesada tende a aumentar. Distante da superfície sólida a velocidade de cada espécie é constante e a diferença entre as velocidades das espécies constituintes de cada mistura, ou seja $u_1^{(c)} - u_2^{(c)}$, é determinada através do coeficiente de difusão D_{12} e pode ser obtida analiticamente via método de Chapman-Enskog. Assim, aplicando o método de Chapman-Enskog para resolver a equação cinética (6.3) para $x \rightarrow \infty$, a seguinte expressão para a diferença entre as velocidades das espécies constituintes da mistura é encontrada:

$$u_1^{(c)} - u_2^{(c)} = -\frac{\varrho_0 D_{12}}{2\mu(1 - C_0)}, \quad (7.4)$$

onde D_{12} e μ denotam, respectivamente, o coeficiente de difusão e a viscosidade da mistura cujas expressões podem ser encontradas na Ref. [68]. O resultado da diferença $u_1^{(c)} - u_2^{(c)}$ calculado via dados apresentados nas Tabelas 7.5, 7.6 e 7.7 está em excelente concordância com os resultados obtidos via expressão Eq. (7.4).

Novamente, para visualizarmos o comportamento não linear da velocidade das misturas na camada de Knudsen plotamos as curvas dadas na Figura 7.8.

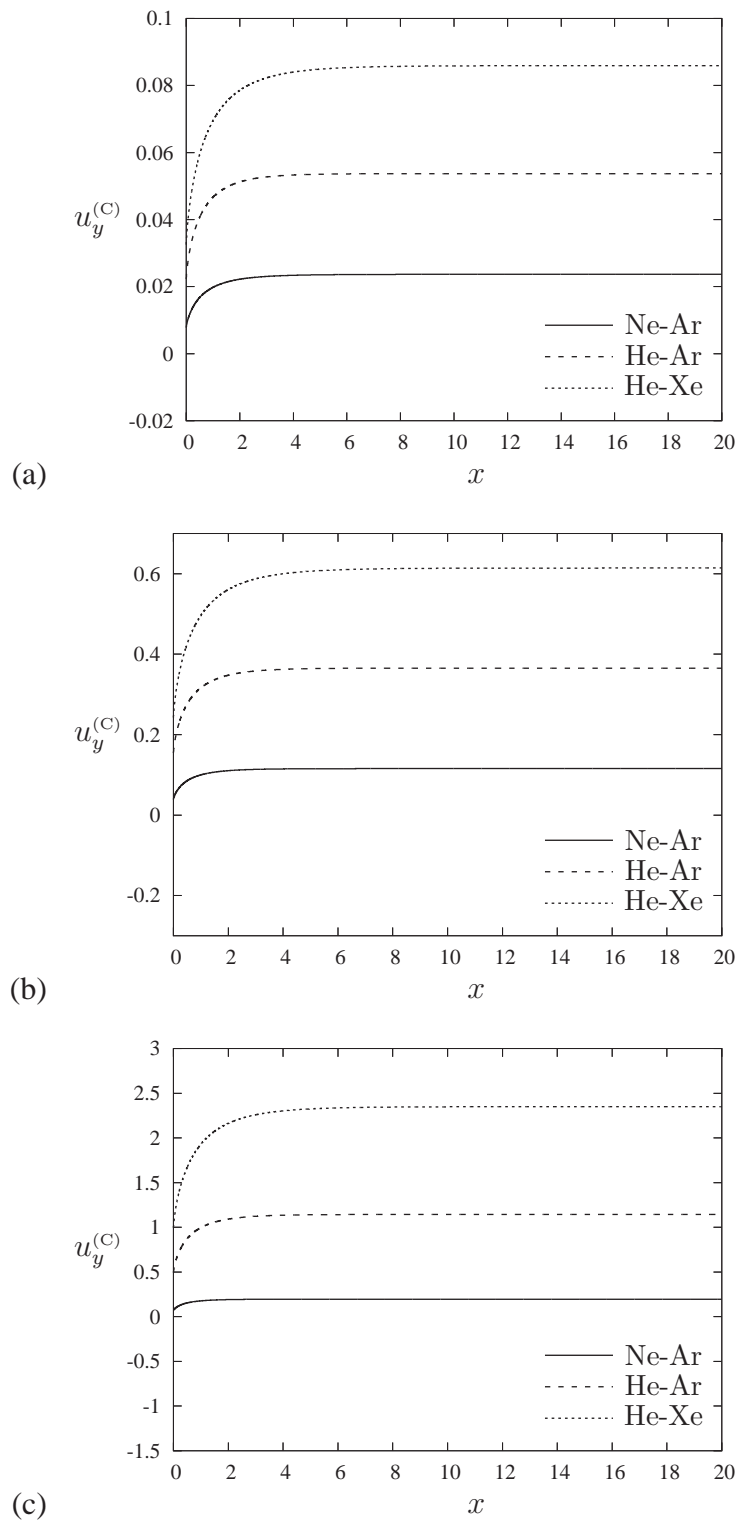


Figura 7.8: Perfil da velocidade $u_y^{(C)}$ em função da distância x normal à parede para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe com concentração: (a) $C_0 = 0.1$, (b) $C_0 = 0.5$ e (c) $C_0 = 0.9$

7.1.3 Coeficiente de deslizamento térmico

As Figuras 7.9, 7.10 e 7.11 mostram, respectivamente, o perfil do coeficiente de deslizamento térmico σ_T em função da concentração C_0 para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe para os dois potenciais de interação considerados: modelo de esferas-rígidas e potencial realístico.

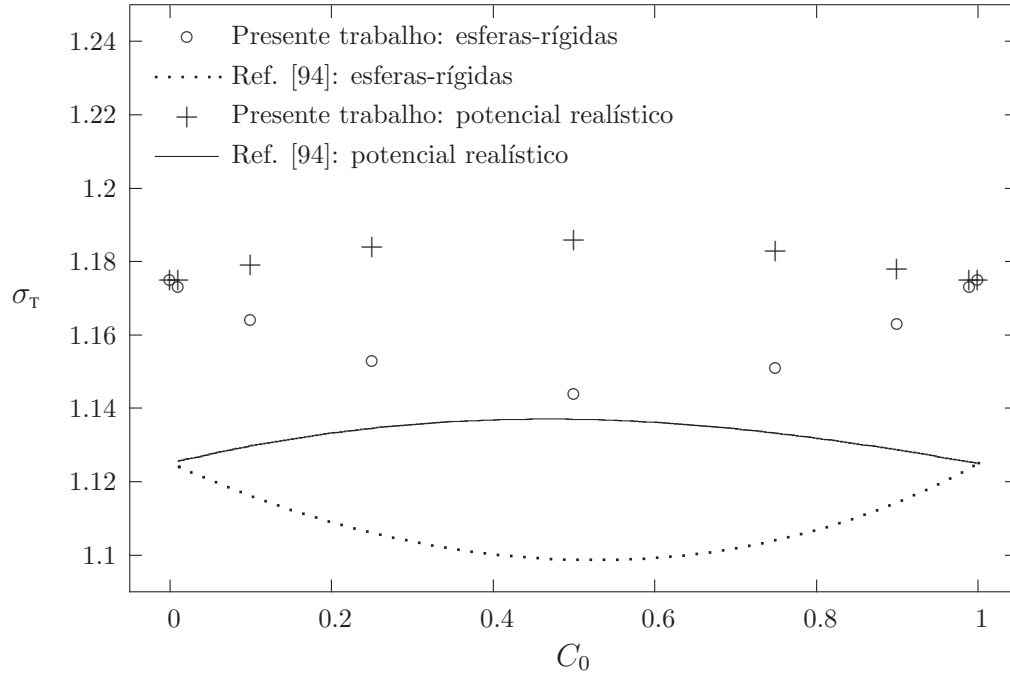


Figura 7.9: Coeficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração molar C_0 para a mistura Ne-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.

Dessas figuras podemos observar que:

- (i) Semelhante ao coeficiente de deslizamento viscoso, nos limites de um gás único, i.e. quando $C_0 = 0$ e $C_0 = 1$, o coeficiente de deslizamento térmico σ_T é exatamente igual ao obtido nas Refs. [50, 51] via modelo de Shakov assumindo espalhamento difuso das partículas na superfície sólida. Novamente este resultado já era esperado pois o modelo de McCormack tende ao modelo de Shakov nos limites de gás único.
- (ii) O coeficiente de deslizamento térmico σ_T é fortemente sensível ao potencial de interação entre as partículas. Essa sensibilidade ao potencial de interação é facilmente percebida pois o comportamento qualitativo desse coeficiente em função da concentração C_0 é totalmente diferente para ambos os potenciais. Quantitativamente, a máxima diferença entre os resultados obtidos para o modelo de esferas-rígidas e para potencial realístico atinge os valores 4%, 18% e 42% para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe (veja as tabelas B.5 e B.6 do Apêndice C). Portanto, quanto maior a razão entre as massas das espécies constituintes da mistura, m_2/m_1 , maior a sensibilidade do coeficiente de deslizamento térmico σ_T ao potencial de interação entre as partículas. Essa sensibilidade do coeficiente de deslizamento térmico ao potencial de interação foi previamente notada por Loyalka na Ref. [94].

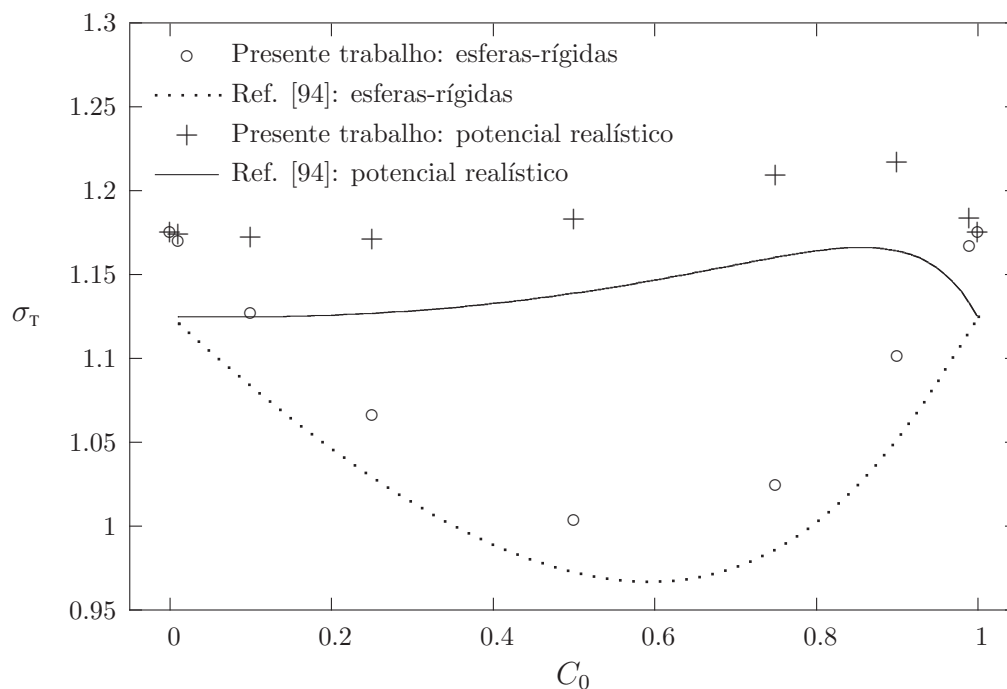


Figura 7.10: Coeficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração molar C_0 para a mistura He-Ar, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.

A pergunta que surge neste caso é a seguinte: quais resultados descrevem de forma correta o fenômeno de deslizamento térmico, os obtidos via modelo de esferas-rígidas ou os obtidos via potencial realístico? Para o modelo de esferas-rígidas, os diâmetros atômicos das espécies constituintes das misturas consideradas neste trabalho foram determinados através do uso de dados experimentais para a viscosidade de cada uma das espécies constituintes da mistura e, conseqüentemente, não há uma boa concordância entre os resultados obtidos para os outros coeficientes de transporte com os dados experimentais para estes coeficientes. Ao contrário, com o uso do potencial realístico obtemos valores para os coeficientes de transporte concordantes com os dados experimentais. Portanto, os resultados obtidos via potencial realístico são mais confiáveis e descrevem de forma correta o fenômeno de deslizamento térmico.

- (iii) Comparando os resultados obtidos no presente trabalho via equação cinética de McCormack com os obtidos na Ref. [94] via método dos momentos aplicado à equação de Boltzmann, observamos que o comportamento qualitativo do coeficiente de deslizamento térmico é o mesmo para ambos os métodos. Quantitativamente a máxima diferença entre os resultados obtidos através de métodos diferentes é de 5% (isso pode ser verificado através das Tabelas B.5 e B.6 do Apêndice C). Portanto, além da sensibilidade ao potencial de interação, o coeficiente de deslizamento térmico também é sensível ao método de solução.
- (iv) Para um valor fixo de concentração C_0 o coeficiente de deslizamento térmico σ_T aumenta à medida que o parâmetro m_2/m_1 aumenta. Para as três misturas consideradas, o coeficiente de deslizamento térmico varia no intervalo [1.171,1.592]. Para a mistura com maior

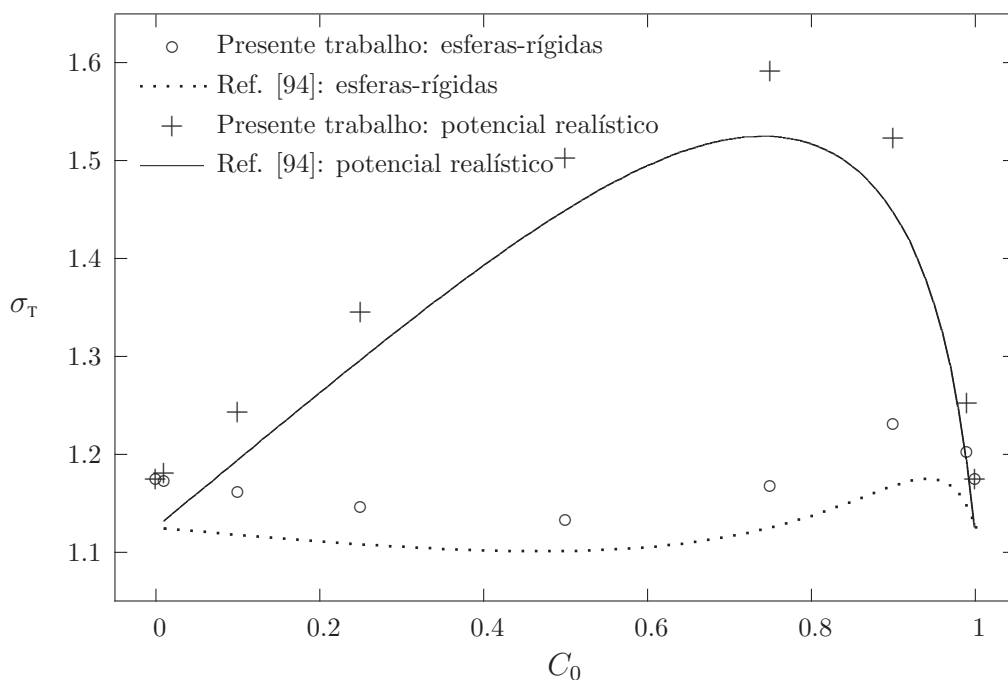


Figura 7.11: Coeficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração molar C_0 para a mistura He-Xe, modelo de esferas-rígidas e potencial realístico de interação.

parâmetro m_2/m_1 , i.e. He-Xe, uma pequena concentração da espécie pesada muda significativamente o valor de σ_T em relação aos valores limites para gás único. Como exemplo, na mistura de He-Xe com $C_0 = 0.99$, a quantidade de 1% de gás Xenônio muda em 7% o valor de σ_T em relação ao valor obtido para gás único.

Os resultados obtidos para o coeficiente de deslizamento térmico também foram comparados com os resultados obtidos na Ref. [65], na qual o coeficiente de deslizamento térmico foi determinado para misturas hipotéticas de gases rarefeitos via solução numérica da equação de Boltzmann com a integral de colisões exata e modelo de esferas-rígidas para a interação entre as partículas. Para realizar essa comparação a seguinte relação é utilizada:

$$\sigma_T = \left(\frac{kT_0}{\pi m_1} \right)^{1/2} \frac{m}{2\mu d_1^2} b_I, \quad (7.5)$$

onde σ_T é o coeficiente de deslizamento térmico definido no presente trabalho, b_I denota o coeficiente de deslizamento térmico definido na Ref. [65] e d_1 denota o diâmetro da espécie leve que constitui a mistura. A Tabela 7.8 apresenta a comparação entre os resultados obtidos neste trabalho com os obtidos na Ref. [65] para o coeficiente de deslizamento térmico.

Dessa tabela podemos verificar que a máxima diferença entre os resultados é aproximadamente 13%. Como nossos resultados foram obtidos através do uso de um modelo para a equação de Boltzmann essa diferença entre os resultados mostra que, frente ao esforço computacional necessário para resolver a equação de Boltzmann, é mais vantajoso utilizar o modelo de McCormack visto que este fornece resultados confiáveis com menos esforço computacional.

As Tabelas 7.9, 7.10 e 7.11 apresentam, respectivamente, os perfis das velocidades das espécies constituintes das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe para o caso de potencial realístico

Tabela 7.8: Coeficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração C_0 para misturas hipotéticas com razão entre as massas das espécies igual a m_2/m_1

C_0	σ_T					
	$m_2/m_1 = 2$		$m_2/m_1 = 5$		$m_2/m_1 = 10$	
	Presente	Ref. [65]	Presente	Ref. [65]	Presente	Ref. [65]
0.1	1.1486	1.0142	1.0994	0.9754	1.0923	0.9682
0.5	1.1013	0.9771	0.9420	0.8478	0.8842	0.7969
0.9	1.1466	1.0120	1.0643	0.9398	0.9970	0.8736

de interação entre as partículas gasosas. Dessas tabelas observamos que distante da superfície

Tabela 7.9: Perfil da velocidade dos constituintes da mistura Ne - Ar devido ao gradiente de temperatura, potencial realístico de interação

x	$C_0 = 0.1$		$C_0 = 0.5$		$C_0 = 0.9$	
	$u_1^{(T)}$	$u_2^{(T)}$	$u_1^{(T)}$	$u_2^{(T)}$	$u_1^{(T)}$	$u_2^{(T)}$
0.001	0.207	0.145	0.182	0.131	0.156	0.115
0.1	0.301	0.217	0.267	0.196	0.232	0.173
0.2	0.356	0.259	0.317	0.235	0.276	0.209
0.5	0.461	0.343	0.414	0.314	0.365	0.281
1.0	0.561	0.424	0.506	0.391	0.448	0.354
2.0	0.653	0.504	0.594	0.469	0.529	0.429
5.0	0.721	0.567	0.663	0.535	0.594	0.491
10.0	0.732	0.580	0.676	0.549	0.606	0.504
20.0	0.734	0.581	0.678	0.550	0.607	0.505

as velocidades das espécies tendem a um valor constante. A velocidade da espécie leve sempre é maior que a velocidade da espécie pesada e distante da superfície a diferença entre as velocidades é maior devido ao fenômeno de termo-difusão.

Para verificar se os valores para as velocidades das espécies constituintes das misturas em estudo estão corretos podemos utilizar a seguinte expressão obtida via método de Chapman-Enskog:

$$u_1^{(T)} - u_2^{(T)} = -\frac{\rho_0 D_{12} a_T}{2\mu}, \quad (7.6)$$

onde D_{12} , a_T e μ denotam, respectivamente, o coeficiente de difusão, fator de termo-difusão e viscosidade da mistura cujas expressões podem ser encontradas na Ref. [68]. Quando $m_1 < m_2$, o fator de termo-difusão a_T é negativo e, conseqüentemente, a diferença $u_1^{(T)} - u_2^{(T)}$ torna-se positiva.

O resultado obtido para a diferença $u_1^{(T)} - u_2^{(T)}$ via dados das Tabelas 7.9, 7.10 e 7.11 estão em excelente concordância com os resultados obtidos via expressão Eq. (7.6).

O comportamento não linear na velocidade hidrodinâmica $u_y^{(T)}$ das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe nas proximidades da superfície sólida pode ser visualizado na Figura 7.12.

Tabela 7.10: Perfil da velocidade dos constituintes da mistura He - Ar devido ao gradiente de temperatura, potencial realístico de interação

x	$C_0 = 0.1$		$C_0 = 0.5$		$C_0 = 0.9$	
	$u_1^{(T)}$	$u_2^{(T)}$	$u_1^{(T)}$	$u_2^{(T)}$	$u_1^{(T)}$	$u_2^{(T)}$
0.001	0.400	0.145	0.324	0.128	0.207	0.102
0.1	0.581	0.206	0.472	0.183	0.304	0.138
0.2	0.681	0.256	0.555	0.217	0.361	0.163
0.5	0.872	0.339	0.714	0.288	0.471	0.219
1.0	1.026	0.419	0.856	0.361	0.575	0.282
2.0	1.163	0.498	0.977	0.442	0.676	0.357
5.0	1.253	0.563	1.071	0.519	0.757	0.435
10.0	1.262	0.577	1.087	0.539	0.774	0.455
20.0	1.262	0.578	1.093	0.541	0.776	0.457

Tabela 7.11: Perfil da velocidade de cada constituinte da mistura He - Xe devido gradiente de temperatura, potencial realístico de interação.

x	$C_0 = 0.1$		$C_0 = 0.5$		$C_0 = 0.9$	
	$u_1^{(T)}$	$u_2^{(T)}$	$u_1^{(T)}$	$u_2^{(T)}$	$u_1^{(T)}$	$u_2^{(T)}$
0.001	0.770	0.150	0.625	0.154	0.343	0.138
0.1	1.096	0.221	0.896	0.214	0.485	0.177
0.2	1.274	0.264	1.048	0.252	0.573	0.204
0.5	1.629	0.349	1.318	0.335	0.740	0.268
1.0	1.926	0.433	1.589	0.426	0.907	0.346
2.0	2.163	0.518	1.825	0.533	1.066	0.449
5.0	2.311	0.594	1.994	0.657	1.204	0.578
10.0	2.311	0.612	2.028	0.702	1.237	0.621
20.0	2.311	0.616	2.028	0.712	1.242	0.629

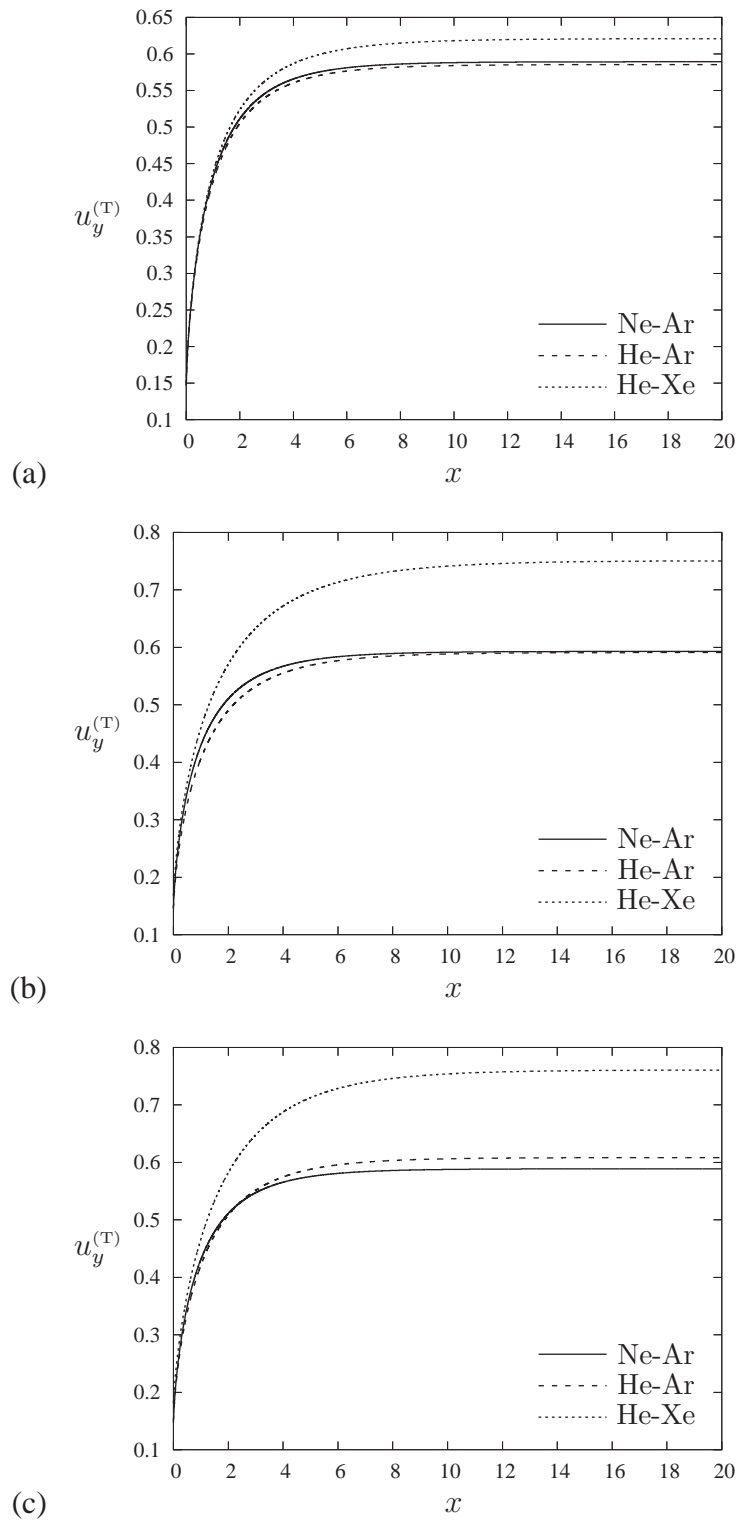


Figura 7.12: Perfil da velocidade $u_y^{(T)}$ em função da distância x normal à parede para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe com concentração: (a) $C_0 = 0.1$, (b) $C_0 = 0.5$, (c) $C_0 = 0.9$, potencial realístico de interação

7.2 Coeficientes cinéticos

Os coeficientes cinéticos foram calculados para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe considerando-se três valores de concentração, $C_0 = 0.1, 0.5$ e 0.9 , e potencial realístico [67] de interação entre as partículas.

No regime de moléculas livres os coeficientes cinéticos foram obtidos analiticamente via Eqs. (5.28)-(5.30).

No regime hidrodinâmico ($\delta \geq 40$) empregamos as Eqs. (5.43)-(5.47). Os valores dos coeficientes de deslizamento viscoso σ_p , difuso σ_c e térmico σ_T dados nas Tabelas B.1-B.6 e os dados da Tabela 7.12 foram utilizados.

Tabela 7.12: Quantidades utilizadas no cálculo dos coeficientes cinéticos via Eqs. (5.43)-(5.47).

Mistura	C_0	$\rho D_{12}/\mu$	$-\alpha_T$	$m\kappa/k\mu$
Ne-Ar	0.1	2.1474	0.1418	3.8279
	0.5	1.4922	0.1710	3.9705
	0.9	0.9512	0.2159	3.8318
He-Ar	0.1	4.8634	0.2829	4.3466
	0.5	2.8414	0.3865	5.9567
	0.9	1.0422	0.6140	5.0896
He-Xe	0.1	11.5015	0.2957	5.8508
	0.5	6.0606	0.4353	11.5972
	0.9	1.4903	0.8247	8.8435

No regime de transição ($0.001 \leq \delta < 40$) os coeficientes cinéticos foram obtidos numericamente via metodologia apresentada no Capítulo 6. O código numérico desenvolvido para calcular os coeficientes cinéticos no regime de transição foi testado através de uma comparação com os resultados obtidos na Ref.[24]. Nessa referência o método variacional é empregado para resolver a equação de Boltzmann e o parâmetro γ_α (relacionado à frequência de colisões entre as partículas, dado na Eq. (5.75)) é escolhido da mesma forma que na Ref. [39], ou seja,

$$\gamma_\alpha = \frac{8}{5}n_\alpha\Omega_{\alpha\alpha}^{(2,2)} + \frac{64}{15}n_\beta\frac{m_{\alpha\beta}^2}{m_\alpha m_\beta} \left[2\frac{m_{\alpha\beta}^2}{m_\alpha m_\beta}\Omega_{\alpha\beta}^{(2,2)} + \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha}\right)^2 \left(2\Omega_{\alpha\beta}^{(1,3)} - 10\Omega_{\alpha\beta}^{(1,2)} + \frac{25}{2}\Omega_{\alpha\beta}^{(1,1)} \right) + 5\left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_\beta}\right)^2 \Omega_{\alpha\beta}^{(1,1)} \right], \quad \alpha = 1, 2, \quad \beta \neq \alpha, \quad (7.7)$$

onde $\Omega_{\alpha\beta}^{(i,j)}$ são as integrais de Chapman-Cowling cujas expressões podem ser encontradas nas Refs. [68, 70].

Os resultados apresentados na Ref. [24] são dados em termos do parâmetro de rarefação da primeira espécie constituinte da mistura que é definido da seguinte forma:

$$\delta_1 = R \left(\frac{m_1}{2kT_0} \right)^{1/2} \gamma_1, \quad (7.8)$$

onde γ_1 é dado na Eq. (7.7). A Tabela 7.13 apresenta a comparação entre os resultados obtidos no presente trabalho e os obtidos na Ref. [24] para uma mistura de He-Ar com concentração

$C_0 = 0.5$, temperatura $T = 295$ K e potencial de interação de Lennard-Jones (6-12). O parâmetro γ_α dado na Eq. (7.7) foi utilizado.

Como em nosso código numérico utilizamos o parâmetro de rarefação δ da mistura, dado na Eq. (2.4), relacionamos os parâmetros δ e δ_1 tal que os valores $\delta_1 = 0.1, 1.0$ e 10.0 correspondem, respectivamente, aos valores $\delta = 0.2397, 2.397$ e 23.97 .

Tabela 7.13: Comparação dos resultados: mistura de He-Ar, $C_0 = 0.5$, potencial de Lennard-Jones (6-12) à $T=295$ K

	$\delta_1 = 0.1$ ($\delta = 0.2397$)		$\delta_1 = 1.0$ ($\delta = 2.397$)		$\delta_1 = 10.0$ ($\delta = 23.97$)	
	Presente	Ref. [24]	Presente	Ref. [24]	Presente	Ref. [24]
Λ_{pp}	2.0877	2.0866	2.1334	2.1306	7.2033	7.2122
$-\Lambda_{TP}$	0.8569	0.8562	0.3763	0.3733	0.0624	0.0618
Λ_{CP}	0.9879	0.9876	0.4194	0.4185	0.0576	0.0582
Λ_{TT}	4.0046	4.0021	1.6278	1.6280	0.2395	0.2395
$-\Lambda_{CT}$	0.4461	0.4461	0.1609	0.1582	0.0220	0.0220
Λ_{CC}	1.8499	1.8487	0.8030	0.8021	0.1141	0.1136

Deve ser notado que considerar δ_1 como um parâmetro de entrada nos cálculos numéricos é inconveniente pois δ_1 depende de γ_1 , o qual pode ser escolhido de forma arbitrária. Já a escolha de δ como um parâmetro de entrada é mais conveniente pois o parâmetro de rarefação da mistura δ está relacionado a quantidades macroscópicas mensuráveis.

Da Tabela 7.13 podemos observar que os resultados obtidos através de métodos diferentes estão em boa concordância. Para $\delta_1 = 0.1$ a diferença entre os resultados obtidos no presente trabalho e os obtidos na Ref. [24] é menor que 0.1%. Para $\delta_1 = 1.0$ a máxima diferença entre os resultados é menor que 2% e ocorre para o coeficiente Λ_{CT} . Para $\delta_1 = 10.0$ a máxima diferença entre os resultados é de 1% e ocorre para o coeficiente Λ_{CP} . Portanto, nosso código numérico fornece resultados em boa concordância com os resultados da Ref. [24].

Os coeficientes cinéticos dependem da escolha do parâmetro γ_α . Para verificar a sensibilidade dos coeficientes cinéticos à escolha desse parâmetro comparamos os resultados obtidos no presente trabalho para diferentes parâmetros γ_α . A Tabela 7.14 apresenta essa comparação para uma mistura de He-Ar com concentração $C_0 = 0.5$ e modelo de interação de esferas-rígidas. As equações (5.75) e (7.7) para o parâmetro γ_α foram utilizadas.

Tabela 7.14: Comparação entre os resultados obtidos com frequências de colisões diferentes: mistura de He-Ar, $C_0 = 0.5$, modelo de esferas-rígidas

	$\delta = 0.1$		$\delta = 1.0$		$\delta = 10.0$	
	Eq.(5.75)	Eq.(7.7)	Eq.(5.75)	Eq.(7.7)	Eq.(5.75)	Eq.(7.7)
Λ_{pp}	2.1360	2.1538	1.9612	1.9675	3.7762	3.7741
$-\Lambda_{TP}$	0.9537	0.9642	0.5680	0.5607	0.1308	0.1291
Λ_{CP}	1.0471	1.0736	0.6228	0.6305	0.1220	0.1208
Λ_{TT}	4.4053	4.4447	2.3961	2.3891	0.4571	0.4550
$-\Lambda_{CT}$	0.4989	0.5127	0.2988	0.2870	0.0599	0.0591
Λ_{CC}	2.0062	2.0233	1.1636	1.1664	0.2191	0.21990

Dessa tabela observa-se que para $\delta = 0.1$ a máxima diferença entre os resultados obtidos através de parâmetros γ_α diferentes é menor que 3% e ocorre para o coeficiente Λ_{CT} . Para $\delta = 1$ a máxima diferença entre os resultados é de aproximadamente 4% e também ocorre para o coeficiente Λ_{CT} . Para $\delta = 10$ a máxima diferença entre os resultados é menor que 1.5% e novamente ocorre para o coeficiente Λ_{CT} .

As Figuras 7.13, 7.14 e 7.15 mostram, respectivamente, o perfil dos coeficientes cinéticos das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe para as concentrações $C_0 = 0.1, 0.5, 0.9$ e potencial realístico de interação entre as partículas.

Dessas figuras podemos observar que:

- (i) Para as três misturas consideradas neste trabalho o coeficiente Λ_{pp} depende da concentração da mistura nos regimes de moléculas livres e transição. No regime hidrodinâmico não há dependência do coeficiente Λ_{pp} na concentração da mistura. À medida que a razão entre as massas das espécies constituintes da mistura (m_2/m_1) aumenta, a dependência do coeficiente Λ_{pp} na concentração C_0 tende a aumentar.
- (ii) Para os demais coeficientes cinéticos, à medida que o parâmetro de rarefação δ da mistura aumenta eles tendem a diminuir. Diferentemente do coeficiente Λ_{pp} , os demais coeficientes cinéticos dependem da concentração da mistura nos três regimes de escoamento (regimes de moléculas livres, transição e hidrodinâmico).
- (iii) O sinal negativo no coeficiente associado ao fenômeno de *creep* térmico, ou seja Λ_{PT} , indica que na ausência de gradientes de pressão e concentração a mistura tende a fluir do reservatório de menor temperatura para o de maior temperatura.

O fenômeno de *creep* térmico ocorre nas proximidades da parede e, de acordo com [46], o mecanismo físico para esse fluxo de massa é o seguinte: ao incidir com a parede, a velocidade média das partículas vindas das regiões mais quentes é maior do que a velocidade média das partículas vindas das regiões menos quentes. Consequentemente, ao incidir com a parede há transferência de momento do gás para a parede e a componente tangencial desse momento possui direção oposta ao gradiente de temperatura. Como reação a parede exerce uma força sob o gás na direção do gradiente de temperatura e, consequentemente, o gás se movimenta da região de menor temperatura para a região de maior temperatura.

- (iv) Outro sinal negativo aparece no coeficiente associado ao fenômeno de termo-difusão, ou seja Λ_{CT} . Este sinal negativo indica que, na ausência de gradientes de pressão e concentração, a mistura tende a fluir do reservatório de menor concentração para o reservatório de maior concentração. Esse fenômeno ocorre somente em misturas e é consequência do fenômeno de *creep* térmico. Quando a mistura flui da região de menor temperatura para a de maior temperatura a espécie leve se movimenta mais rapidamente que a espécie pesada e, consequentemente, a mistura tende a fluir para a região com maior concentração da espécie leve.
- (v) Os coeficientes Λ_{PC} , Λ_{PT} , Λ_{CC} , Λ_{CT} e Λ_{TT} apresentam os maiores valores para a mistura com maior parâmetro m_2/m_1 , ou seja, para a mistura de He-Xe.

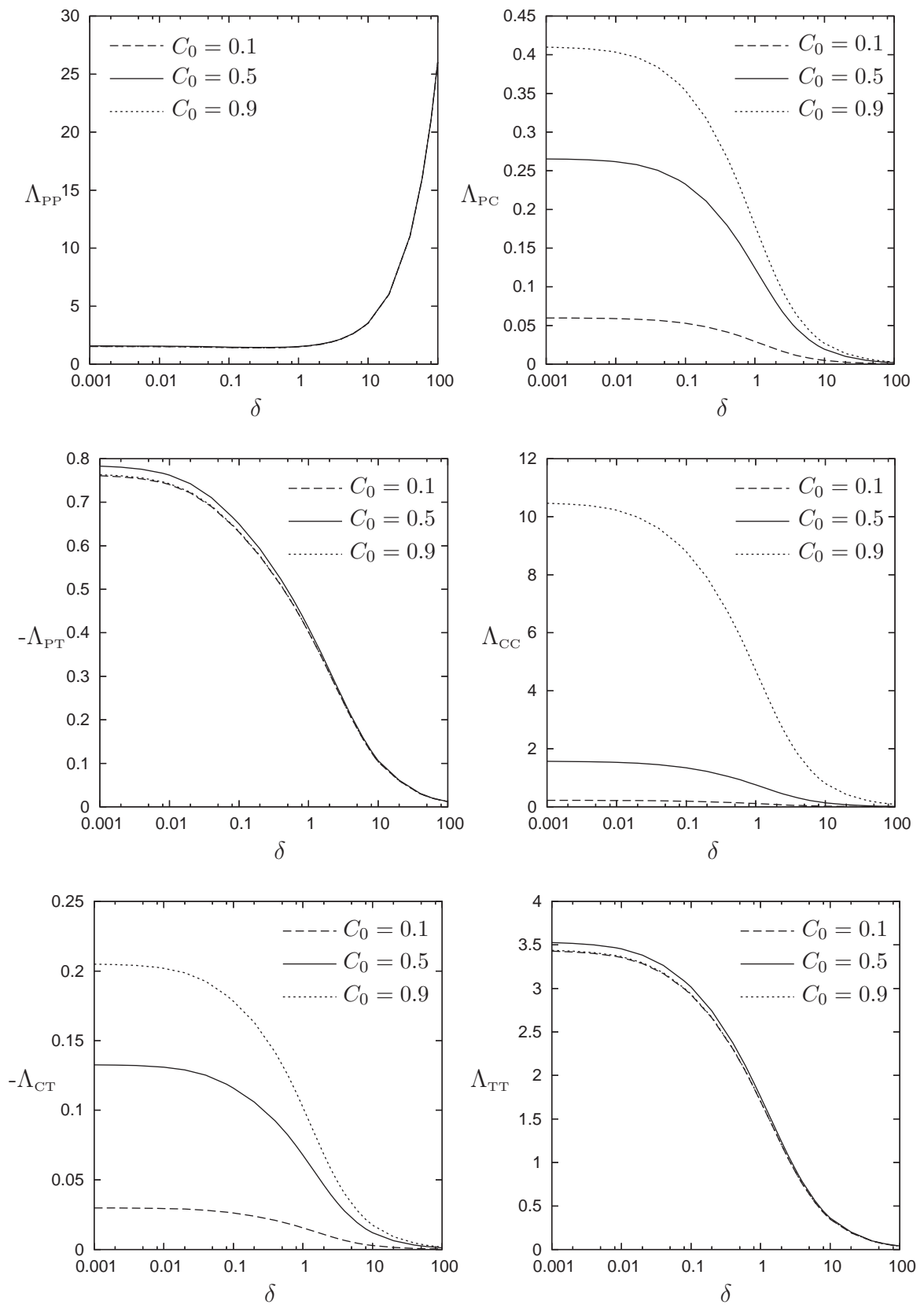


Figura 7.13: Perfil dos coeficientes cinéticos para a mistura Ne-Ar à temperatura de 300K e potencial realístico de interação

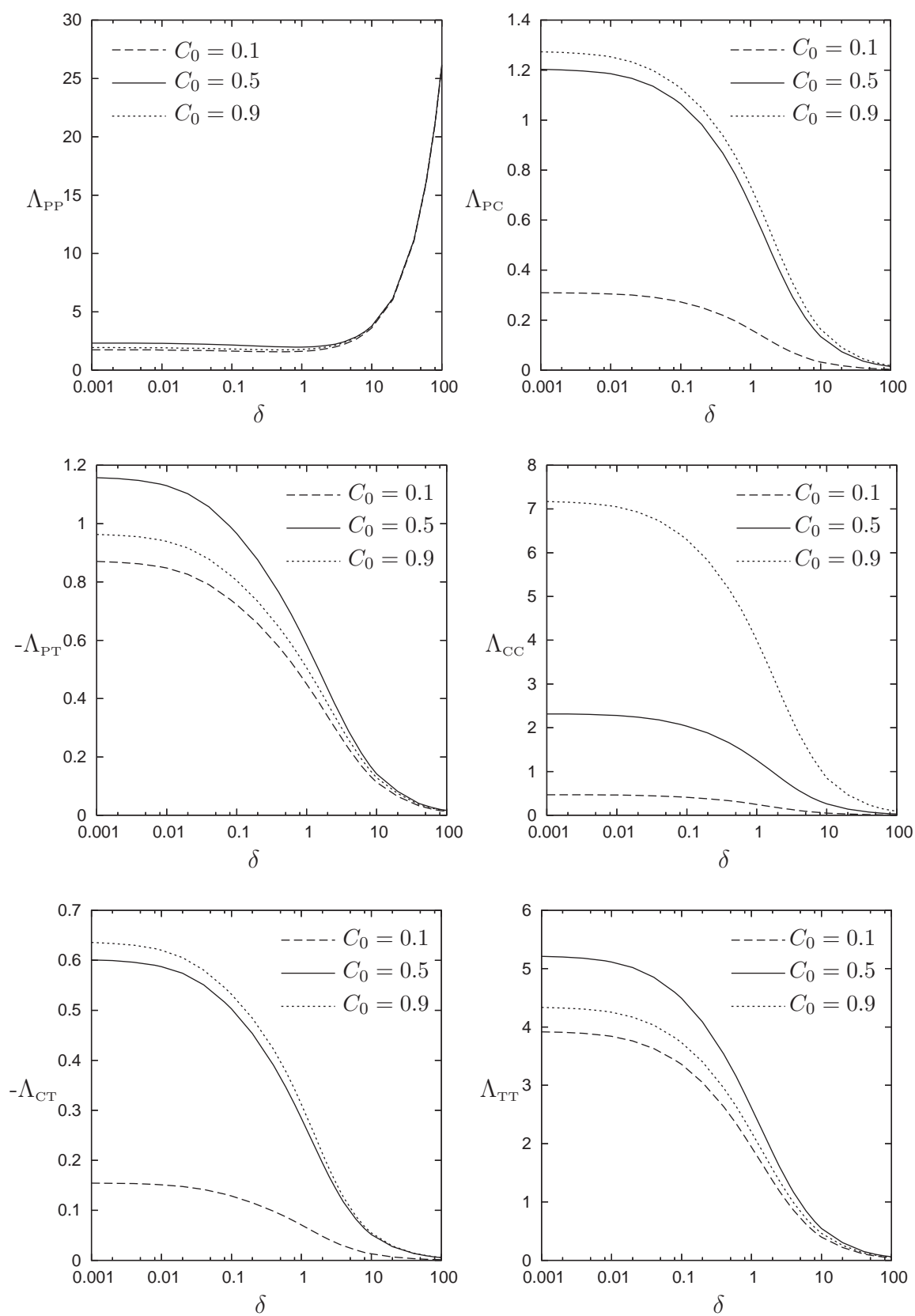


Figura 7.14: Perfil dos coeficientes cinéticos para a mistura He-Ar à temperatura de 300K e potencial realístico de interação

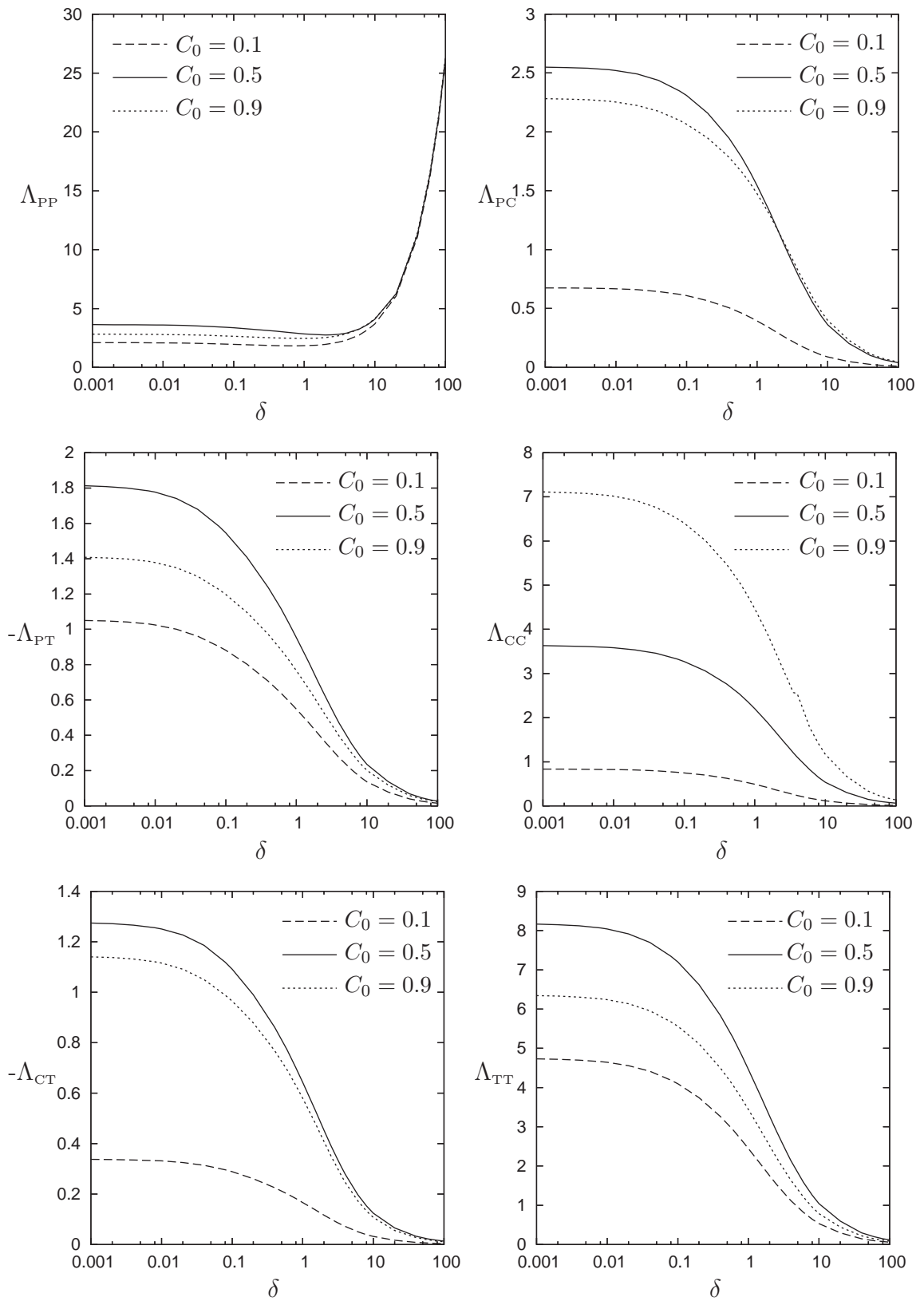


Figura 7.15: Coeficientes cinéticos para a mistura He-Xe à temperatura de 300K e potencial realístico de interação

As Figuras 7.16, 7.17 e 7.18 mostram os perfis das velocidades das espécies que constituem a mistura He-Ar com concentração $C_0 = 0.5$ causados, respectivamente, pelos gradientes de pressão, concentração e temperatura e para três valores de parâmetros de rarefação: $\delta = 0.1, 1$ e 40 .

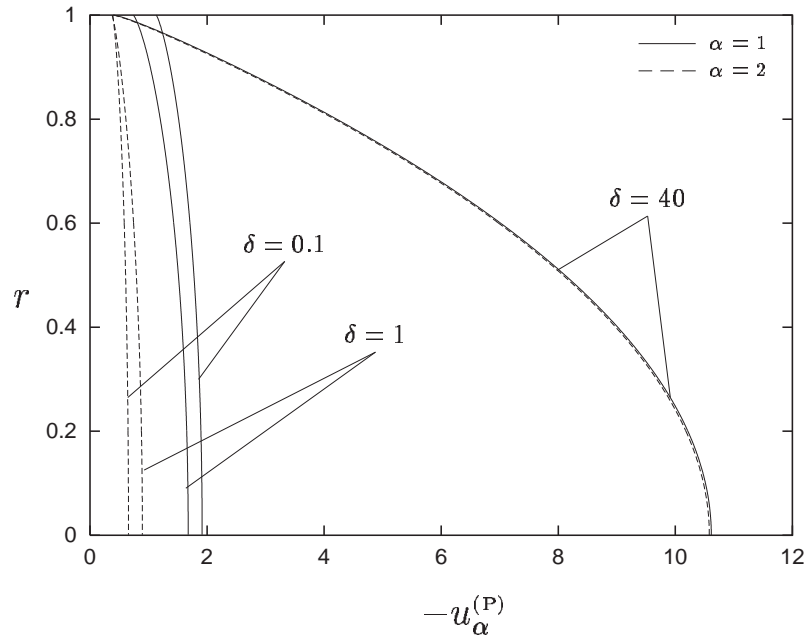


Figura 7.16: Perfil de velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração $C_0 = 0.5$ devido ao gradiente de pressão

Dessas figuras podemos observar que:

- (i) No regime hidrodinâmico ($\delta = 40$) os perfis de velocidade das espécies constituintes da mistura causados pelo gradiente de pressão, ou seja $u_\alpha^{(P)}$, são iguais e este perfil parabólico corresponde ao perfil obtido via solução da equação de Navier-Stokes com condição de contorno de deslizamento do gás na superfície sólida. Nos regimes de moléculas livres ($\delta = 0.1$) e transição ($\delta = 1$) as velocidades das espécies constituintes da mistura são diferentes e a espécie leve (neste caso, o gás Hélio) sempre possui velocidade maior.
- (ii) As velocidades das espécies constituintes da mistura causadas pelo gradiente de concentração, ou seja $u_\alpha^{(C)}$, possuem direções opostas e a espécie leve possui velocidade maior. À medida que o parâmetro de rarefação δ da mistura aumenta a diferença entre as velocidades das espécies tende a diminuir. No regime hidrodinâmico, embora a diferença $u_1^{(C)} - u_2^{(C)}$ seja pequena, a espécie leve continua com maior velocidade.
- (iii) As velocidades das espécies constituintes da mistura causadas pelo gradiente de temperatura, ou seja $u_\alpha^{(T)}$, possuem a mesma direção. A velocidade da espécie leve é sempre maior que a velocidade da espécie pesada mesmo no regime hidrodinâmico.

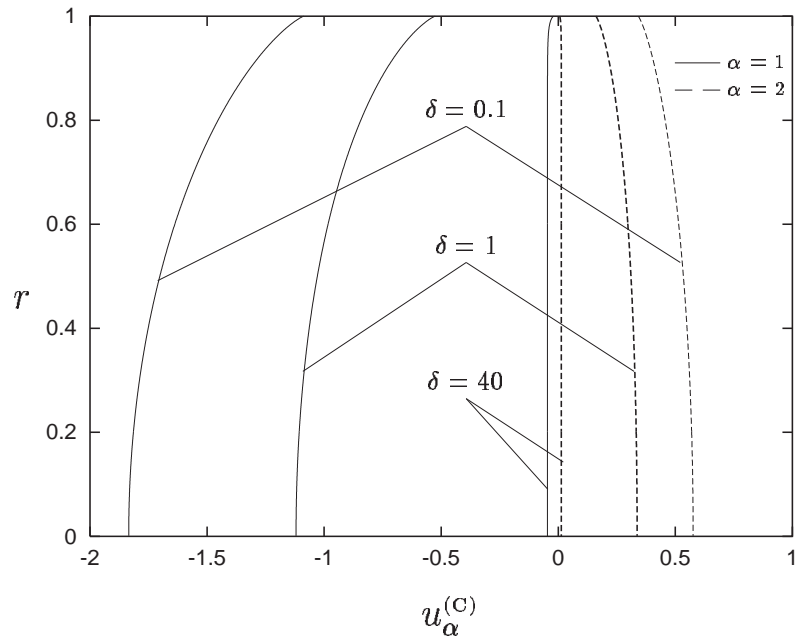


Figura 7.17: Perfil de velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração $C_0 = 0.5$ devido ao gradiente de concentração

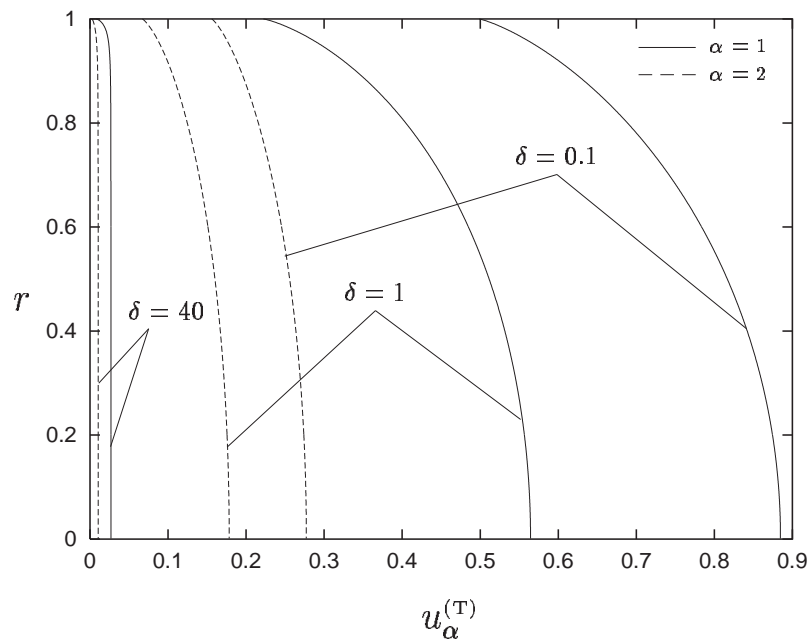


Figura 7.18: Perfil de velocidade dos constituintes da mistura He-Ar com concentração $C_0 = 0.5$ devido ao gradiente de temperatura

A análise do perfil da velocidade de cada espécie constituinte de uma mistura é muito importante do ponto de vista prático. Em situações tais como no escoamento de uma mistura de gases rarefeitos através de um longo tubo podemos determinar o perfil de concentração da mistura ao longo do tubo conhecendo a concentração da mistura na entrada do tubo e o perfil da velocidade de cada espécie constituinte da mistura.

CAPÍTULO 8

Conclusão

Um estudo dos fenômenos de transporte no escoamento de misturas binárias de gases rarefeitos monoatômicos através de um longo capilar cilíndrico foi realizado. Os coeficientes cinéticos determinantes dos fluxos de massa, calor e difusão foram calculados numericamente para três misturas de gases nobres (Neônio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio) nos três regimes de escoamento: regimes de moléculas livres, transição e hidrodinâmico. O ponto de partida para a determinação desses coeficientes foi a equação cinética de McCormack cuja solução foi obtida através do método determinístico de velocidades discretas assumindo-se a condição de contorno de espalhamento difuso das partículas gasosas na superfície sólida e um potencial realístico de interação entre as partículas.

No regime hidrodinâmico, visando diminuir o esforço computacional necessário nos cálculos numéricos, foi possível evitar a solução da equação cinética através da utilização da equação de Navier-Stokes com a condição de contorno de deslizamento da mistura na superfície sólida que a delimita. Essa condição de contorno é escrita em função dos coeficientes de deslizamento viscoso, difuso e térmico, os quais foram calculados numericamente para as três misturas citadas anteriormente em função da concentração molar. Uma análise da sensibilidade dos coeficientes de deslizamento ao potencial de interação entre as partículas foi realizada mostrando que existe dependência dos coeficientes de deslizamento térmico e difuso ao potencial de interação utilizado e que o modelo de esferas-rígidas deve ser evitado pois fornece resultados totalmente fora da realidade física (principalmente para o coeficiente de deslizamento térmico). A análise da influência do parâmetro m_2/m_1 nos coeficientes de deslizamento também foi realizada mostrando que a mistura com maior valor para esse parâmetro sempre possui os maiores valores para os coeficientes de deslizamento.

A análise do perfil dos coeficientes cinéticos em função do parâmetro de rarefação de cada uma das misturas em estudo mostrou que, nos regimes de moléculas livres e transição, todos os coeficientes cinéticos dependem da concentração da mistura. No regime hidrodinâmico o coeficiente associado ao fluxo de Poiseuille não depende da concentração da mistura. Para os outros coeficientes a dependência na concentração é pequena no regime hidrodinâmico.

Todos os resultados obtidos no presente trabalho foram publicados nas Refs. [30, 61, 62, 63, 64] e, juntamente com parte dos códigos numéricos elaborados, foram utilizados no desenvolvimento de outros trabalhos, vide Refs. [29, 31, 32], feitos em colaboração com os pesquisadores Valougeorgis e Naris do departamento de Mecânica e Engenharia Industrial da Universidade de Thessaly - Grécia. Parte do nosso código numérico também foi utilizado em colaboração com a professora Liliana M. G. Cumin do departamento de Matemática da UFPR no desenvolvimento de um trabalho relacionado ao estudo do fluxo de Couette de misturas

binárias de gases rarefeitos monoatômicos [114].

A metodologia utilizada para calcular os coeficientes de deslizamento juntamente com parte do código numérico elaborado para calcular o coeficiente de deslizamento térmico foram utilizados no desenvolvimento de um outro trabalho referente ao fenômeno de salto de temperatura na interface gás-sólido para misturas gasosas [115].

Projetos futuros

Os conhecimentos adquiridos durante a realização deste trabalho de mestrado podem ser futuramente aplicados no estudo de diversos problemas relacionados à Dinâmica de Gases Rarefeitos em fluxos de misturas gasosas. Como exemplos de tais problemas podemos citar o estudo dos fenômenos de transporte em:

- Fluxos de misturas de gases poliatômicos;
- Fluxos de misturas 2D e 3D;
- Fluxos não estacionários;
- Fluxo de Couette oscilatório;
- Fluxos através de capilares curtos;
- Fluxos não isotérmicos através de orifícios.

Atualmente iniciamos um trabalho de grande interesse prático, relacionado ao estudo do fenômeno de *separação de gases em sistemas de vácuo*, no qual os resultados obtidos no presente trabalho estão sendo utilizados. Posteriormente pretendemos estender nossos cálculos numéricos para o caso das misturas Trítio-Criptônio e Trítio-Deutério. O programa KATRIN¹ (KARlsruhe TRItium Neutrino experiment) possui interesse nos resultados obtidos nessa etapa pois nesse programa uma fonte de gás Trítio é utilizada e, devido à presença de impurezas tais como Deutério, o fenômeno de separação é de fundamental importância.

¹Maiores detalhes sobre o programa KATRIN podem ser encontrados em <http://www-ik1.fzk.de/tritium/>

REFERÊNCIAS

- [1] C Cercignani. *The Boltzmann Equation and its Application*. Springer, New York, 1988.
- [2] G A Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [3] Y Onishi. On the behaviour of a slightly rarefied gas mixture over plane boundaries. *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 37:573–596, 1986.
- [4] K Aoki, K Nishino, Y Sone, and H Sugimoto. Numerical analysis of steady flows of a gas condensing on of evaporating from its plane condensed phase on the basis of kinetic theory: effect of gas motion along the condensed phase. *Phys. Fluids A*, 3(9):2260–2275, 1991.
- [5] C S Yamamura. Escoamento supersônico de um gás rarefeito ao redor de uma esfera. Dissertação de Mestrado, Pós Graduação em Física, UFPR, <http://fisica.ufpr.br/sharipov/yamamura.pdf>, dezembro 2001.
- [6] F Sharipov. Direct simulation Monte Carlo method applied to aerothermodynamics. *J. Braz. Soc. Mechanical Sciences*, 23(4):441–452, 2001.
- [7] F Sharipov. Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice. *J. Fluid Mech.*, 518:35–60, 2004.
- [8] F Sharipov and V Seleznev. Data on internal rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 27(3):657–706, 1998.
- [9] C E Siewert. A discrete-ordinates solution for heat transfer in a plane channel. *J. Comp. Physics*, 152:251–263, 1999.
- [10] C E Siewert. Poiseuille and thermal-creep flow in cylindrical tube. *J. Comp. Physics*, 160:470–480, 2000.
- [11] C E Siewert and Valougeorgis D. An analytical discrete-ordinates solution of the S-model kinetic equation for flow in a cylindrical tube. *J. Quant. Spectr. Rad. Tran.*, 72:351–550, 2002.
- [12] C E Siewert. Poiseuille, thermal creep and couette flow: results based on the ces model for the linearized boltzmann equation. *Eur. J. Mech. B / Fluids*, 21:579–597, 2002.
- [13] L B Barichello and C E Siewert. A discrete-ordinates solution for poiseuille flow in a plane channel. *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 50:972–981, 1999.

- [14] H Shinagawa, H Setyawan, T Asai, Y Yuuichi, and K Okuyama. An experimental and theoretical investigation of rarefied gas flow through circular tube of finite length. *Chem. Eng. Sci.*, 57:4027–4036, 2002.
- [15] L B Barichello, M Camargo, P Rodrigues, and C E Siewert. An integral equation basic to the bgk model for flow in a cylindrical tube. *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 53:769–781, 2002.
- [16] F Sharipov. Rarefied gas flow through a long rectangular channel. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 17(5):3062–3066, 1999.
- [17] F Sharipov. Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels. *J. Micromech. Microeng.*, 9(4):394–401, 1999.
- [18] H Adzumi. Studies on the flow of gaseous mixture through capillaries. I. The viscosity of binary gaseous mixture. *Bull. Chem. Soc. Japan*, 12:199–226, 1937.
- [19] H Adzumi. Studies on the flow of gaseous mixture through capillaries. II. The molecular flow of gaseous mixture. *Bull. Chem. Soc. Japan*, 12:285–291, 1937.
- [20] H Adzumi. Studies on the flow of gaseous mixture through capillaries. III. The flow of gaseous mixture at medium pressure. *Bull. Chem. Soc. Japan*, 12:292–303, 1937.
- [21] C M Huang, R V Tompson, T K Ghosh, I N Ivchenko, and S K Loyalka. Measurements of thermal creep in binary gas mixtures. *Phys. Fluids*, 11:1662–1672, 1999.
- [22] V Zhdanov, Yu Kagan, and A Sazykin. Effect of viscous transfer of momentum on diffusion in a gas mixture. *Soviet Phys. JETP*, 15:596–602, 1962.
- [23] P E Suetin, S G Skakun, and V G Chernyak. The baroeffect at arbitrary Knudsen numbers. *Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki*, 42(3):642–646, 1972.
- [24] V G Chernyak. Flow of binary gas mixture through a cylindrical channel. *Zhurnal Prikladnoi Mekhaniki i Tekhnicheskoi Fiziki*, 5:50–58, 1982. [in Russian].
- [25] V G Chernyak, V V Kalinin, and P E Suetin. The kinetic phenomena in nonisothermal motion of a binary gas mixture through a plane channel. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 27(8):1189–1196, 1984.
- [26] V G Chernyak. *Boundary effects in rarefied gases at arbitrary Knudsen number*. PhD thesis, Ural State University, Ekaterinburg, Russia, 1986. [in Russian].
- [27] C E Siewert. Couette flow for a binary gas mixture. *J. Quant. Spectr. Rad. Tran.*, 70:321–332, 2001.
- [28] C Cercignani and F Sharipov. Gaseous mixture slit flow at intermediate Knudsen numbers. *Phys. Fluids A*, 4(6):1283–1289, 1992.
- [29] S Naris, D Valougeorgis, Sharipov F, and Kalempa D. Discrete velocity modelling of gaseous mixture flows in mems. In ??, editor, *Microscale heat transfer*, volume xx, pages xxx–xxx. Eurotherm 75, France - 2003, ???, 2003.

- [30] F Sharipov and D Kalempa. Gaseous mixture flow through a long tube at arbitrary knudsen number. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 20(3):814–822, 2002.
- [31] S Naris, D Valougeorgis, D Kalempa, and F Sharipov. Gaseous mixture flow between two parallel plates in the whole range of the gas rarefaction. *Physica A*, 336(3-4):294–318, 2004.
- [32] S Naris, D Valougeorgis, F Sharipov, and D Kalempa. Discrete velocity modelling of gaseous mixture flows in MEMS. *Superlattices and Microstructures*, 35:629–643, 2004.
- [33] C E Siewert and D Valougeorgis. The McCormack model: Channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and concentration gradients. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 23(4):645–664, 2004.
- [34] S R De Groot and P Mazur. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications, Inc., New York, 1984.
- [35] H B G Casimir. On Onsager’s principle of microscopic reversibility. *Rev. Mod. Phys.*, 17:343, 1945.
- [36] L Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. I. *Phys. Rev.*, 37:405–426, 1931.
- [37] L Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. II. *Phys. Rev.*, 38:2265–2279, 1931.
- [38] F Sharipov. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. III. Theory and its application for gaseous mixtures. *Physica A*, 209:457–476, 1994.
- [39] F J McCormack. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases. *Phys. Fluids*, 16:2095–2105, 1973.
- [40] F M Sharipov and E A Subbotin. On optimization of the discrete velocity method used in rarefied gas dynamics. *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 44:572–577, 1993.
- [41] Y Sone. Thermal creep in rarefied gas. *J. Phys. Soc. Jpn*, 21:1836–1837, 1966.
- [42] Y Sone. Flows induced by temperature fields in a rarefied gas and their ghost effect on the behavior of a gas in the continuum limit. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 32:779–811, 2000.
- [43] S K Loyalka. Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. i. *J. Chem. Phys.*, 55(9):4497–4503, 1971.
- [44] J C Maxwell. On stress in rarefied gases arising from inequalities of temperature. *Phil Trans. R. Soc. Lond.*, 1879.
- [45] J C Maxwell. On stress in rarefied gases arising from inequalities of temperature. In W D Niven, editor, *Scientific Papers of James Clerk Maxwell*, volume 2, pages 681–712. Dover Publications, Inc., New York, 1965.

- [46] E H Kennard. *Kinetic Theory of Gases*. McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1938.
- [47] J A Bentz, R V Thompson, and S K Loyalka. Measurements of viscosity, velocity slip coefficients, and tangential momentum accommodation coefficients using a modified spinning rotor gauge. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 19(1):317–324, 2001.
- [48] P Tekasakul, J A Bentz, R V Tompson, and S K Loyalka. The spinning rotor gauge: Measurements of viscosity, velocity slip coefficients, and tangential momentum accommodation coefficients. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 14(5):2946–2952, 1996.
- [49] C E Siewert and F Sharipov. Model equations in rarefied gas dynamics: Viscous-slip and thermal-slip coefficients. *Phys. Fluids*, 14(12):4123–4129, 2002.
- [50] F Sharipov. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. II. Slip and jump coefficients. *Eur. J. Mech. B / Fluids*, 22:133–143, 2003.
- [51] C E Siewert. Viscous-slip, thermal-slip and temperature-jump coefficients as defined by the linearized Boltzmann equation and the Cercignani-Lampis boundary condition. *Phys. Fluids*, 15(6):1696–1701, 2003.
- [52] M N Kogan. Kinetic theory in aerothermodynamics. *Prog. Aerospace Sci.*, 29:271–354, 1992.
- [53] J C Harley, Y Huang, H H Bau, and J N Zemel. Gas flow in micro-channels. *J. Fluid Mech.*, 284:257–274, 1995.
- [54] S Colin, C Aubert, and R Caen. Unsteady gaseous flows in rectangular microchannels: frequency response of one or two pneumatic lines connected in series. *Eur. J. Mech. B / Fluids*, 17(1):79–104, 1998.
- [55] J J Wleklinski. A calculation of gaseous slip velocity and microscale flow fields from a molecular-continuum matching analysis. *Physica A*, 291(1-4):197–210, 2001.
- [56] S Dushman. *Scientific Foundation of Vacuum Technique*. John Wiley & Sons, Inc, New York, 2 edition, 1962.
- [57] A Roth. *Vacuum Technology*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1976.
- [58] M Wutz, H Adam, and W Walcher. *Theory and Practice of Vacuum Technology*. Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1989.
- [59] F Sharipov. Data on the slip coefficients. In *Modeling and Simulation of Microsystems*, pages 570–574, Pleasanton, U.S.A., 2000. 3rd International Conference, San Diego (U.S.A.), Applied Computational Research Society.
- [60] C E Siewert and D Valougeorgis. Concise and accurate solutions to half-space binary-gas flow problems defined by the McCormack model and specular-diffuse wall conditions. *Eur. J. Mech. B/Fluid*, 23:709–726, 2004.

- [61] F Sharipov and D Kalempa. Slip coefficients for gaseous mixtures. In A Ketsdever and E P Muntz, editors, *Rarfeid Gas Dynamics*, volume 663, pages 164–169, Melville, 2003. 23rd Int. Symp., Canada, 2002, American Institute of Physics.
- [62] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. III. Diffusion slip coefficient. *Phys. Fluids*, 16(10):3779–3785, 2004.
- [63] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous slip coefficient. *Phys. Fluids*, 15(6):1800–1806, 2003.
- [64] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. II. Thermal slip coefficient. *Phys. Fluids*, 16(3):759–764, 2004.
- [65] S Takata, S Yasuda, S Kosuge, and K Aoki. Numerical analysis of thermal-slip and diffusion-slip flows of a binary mixture of hard-sphere molecular gases. *Phys. Fluids*, 15:3745–3766, 2003.
- [66] K Aoki, C Bardos, and S Takata. Knudsen layer for gas mixtures. *J. Stat. Phys.*, 112(3-4):629–655, 2003.
- [67] J Kestin, K Knierim, E A Mason, B Najafi, S T Ro, and M Waldman. Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixture at low densities. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 13(1):229–303, 1984.
- [68] J H Ferziger and H G Kaper. *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [69] C Cercignani. *Theory and Application of the Boltzmann Equation*. Scottish Academic Press, Edinburgh, 1975.
- [70] S Chapman and T G Cowling. *The mathematical theory of non-uniform gases*. University Press, Cambridge, 1952.
- [71] C Cercignani. *Rarefied Gas Dynamics. From Basic Concepts to Actual Calculations*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [72] M N Kogan. *Rarefied Gas Dynamics*. Plenum, New York, 1969.
- [73] F Sharipov. Heat transfer in the knudsen layer. *Phys. Rev. E*, 69(6):061201, 2004.
- [74] P L Bhatnagar, E P Gross, and M A Krook. A model for collision processes in gases. *Phys. Rev.*, 94:511–525, 1954.
- [75] E M Shakhov. *Method of Investigation of Rarefied Gas Flows*. Nauka, Moscow, 1974. [in Russian].
- [76] R.G. McClury and T.W. Adair III. Thermomagnetic torque in deuterium gas. *J. Chem. Phys.*, 54:1678–1682, 1971.
- [77] L Sirovich. Kinetic modeling of gas mixture. *Phys. Fluids*, 5(8):908–918, 1962.

- [78] T F Morse. Kinetic model equations for a gas mixture. *Phys. Fluids*, 7(12):2012–2013, 1964.
- [79] B B Hamel. Kinetic model for binary gas mixture. *Phys. Fluids*, 8(3):418–425, 1965.
- [80] V Garzó, A Santos, and J J Brey. A kinetic model for a multicomponent gas. *Phys. Fluids A*, 1(2):380–383, 1989.
- [81] V Garzó and M Lopez de Haro. Kinetic models for diffusion in shear flow. *Phys. Fluids A*, 4(5):1057–1069, 1992.
- [82] C Marin and V Garzó. Kinetic model for momentum transport in a binary mixture. In C Shen, editor, *Rarefied Gas Dynamics*, pages 91–96, Beijing, 1997. 20st Int. Symp., China, 1996, Pekin University Press.
- [83] Yu N Grigoryev and S V Meleshko. Bobylev-Krook-Wu models for multicomponent gas mixture. *Physical Review Letters*, 81(1):93–95, 1998.
- [84] Y Onishi. Kinetic theory analysis for temperature and density fields of a slightly rarefied binary gas mixture over a solid wall. *Phys. Fluids*, 9(1):226–238, 1997.
- [85] S Takata. Diffusion slip for a binary mixture of hard-sphere molecular gases: Numerical analysis based on the linearized Boltzmann equation. In T J Bartel and M A Gallis, editors, *Rarefied Gas Dynamics*, volume 585, pages 22–29, New York, 2001. 22nd Int. Symp., AIP Conference Proc.
- [86] C Cercignani and M Lampis. Kinetic model for gas-surface interaction. *Transp. Theory and Stat. Phys.*, 1:101–114, 1971.
- [87] B T Porodnov, P E Suetin, S F Borisov, and V D Akinshin. Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *J. Fluid Mech.*, 64(3):417–437, 1974.
- [88] B T Porodnov, A N Kulev, and F T Tukhvetov. Thermal transpiration in a circular capillary with a small temperature difference. *J. Fluid Mech.*, 88(4):609–622, 1978.
- [89] H A Kramers and J Kistemaker. On the slip of a diffusion gas mixture along a wall. *Physica*, 10:699, 1943.
- [90] J R Brock. Forces on aerosols in gas mixtures. *J. Colloid. Sci.*, 18:489–501, 1963.
- [91] H Z Zhao. The numerical solution of gaseous slip flows in microtubes. *Int. Commun. Heat Mass*, 28(4):585–594, 2001.
- [92] E B Arkilic, M A Schmidt, and K S Breuer. Gaseous slip flow in long microchannels. *J. Microelectromech. S.*, 6(2):167–178, 1997.
- [93] J Maurer, P Tabeling, P Joseph, and Willaime H. Second-order slip laws in microchannels for helium and nitrogen. *Phys. Fluids*, 15(9):2613–2621, 2003.
- [94] I N Ivchenko, S K Loyalka, and R V Tompson. Slip coefficients for binary gas mixture. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 15(4):2375–2381, 1997.

- [95] I N Ivchenko, S K Loyalka, and R V Tompson. Boundary slip phenomena in a binary gas mixture. *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 53(1):58–72, 2002.
- [96] V M Zhdanov and V I Roldughin. On non-equilibrium thermodynamics of weak rarefied gaseous mixture. *Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki*, 109:1267–1287, 1996. [in Russian].
- [97] V M Zhdanov. Theory of slip at the boundary of a gaseous mixture. *Sov. Phys. Tech. Phys.*, 12(1):134–137, 1967.
- [98] H Lang and S K Loyalka. Diffusion slip velocity - theory and experiment. *Z. Naturforsch Part A - Astrophysik, Physik und Physikalische Chemie*, A27:1307–1319, 1972.
- [99] H Lang and S K Loyalka. An exact expression for the diffusion slip velocity in a binary gas mixture. *Phys. Fluids*, 13(7):1871–1873, 1970.
- [100] Y I Yalamov, A A Yushkanov, and Savkov S A. Boundary conditions for the slippage of binary mixture of gases and their application in the dynamics of aerosols. 1. flow of a mixture of gases along a solid plane wall. *J. Eng. Phys. Thermophys.*, 66:367, 1994.
- [101] L H Shendalman. Low-speed transport of gas mixture in long cylindrical tubes according to the bgk model. *J. Chem. Phys.*, 51(6):2483–2489, 1969.
- [102] Y Onishi. On the diffusion-slip flow of a binary gas mixture over a plane wall with imperfect accomodation. *Fluid Dynam.Res.*, 2(1):35–46, 1987.
- [103] F Sharipov and V Seleznev. Rarefied gas flow through a long tube at any pressure ratio. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 12(5):2933–2935, 1994.
- [104] F Sharipov. Rarefied gas flow through a long tube at any temperature difference. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 14(4):2627–2635, 1996.
- [105] A M Bishaev and V A Rykov. On Onsager’s symmetry relation in linear problem of a rarefied gas flow past a thermal conductive body. *Izvestia AN SSSR, Mekhanika Zhidkosti i Gaza*, none(6):140–146, 1983. [in Russian].
- [106] A M Bishaev and V A Rykov. H-theorem and Onsager’s principal for the stationary Boltzmann equation. *Zhurnal Vych. Mat. i Mat. Fizicheskii*, 23:954–964, 1983. [in Russian].
- [107] A M Bishaev and V A Rykov. On symmetry of Onsager’s kinetic coefficients in rarefied gas. *Izv. AN SSSR, Mek. Zhid i Gasa.*, none(6):106–112, 1984.
- [108] F Sharipov. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. I. General theory for single gas. *Physica A*, 203:437–456, 1994.
- [109] F Sharipov. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. II. Application of the theory for single gas. *Physica A*, 203:457–485, 1994.
- [110] F Sharipov. Onsager-Casimir reciprocity relations for a mixture of rarefied gases interacting with a laser radiation. *J. Stat. Phys.*, 78(1/2):413–430, 1995.

- [111] F Sharipov. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. IV Rotating systems. *Physica A*, 260(3/5):499–509, 1998.
- [112] L D Landau and E M Lifshitz. *Fluid Mechanics*. Pergamon, New York, 1989.
- [113] R B Bird, W E Stewart, and E N Lightfoot. *Transport phenomena*. John Wiley & Sons, New York, 1960.
- [114] F Sharipov, L M G Cumin, and D Kalempa. Plane couette flow of binary gaseous mixture in the whole range of the knudsen number. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 23:899–906, 2004.
- [115] F Sharipov and D Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. IV. Temperature jump coefficient. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 48:1076–1083, 2005.
- [116] C L Pekeris. Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 41:661–669, 1955.
- [117] C L Pekeris and Z Alterman. Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation. II. The coefficients of viscosity and heat conduction. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 43:998–1007, 1957.

APÊNDICE A

Modelo de McCormack

O modelo proposto por McCormack para a integral de colisões consiste em expandí-la num polinômio da velocidade adimensional \mathbf{c}_α do seguinte modo:

$$\hat{L}_{\alpha\beta} h_\alpha = -\gamma_{\alpha\beta} h_\alpha + \mathcal{A} + \mathcal{A}_k c_{\alpha k} + \mathcal{B}_{kl} c_{\alpha k} c_{\alpha l} + \mathcal{D}_k c_{\alpha k} c_\alpha^2, \quad (\text{A.1})$$

onde os coeficientes denotados por \mathcal{A} , \mathcal{A}_k , \mathcal{B}_{kl} e \mathcal{D}_k são funções dos momentos da função de distribuição das velocidades moleculares (densidade, velocidade hidrodinâmica, temperatura, tensor pressão e vetor fluxo de calor). Estes coeficientes são encontrados através da seguinte igualdade:

$$\int Q_\alpha(\mathbf{c}_\alpha) \hat{L}_{\alpha\beta}^{\text{exato}}(\mathbf{c}_\alpha) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha = \int Q_\alpha(\mathbf{c}_\alpha) \hat{L}_{\alpha\beta}^{\text{modelo}}(\mathbf{c}_\alpha) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (\text{A.2})$$

onde $\hat{L}_{\alpha\beta}^{\text{modelo}}$ é dado na Eq. (A.1), $\hat{L}_{\alpha\beta}^{\text{exato}}$ é a integral de colisões na forma exata cuja expressão pode ser encontrada na Ref. [68] e

$$Q_\alpha = 1, \quad c_{\alpha i}, \quad \frac{1}{2} c_\alpha^2, \quad c_{\alpha i} c_{\alpha j}, \quad \frac{1}{2} c_{\alpha i} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right). \quad (\text{A.3})$$

Para o problema sob consideração a integral de colisões de McCormack é reescrita como:

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

onde os momentos dimensionais da função de distribuição são escritos do seguinte modo:

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

$$q_{\alpha i} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\frac{m}{m_\alpha} \right)^{1/2} \int c_{\alpha i} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right) h_\alpha(x, \mathbf{c}_\alpha) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (\text{A.6})$$

$$\Pi_{\alpha ij} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_{\alpha i} c_{\alpha j} h_{\alpha}(x, \mathbf{c}_{\alpha}) \exp(-c_{\alpha}^2) d\mathbf{c}_{\alpha}. \quad (\text{A.7})$$

A dependência do modelo de McCormack ao potencial de interação intermolecular aparece nas seguintes quantidades:

$$\nu_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha\beta}}{m_{\alpha}} n_{\beta} \Omega_{\alpha\beta}^{(11)}, \quad (\text{A.8})$$

$$\nu_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_{\alpha}} \right)^2 n_{\beta} \left(\Omega_{\alpha\beta}^{(12)} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{(22)} \right), \quad (\text{A.9})$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \nu_{\alpha\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m_{\alpha}} \right)^3 \left(\frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} \right)^{3/2} n_{\beta} \left[-\Omega_{\alpha\beta}^{(22)} + \frac{55}{8} \Omega_{\alpha\beta}^{(11)} - \frac{5}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{(12)} \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \Omega_{\alpha\beta}^{(13)} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

onde

$$m_{\alpha\beta} = \frac{m_{\alpha} m_{\beta}}{m_{\alpha} + m_{\beta}} \quad (\text{A.14})$$

denota a massa reduzida e $\Omega_{\alpha\beta}^{(ij)}$ são as integrais de Chapman-Cowling [70] as quais dependem do potencial de interação intermolecular. As integrais de Chapman-Cowling são definidas da seguinte forma:

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(ij)} = \left(\frac{kT}{2\pi m_{\alpha\beta}} \right)^{1/2} \int_0^{\infty} \int_{\Omega} \exp(-g^2) g^{2j+3} (1 - \cos^i \theta) \sigma_{\alpha\beta} d\Omega dg, \quad (\text{A.15})$$

onde

$$g = \left(\frac{m_{\alpha\beta}}{m} \right)^{1/2} |\mathbf{c}_{\alpha} - \mathbf{c}_{\beta}|, \quad (\text{A.16})$$

$\sigma_{\alpha\beta}$ denota a seção diferencial de espalhamento para colisões entre partículas das espécies α e β com velocidade relativa no interior de um ângulo sólido $d\Omega$.

Para o modelo de esferas-rígidas as integrais de Chapman-Cowling são escritas como:

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(ij)} = \frac{(i+j)!}{2} \left[1 - \frac{1+(-1)^i}{2(i+1)} \right] \left(\frac{\pi kT}{2m_{\alpha\beta}} \right)^{1/2} \sigma_{\alpha\beta}^2, \quad (\text{A.17})$$

onde $\sigma_{\alpha\beta}$ é a seção diferencial de choque que para esferas-rígidas é dada por:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{(D_\alpha + D_\beta)^2}{4}, \quad (\text{A.18})$$

onde D_α denota o diâmetro da espécie α .

Os diâmetros D_α são calculados através do uso da expressão

$$\mu_\alpha = 1.016034 \frac{5}{16} \frac{\sqrt{m_\alpha kT}}{\sqrt{\pi} D_\alpha^2} \quad (\text{A.19})$$

obtida da equação de Boltzmann [116, 117]. Os dados experimentais para a viscosidade μ_α dos gases He, Ne, Ar e Xe à temperatura de 300 K dados na Ref. [67] foram utilizados.

Na Ref. [67] as integrais de Chapman-Cowling são expressas em função de parâmetros obtidos experimentalmente para um potencial realístico de interação intermolecular, $\sigma_{\alpha\beta}$ é tabelado para todas as possíveis misturas de gases nobres.

O parâmetro $\gamma_{\alpha\beta}$ é proporcional à frequência de colisões entre as espécies α e β e no presente trabalho necessitamos apenas das combinações:

$$\gamma_1 = \gamma_{11} + \gamma_{12}, \quad \gamma_2 = \gamma_{21} + \gamma_{22}. \quad (\text{A.20})$$

Temos liberdade na escolha dos parâmetros γ_1 e γ_2 pois os coeficientes de transporte não dependem desses parâmetros.

APÊNDICE B

Resultados numéricos

B.1 Coeficientes de deslizamento

As Tabelas B.1 a B.6 apresentam os resultados numéricos obtidos no presente trabalho para os coeficientes de deslizamento viscoso, difuso e térmico das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe à temperatura de 300 Kelvin para ambos os potenciais de interação considerados: esferas-rígidas e potencial real [67]. Essas tabelas também apresentam os resultados obtidos para os coeficientes de deslizamento via expressões dadas na Ref. [94].

Tabela B.1: Coeficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração C_0 , modelo de esferas-rígidas

C_0	σ_p					
	Ne-Ar		He-Ar		He-Xe	
	Presente	Ref. [94]	Presente	Ref.[94]	Presente	Ref. [94]
0.0	1.018	1.007	1.018	1.007	1.018	1.007
0.01	1.019	1.008	1.021	1.010	1.022	1.011
0.1	1.024	1.013	1.044	1.033	1.057	1.045
0.25	1.032	1.021	1.084	1.073	1.122	1.110
0.5	1.040	1.028	1.151	1.140	1.253	1.241
0.75	1.037	1.025	1.193	1.182	1.402	1.389
0.9	1.028	1.017	1.154	1.143	1.413	1.400
0.99	1.019	1.008	1.041	1.029	1.116	1.104
1.0	1.018	1.007	1.018	1.007	1.018	1.007

Tabela B.2: Coeficiente de deslizamento viscoso σ_p vs concentração C_0 , potencial realístico de interação.

C_0	σ_p					
	Ne-Ar		He-Ar		He-Xe	
	Presente	Ref. [94]	Presente	Ref.[94]	Presente	Ref. [94]
0.0	1.018	1.007	1.018	1.007	1.018	1.007
0.01	1.019	1.008	1.021	1.010	1.023	1.012
0.1	1.026	1.014	1.045	1.034	1.064	1.052
0.25	1.034	1.022	1.086	1.074	1.137	1.124
0.5	1.040	1.028	1.152	1.140	1.271	1.256
0.75	1.036	1.024	1.191	1.179	1.404	1.389
0.9	1.027	1.016	1.153	1.142	1.414	1.400
0.99	1.019	1.008	1.041	1.030	1.125	1.112
1.0	1.018	1.007	1.018	1.007	1.018	1.007

Tabela B.3: Coeficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração C_0 , modelo de esferas-rígidas

C_0	σ_c					
	Ne-Ar		He-Ar		He-Xe	
	Presente	Ref. [94]	Presente	Ref.[94]	Presente	Ref. [94]
0.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.01	0.005	0.005	0.010	0.010	0.016	0.016
0.1	0.047	0.046	0.107	0.107	0.172	0.171
0.25	0.118	0.115	0.297	0.296	0.483	0.479
0.5	0.231	0.226	0.731	0.729	1.228	1.219
0.75	0.335	0.327	1.468	1.466	2.654	2.643
0.9	0.391	0.382	2.288	2.291	4.699	4.703
0.99	0.421	0.411	3.139	3.146	8.018	8.041
1.0	0.424	0.414	3.264	3.272	8.700	8.722

Tabela B.4: Coeficiente de deslizamento difuso σ_c vs concentração C_0 , potencial realístico de interação

C_0	σ_c					
	Ne-Ar		He-Ar		He-Xe	
	Presente	Ref. [94]	Presente	Ref.[94]	Presente	Ref. [94]
0.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.01	0.006	0.006	0.013	0.013	0.024	0.024
0.1	0.062	0.060	0.134	0.133	0.253	0.248
0.25	0.152	0.147	0.363	0.360	0.690	0.676
0.5	0.291	0.281	0.862	0.856	1.646	1.616
0.75	0.416	0.404	1.681	1.680	3.281	3.255
0.9	0.486	0.473	2.628	2.637	5.612	5.637
0.99	0.526	0.513	3.708	3.728	10.210	10.291
1.0	0.530	0.518	3.879	3.899	11.355	11.434

Tabela B.5: Coeficiente de deslizamento térmico σ_T da mistura vs concentração C_0 , modelo de esferas-rígidas

C_0	σ_T					
	Ne-Ar		He-Ar		He-Xe	
	Presente	Ref.[94]	Presente	Ref.[94]	Presente	[94]
0.0	1.175	1.125	1.175	1.125	1.175	1.125
0.01	1.173	1.124	1.170	1.121	1.173	1.124
0.1	1.164	1.116	1.127	1.083	1.162	1.118
0.25	1.153	1.106	1.066	1.029	1.146	1.108
0.5	1.144	1.099	1.004	0.972	1.133	1.101
0.75	1.151	1.104	1.025	0.986	1.168	1.125
0.9	1.163	1.114	1.101	1.053	1.231	1.168
0.99	1.173	1.124	1.167	1.117	1.202	1.146
1.0	1.175	1.125	1.175	1.125	1.175	1.125

Tabela B.6: Coeficiente de deslizamento térmico σ_T vs concentração C_0 , potencial realístico

C_0	σ_T					
	Ne-Ar		He-Ar		He-Xe	
	Presente	Ref.[94]	Presente	Ref.[94]	Presente	Ref. [94]
0.0	1.175	1.125	1.175	1.125	1.175	1.125
0.01	1.175	1.126	1.174	1.125	1.181	1.132
0.1	1.179	1.130	1.172	1.125	1.243	1.194
0.25	1.184	1.135	1.171	1.127	1.345	1.296
0.5	1.186	1.137	1.183	1.139	1.503	1.449
0.75	1.183	1.133	1.209	1.160	1.592	1.525
0.9	1.178	1.129	1.217	1.164	1.523	1.448
0.99	1.175	1.125	1.184	1.133	1.252	1.195
1.0	1.175	1.125	1.175	1.125	1.175	1.125

B.2 Coeficientes cinéticos: $T = 300K$ e potencial realístico de interação entre as partículas

Tabela B.7: Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de Ne-Ar, $C_0 = 0.1$

δ	Λ_{pp}	Λ_{pc}	$-\Lambda_{pt}$	Λ_{cc}	$-\Lambda_{ct}$	Λ_{tt}
0.0	1.5265	0.05968	0.7633	0.2227	0.02984	3.4346
0.001	1.5250	0.05963	0.7611	0.2223	0.02981	3.4274
0.002	1.5229	0.05955	0.7586	0.2218	0.02978	3.4189
0.004	1.5189	0.05940	0.7539	0.2210	0.02970	3.4025
0.008	1.5114	0.05909	0.7449	0.2193	0.02954	3.3710
0.01	1.5079	0.05894	0.7406	0.2184	0.02946	3.3559
0.02	1.4921	0.05818	0.7212	0.2146	0.02905	3.2864
0.04	1.4683	0.05670	0.6902	0.2080	0.02824	3.1707
0.08	1.4392	0.05406	0.6471	0.1977	0.02680	2.9965
0.1	1.4301	0.05290	0.6311	0.1934	0.02619	2.9266
0.2	1.4092	0.04823	0.5762	0.1769	0.02394	2.6612
0.4	1.4083	0.04151	0.5091	0.1539	0.02093	2.3045
0.6	1.4280	0.03654	0.4644	0.1373	0.01875	2.0539
0.8	1.4564	0.03262	0.4300	0.1242	0.01702	1.8597
1.0	1.4898	0.02942	0.4017	0.1135	0.01558	1.7019
1.5	1.5848	0.02349	0.3470	0.09326	0.01281	1.4071
2.0	1.6887	0.01941	0.3062	0.07898	0.01082	1.1996
2.5	1.7975	0.01647	0.2740	0.06838	0.009321	1.0447
3.0	1.9094	0.01425	0.2478	0.06016	0.008166	0.9245
3.5	2.0235	0.01253	0.2261	0.05367	0.007250	0.8286
4.0	2.1392	0.01117	0.2077	0.04840	0.006509	0.7502
6.0	2.6126	0.007739	0.1561	0.3465	0.004594	0.5428
8.	3.0957	0.005901	0.1246	0.02692	0.003538	0.4243
10.	3.5841	0.004764	0.1034	0.02199	0.002873	0.3480
20.	6.0566	0.002424	0.05565	0.01146	0.001479	0.1827

Tabela B.8: Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de Ne-Ar, $C_0 = 0.5$

δ	Λ_{PP}	Λ_{PC}	$-\Lambda_{PT}$	Λ_{CC}	$-\Lambda_{CT}$	Λ_{TT}
0.0	1.5707	0.2655	0.7854	1.5707	0.1328	3.5342
0.001	1.5692	0.2652	0.7832	1.5676	0.1326	3.5269
0.002	1.5671	0.2649	0.7807	1.5640	0.1324	3.5183
0.004	1.5630	0.2641	0.7759	1.5568	0.1321	3.5016
0.008	1.5553	0.2625	0.7668	1.5430	0.1313	3.4697
0.01	1.5517	0.2618	0.7624	1.5364	0.1309	3.4544
0.02	1.5355	0.2579	0.7427	1.5059	0.1290	3.3838
0.04	1.5108	0.2507	0.7110	1.4546	0.1252	3.2657
0.08	1.4800	0.2381	0.6666	1.3760	0.1187	3.0871
0.1	1.4701	0.2326	0.6500	1.3441	0.1159	3.0152
0.2	1.4462	0.2107	0.5929	1.2205	0.1060	2.7421
0.4	1.4411	0.1794	0.5230	1.0510	0.09245	2.3748
0.6	1.4578	0.1565	0.4764	0.9299	0.08247	2.1167
0.8	1.4841	0.1387	0.4406	0.8354	0.07449	1.9169
1.0	1.5158	0.1243	0.4113	0.7585	0.06785	1.7546
1.5	1.6080	0.09792	0.3548	0.6156	0.05520	1.4517
2.0	1.7102	0.08022	0.3129	0.5165	0.04625	1.2384
2.5	1.8179	0.06762	0.2800	0.4439	0.03963	1.0792
3.0	1.9291	0.05828	0.2532	0.3886	0.03458	0.9556
3.5	2.0426	0.05110	0.2311	0.3452	0.03061	0.8568
4.0	2.1579	0.04545	0.2124	0.3103	0.02743	0.7762
6.0	2.6303	0.03138	0.1598	0.2203	0.01929	0.5623
8.	3.1129	0.02390	0.1277	0.1704	0.01484	0.4399
10.	3.6009	0.01929	0.1061	0.1389	0.01205	0.3609
20.	6.0725	0.009819	0.05719	0.07202	0.006199	0.1897

Tabela B.9: Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de Ne-Ar, $C_0 = 0.9$

δ	Λ_{PP}	Λ_{PC}	$-\Lambda_{PT}$	Λ_{CC}	$-\Lambda_{CT}$	Λ_{TT}
0.0	1.5309	0.4103	0.7654	10.4942	0.2052	3.4444
0.001	1.5293	0.4098	0.7632	10.4696	0.2049	3.4372
0.002	1.5273	0.4091	0.7608	10.4404	0.2046	3.4287
0.004	1.5233	0.4076	0.7560	10.3837	0.2040	3.4122
0.008	1.5157	0.4048	0.7470	10.2758	0.2027	3.3806
0.01	1.5122	0.4034	0.7427	10.2244	0.2020	3.3655
0.02	1.4963	0.3967	0.7233	9.9895	0.1987	3.2958
0.04	1.4724	0.3841	0.6921	9.6036	0.1926	3.1797
0.08	1.4430	0.3629	0.6488	9.0274	0.1825	3.0048
0.1	1.4338	0.3538	0.6327	8.7956	0.1783	2.9346
0.2	1.4127	0.3178	0.5776	7.9057	0.1632	2.6682
0.4	1.4114	0.2668	0.5102	6.7070	0.1417	2.3102
0.6	1.4308	0.2302	0.4653	5.8660	0.1257	2.0588
0.8	1.4592	0.2020	0.4307	5.2193	0.1128	1.8640
1.0	1.4925	0.1796	0.4024	4.7000	0.1021	1.7057
1.5	1.5875	0.1394	0.3475	3.7533	0.08209	1.4102
2.0	1.6914	0.1132	0.3066	3.1132	0.06819	1.2021
2.5	1.8002	0.09482	0.2744	2.6533	0.05811	1.0468
3.0	1.9121	0.08140	0.2482	2.3083	0.05050	0.9263
3.5	2.0262	0.07121	0.2264	2.0408	0.04460	0.8301
4.0	2.1420	0.06324	0.2080	1.8277	0.03990	0.7516
6.0	2.6153	0.04355	0.1563	1.2860	0.02798	0.5437
8.	3.0984	0.03316	0.1248	0.9905	0.02151	0.4250
10.	3.5868	0.02677	0.1036	0.8050	0.01746	0.3485
20.	6.0592	0.01363	0.05572	0.4280	0.008983	0.1829

Tabela B.10: Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Ar, $C_0 = 0.1$

δ	Λ_{PP}	Λ_{PC}	$-\Lambda_{PT}$	Λ_{CC}	$-\Lambda_{CT}$	Λ_{TT}
0.0	1.7451	0.3099	0.8726	0.4694	0.1549	3.9265
0.001	1.7434	0.3095	0.8702	0.4687	0.1546	3.9186
0.002	1.7410	0.3089	0.8675	0.4678	0.1542	3.9093
0.004	1.7364	0.3079	0.8622	0.4661	0.1534	3.8912
0.008	1.7277	0.3059	0.8523	0.4627	0.1519	3.8564
0.01	1.7235	0.3049	0.8475	0.4611	0.1512	3.8397
0.02	1.7050	0.3003	0.8258	0.4536	0.1477	3.7624
0.04	1.6759	0.2920	0.7907	0.4405	0.1417	3.6323
0.08	1.6381	0.2786	0.7410	0.4198	0.1325	3.4340
0.1	1.6253	0.2729	0.7222	0.4112	0.1288	3.3589
0.2	1.5901	0.2507	0.6574	0.3778	0.1154	3.0487
0.4	1.5689	0.2195	0.5777	0.3311	0.09839	2.6374
0.6	1.5737	0.1965	0.5244	0.2969	0.08674	2.3482
0.8	1.5904	0.1782	0.4835	0.2698	0.07785	2.1245
1.0	1.6141	0.1631	0.4500	0.2474	0.07068	1.9431
1.5	1.6907	0.1345	0.3860	0.2048	0.05742	1.6051
2.0	1.7815	0.1142	0.3388	0.1743	0.04822	1.3678
2.5	1.8805	0.09896	0.3021	0.1515	0.04145	1.1910
3.0	1.9848	0.08719	0.2724	0.1337	0.03628	1.0540
3.5	2.0929	0.07783	0.2480	0.1196	0.03221	0.9447
4.0	2.2038	0.07023	0.2275	0.1081	0.02893	0.8555
6.0	2.6643	0.05031	0.1703	0.07774	0.02048	0.6194
8.	3.1402	0.03912	0.1357	0.06055	0.01581	0.4844
10.	3.6240	0.03195	0.1125	0.04954	0.01287	0.3974
20.	6.0440	0.01734	0.06044	0.02702	0.006654	0.2088

Tabela B.11: Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Ar, $C_0 = 0.5$

δ	Λ_{PP}	Λ_{PC}	$-\Lambda_{PT}$	Λ_{CC}	$-\Lambda_{CT}$	Λ_{TT}
0.0	2.3206	1.2047	1.1603	2.3206	0.6023	5.2213
0.001	2.3184	1.2031	1.1574	2.3170	0.6010	5.2118
0.002	2.3153	1.2010	1.1541	2.3126	0.5994	5.2006
0.004	2.3093	1.1970	1.1477	2.3040	0.5963	5.1784
0.008	2.2979	1.1891	1.1355	2.2874	0.5904	5.1358
0.01	2.2925	1.1853	1.1296	2.2794	0.5875	5.1152
0.02	2.2675	1.1673	1.1024	2.2420	0.5741	5.0190
0.04	2.2266	1.1359	1.0573	2.1779	0.5512	4.8541
0.08	2.1690	1.0856	0.9912	2.0780	0.5165	4.5969
0.1	2.1478	1.0647	0.9657	2.0371	0.5028	4.4916
0.2	2.0800	0.9830	0.8762	1.8789	0.4535	4.0882
0.4	2.0137	0.8680	0.7647	1.6583	0.3902	3.5417
0.6	1.9852	0.7828	0.6896	1.4963	0.3462	3.1563
0.8	1.9753	0.7144	0.6321	1.3667	0.3121	2.8581
1.0	1.9768	0.6573	0.5854	1.2586	0.2842	2.6163
1.5	2.0109	0.5473	0.4970	1.0504	0.2317	2.1662
2.0	2.0711	0.4677	0.4332	0.8994	0.1948	1.8503
2.5	2.1469	0.4073	0.3843	0.7847	0.1674	1.6146
3.0	2.2331	0.3602	0.3454	0.6949	0.1464	1.4316
3.5	2.3267	0.3224	0.3137	0.6228	0.1299	1.2854
4.0	2.4258	0.2915	0.2872	0.5637	0.1166	1.1658
6.0	2.8549	0.2099	0.2144	0.4071	0.08232	0.8477
8.	3.3128	0.1649	0.1707	0.3178	0.06346	0.6647
10.	3.7849	0.1339	0.1416	0.2593	0.05159	0.5462
20.	6.1500	0.07309	0.07613	0.1421	0.02662	0.2879

Tabela B.12: Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Ar, $C_0 = 0.9$

δ	Λ_{PP}	Λ_{PC}	$-\Lambda_{PT}$	Λ_{CC}	$-\Lambda_{CT}$	Λ_{TT}
0.0	1.9311	1.2750	0.9655	7.1799	0.6375	4.3449
0.001	1.9293	1.2731	0.9630	7.1684	0.6358	4.3367
0.002	1.9268	1.2707	0.9602	7.1543	0.6339	4.3270
0.004	1.9220	1.2660	0.9547	7.1267	0.6304	4.3078
0.008	1.9128	1.2571	0.9442	7.0737	0.6236	4.2711
0.01	1.9085	1.2528	0.9391	7.0482	0.6203	4.2534
0.02	1.8888	1.2328	0.9161	6.9299	0.6053	4.1713
0.04	1.8578	1.1992	0.8784	6.7296	0.5807	4.0322
0.08	1.8169	1.1480	0.8244	6.4228	0.5454	3.8186
0.1	1.8029	1.1273	0.8040	6.2987	0.5319	3.7321
0.2	1.7642	1.0486	0.7333	5.8253	0.4844	3.4025
0.4	1.7393	0.9391	0.6460	5.1752	0.4223	2.9569
0.6	1.7416	0.8578	0.5874	4.7014	0.3778	2.6424
0.8	1.7562	0.7916	0.5423	4.3213	0.3422	2.3981
1.0	1.7780	0.7355	0.5054	4.0027	0.3124	2.1993
1.5	1.8501	0.6244	0.4344	3.3804	0.2551	1.8267
2.0	1.9370	0.5411	0.3821	2.9203	0.2139	1.5631
2.5	2.0324	0.4762	0.3412	2.5650	0.1832	1.3655
3.0	2.1336	0.4245	0.3082	2.2830	0.1596	1.2116
3.5	2.2389	0.3824	0.2810	2.0542	0.1411	1.0882
4.0	2.3473	0.3475	0.2580	1.8653	0.1262	0.9871
6.0	2.8004	0.2534	0.1939	1.3575	0.08830	0.7178
8.	3.2714	0.1988	0.1549	1.0637	0.06770	0.5627
10.	3.7517	0.1633	0.1287	0.8505	0.05485	0.4623
20.	6.1530	0.09049	0.06936	0.4690	0.02811	0.2435

Tabela B.13: Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Xe, $C_0 = 0.1$

δ	Λ_{pp}	Λ_{pc}	$-\Lambda_{pt}$	Λ_{cc}	$-\Lambda_{ct}$	Λ_{tt}
0.0	2.1056	0.6759	1.0528	0.8347	0.3379	4.7376
0.001	2.1037	0.6753	1.0502	0.8339	0.3374	4.7292
0.002	2.1009	0.6744	1.0473	0.8327	0.3367	4.7192
0.004	2.0957	0.6726	1.0415	0.8303	0.3353	4.6994
0.008	2.0856	0.6692	1.0305	0.8257	0.3326	4.6615
0.01	2.0808	0.6675	1.0253	0.8234	0.3313	4.6432
0.02	2.0589	0.6594	1.0011	0.8128	0.3251	4.5582
0.04	2.0235	0.6446	0.9613	0.7938	0.3140	4.4133
0.08	1.9745	0.6199	0.9033	0.7627	0.2960	4.1886
0.1	1.9567	0.6093	0.8811	0.7496	0.2886	4.0969
0.2	1.9011	0.5668	0.8026	0.6978	0.2608	3.7444
0.4	1.8514	0.5070	0.7060	0.6254	0.2256	3.2675
0.6	1.8341	0.4619	0.6405	0.5710	0.2010	2.9283
0.8	1.8327	0.4254	0.5901	0.5271	0.1820	2.6639
1.0	1.8410	0.3946	0.5488	0.4900	0.1665	2.4481
1.5	1.8870	0.3345	0.4698	0.4174	0.1373	2.0421
2.0	1.9547	0.2899	0.4117	0.3634	0.1166	1.7537
2.5	2.0356	0.2554	0.3666	0.3214	0.1010	1.5366
3.0	2.1254	0.2279	0.3303	0.2877	0.08892	1.3669
3.5	2.2214	0.2055	0.3004	0.2602	0.7926	1.2305
4.0	2.3223	0.1870	0.2753	0.2373	0.07140	1.1184
6.0	2.7555	0.1368	0.2059	0.1748	0.05078	0.8181
8.	3.2153	0.1074	0.1640	0.1379	0.3923	0.6437
10.	3.6886	0.8832	0.1361	0.1137	0.3192	0.5301
20.	6.1280	0.04659	0.07323	0.06034	0.01648	0.2808

Tabela B.14: Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Xe, $C_0 = 0.5$

δ	Λ_{PP}	Λ_{PC}	$-\Lambda_{PT}$	Λ_{CC}	$-\Lambda_{CT}$	Λ_{TT}
0.0	3.6326	2.5527	1.8163	3.6326	1.2763	8.1734
0.001	3.6298	2.5503	1.8128	3.6287	1.2741	8.1623
0.002	3.6256	2.5470	1.8086	3.6234	1.2715	8.1482
0.004	3.6173	2.5404	1.8004	3.6131	1.2662	8.1204
0.008	3.6013	2.5275	1.7846	3.5929	1.2560	8.0664
0.01	3.5936	2.5212	1.7769	3.5832	1.2510	8.0402
0.02	3.5574	2.4912	1.7409	3.5370	1.2273	7.9163
0.04	3.4952	2.4372	1.6791	3.4558	1.1855	7.6980
0.08	3.3996	2.3477	1.5839	3.3252	1.1187	7.3457
0.1	3.3617	2.3097	1.5460	3.2707	1.0913	7.1985
0.2	3.2261	2.1590	1.4084	3.0580	0.9898	6.6251
0.4	3.0657	1.9476	1.2374	2.7618	0.8615	5.8427
0.6	2.9645	1.7872	1.1194	2.5392	0.7709	5.2773
0.8	2.8947	1.6561	1.0284	2.3577	0.7005	4.8327
1.0	2.8449	1.5446	0.9540	2.2035	0.6427	4.4671
1.5	2.7758	1.3229	0.8123	1.8963	0.5326	3.7719
2.0	2.7567	1.1555	0.7093	1.6633	0.4534	3.2710
2.5	2.7696	1.0238	0.6299	1.4792	0.3933	2.8891
3.0	2.8046	0.9177	0.5667	1.3301	0.3464	2.5871
3.5	2.8557	0.8304	0.5150	1.2069	0.3089	2.3419
4.0	2.9190	0.7575	0.4719	1.1036	0.2782	2.1387
6.0	3.2494	0.5577	0.3534	0.8183	0.1977	1.5849
8.	3.6482	0.4395	0.2822	0.6477	0.1527	1.2566
10.	4.0813	0.3621	0.2347	0.5352	0.1242	1.0399
20.	6.4316	0.1918	0.1270	0.2851	0.06401	0.5564

Tabela B.15: Coeficientes cinéticos vs δ , mistura de He-Xe, $C_0 = 0.9$

δ	Λ_{PP}	Λ_{PC}	$-\Lambda_{PT}$	Λ_{CC}	$-\Lambda_{CT}$	Λ_{TT}
0.0	2.8222	2.2851	1.4111	7.1189	1.1426	6.3500
0.001	2.8201	2.2826	1.4081	7.1106	1.1401	6.3404
0.002	2.8169	2.2792	1.4047	7.0997	1.1372	6.3285
0.004	2.8107	2.2726	1.3979	7.0784	1.1316	6.3052
0.008	2.7989	2.2597	1.3848	7.0371	1.1207	6.2600
0.01	2.7932	2.2535	1.3785	7.0172	1.1155	6.2382
0.02	2.7669	2.2245	1.3492	6.9235	1.0912	6.1354
0.04	2.7234	2.1747	1.2998	6.7619	1.0501	5.9571
0.08	2.6613	2.0972	1.2260	6.5089	0.9885	5.6751
0.1	2.6383	2.0658	1.1973	6.4056	0.9644	5.5590
0.2	2.5662	1.9471	1.0963	6.0131	0.8785	5.1131
0.4	2.4981	1.7841	0.9714	5.4747	0.7690	4.5050
0.6	2.4689	1.6622	0.8863	5.0754	0.6918	4.0683
0.8	2.4580	1.5617	0.8205	4.7491	0.6308	3.7251
1.0	2.4579	1.4749	0.7664	4.4698	0.5799	3.4427
1.5	2.4854	1.2969	0.6618	3.9043	0.4811	2.9047
2.0	2.5365	1.1562	0.5841	3.4642	0.4085	2.5162
2.5	2.6023	1.0413	0.5232	3.1086	0.3530	2.2197
3.0	2.6784	0.9455	0.4737	2.8149	0.3094	1.9851
3.5	2.7621	0.8647	0.4327	2.5686	0.2746	1.7947
4.0	2.8518	0.7958	0.3982	2.3594	0.2463	1.6369
6.0	3.2499	0.5996	0.3011	1.7693	0.1726	1.2081
8.	3.6854	0.4787	0.2415	1.4089	0.1321	0.9552
10.	4.1411	0.3976	0.2013	1.1682	0.1068	0.7889
20.	6.5372	0.2140	0.1093	0.6706	0.05437	0.4202