Paper CIT06-0378

SOLUÇÃO HIDRODINÂMICA E MODELO CINÉTICO PARA MISTURAS BINÁRIAS

Valdete dos Santos Coqueiro

vcoqueiro@yahoo.com.br

Liliana Madalena Gramani Cumin

Departamento de Matemática – UFPr – Caixa Postal 19044, Cep 81531-990 – Curitiba – Paraná - Brasil gramani@mat.ufpr.br

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

Palavras chave: Fluxo de Couette, Misturas de gases, Potencial intermolecular, Número de Knudsen.

1. Introdução

O escoamento de Couette plano é um problema clássico da dinâmica de gases rarefeitos, o qual tem sido pesquisado por vários autores quando se refere ao caso de gás único (Cercignani, 2000). Assim, o interesse sosbre este tipo de fluxo em misturas de gases tem freqüentemente aumentado, pois o estudo dos fenômenos de transporte no escoamento de gases rarefeitos é utilizado para o desenvolvimento tecnológico de equipamentos de vácuo, indústria aeronáutica, microengenharia, etc. Porém, existem poucos trabalhos na literatura sobre este fluxo para misturas de gases dentro de um amplo intervalo do número de Knudsen. Então, o fluxo de Couette será estudado para o caso de uma mistura binária confinada entre duas placas paralelas suficientemente longas de forma que os efeitos de borda podem ser desprezados.

Em escoamento de gases rarefeitos costuma-se caracterizar o regime de escoamento pelo chamado número de Knudsen Kn o qual é um parâmetro que indica o grau de rarefação de um gás. É definido como a razão entre o livre caminho médio molecular e um comprimento característico do problema em estudo. Assim, o regime de escoamento se divide em três tipos: regime de moléculas livres $(Kn \to \infty)$, regime hidrodinâmico $(Kn \to 0)$ e regime de transição $(Kn \cong 1)$. A Mecânica do Contínuo é aplicada somente ao regime hidrodinâmico. Para abranger todo o intervalo do número de Knudsen é necessário aplicar a Dinâmica dos Gases Rarefeitos, cujos métodos se baseiam: (i) na solução da equação de Boltzmann (Cercignani, 1988 e Cercignani, 2000) (ii) ou na simulação de Monte Carlo (Bird, 1976), o qual não será abordado neste trabalho.

A equação de Boltzmann é uma equação íntegro-diferencial, complexa devido a integral de colisões entre as partículas. Para simplificar a equação de Boltzmann usando todo o intervalo do número de Knudsen surgiu a idéia de simplificar a integral de colisões utilizando um modelo matemático para essa integral. A escolha desse modelo matemático, deve satisfazer as seguintes condições: (i) a conservação da massa, do momento linear e da energia de cada colisão entre as partículas; (ii) a equação modelo, também denominada de equação cinética deve fornecer corretamente todos os coeficientes de transporte (viscosidade, condutividade térmica, etc) e (iii) no estado de equilíbrio a integral de colisões deve ser nula.

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

Neste trabalho, o objetivo é estudar o problema do fluxo de Couette plano para uma mistura binária de gases monoatômicos com base no modelo cinético de McCormack (McCormack, 1973) para um amplo intervalo do número de Knudsen.

2. Estudo do Problema

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

$$U << v_0, \ v_0 = \left(\frac{2kT_0}{m}\right)^{1/2},\tag{1}$$

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

$$m = C_0 m_1 + (1 - C_0) m_2 \,, \tag{2}$$

e C_0 a concentração molar da mistura em equilíbrio, m_1 e m_2 são as massas moleculares de cada constituinte.

Será calculado a velocidade hidrodinâmica e o tensor tensão de cada constituinte e da mistura para as três misturas binárias: Neônio e Argônio; Hélio e Argônio; e Hélio e Xenônio, para um amplo intervalo do número de Knudsen $0 < Kn < \infty$. As misturas apresentam razões de massas m_1/m_2 bem distintas 0,505, 0,100 e 0,030, além das razões entre os seus diâmetros d_2/d_1 serem de 1,406, 1,665 e 2,226, respectivamente. As concentrações consideradas para estas misturas serão nas proporções de 10%, 50% e 90%, para o primeiro constituinte. Estes cálculos serão feitos para dois tipos de potenciais intermoleculares: esfera-rígida e Lennard-Jones, ambos considerando uma temperatura inicial de 300K.

3. Solução Hidrodinâmica e Resultados

O objetivo é calcular o tensor tensão P'_{xy} entre as placas e a velocidade da mistura u'_x , com base na Mecânica do Contínuo. A velocidade da mistura u'_x está relacionada com as velocidades médias de cada constituinte $u'_{\alpha x}(\alpha=1, 2)$ através de

$$u'_{x} = \frac{1}{\rho_{1} + \rho_{2}} (\rho_{1} u'_{1x} + \rho_{2} u'_{2x}), \qquad \rho_{\alpha} = n_{0\alpha} m_{\alpha}$$
(3)

onde ρ_{α} , $(\alpha=1,2)$ representa a densidade de massa de cada constituinte da mistura, $n_{0\alpha}$ a distribuição da densidade em equilíbrio do número de partículas do constituinte α e m_{α} a massa da partícula do constituinte α . O parâmetro de rarefação do gás, δ , que caracteriza a rarefação do gás é definido como:

$$\delta = \frac{DP_0}{\mu v_0} \tag{4}$$

onde P_0 denota a pressão em equilíbrio, μ a viscosidade do gás considerado e D representa a distância entre as placas paralelas suficientemente longas para que os efeitos de borda possam ser desprezados.

No regime hidrodinâmico ($\delta \to \infty$ ou $Kn \to 0$) o livre caminho médio é muito menor que o comprimento característico do escoamento e, consequentemente, o meio gasoso pode ser considerado como um meio contínuo no qual as equações da hidrodinâmica podem ser aplicadas. Neste regime, utiliza-se a equação de Navier-Stokes (Landau, 1976), com as condições de contorno sem deslizamento da velocidade escritas abaixo:

$$u_x' = \frac{U}{D} y', \tag{5}$$

$$P'_{xy} = -\mu \frac{\partial u'_x}{\partial y'},\tag{6}$$

ou reescrevendo,

$$P'_{xy} = -\mu \frac{U}{D}.\tag{7}$$

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

$$u = \frac{u'_x}{U}, \qquad y = \frac{y'}{D}, e \quad \Pi = -\frac{v_0}{2UP_0} P'_{xy}.$$
 (8)

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

$$u'_{x} = u'_{\text{superficie}}, \qquad P'_{xy} = P'_{xy_{\text{superficie}}}$$
 (9)

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

As expressões (9) são válidas quando o número de Knudsen é pequeno, isto é, se está no regime hidrodinâmico. Entretanto quando o número de Knudsen aumenta, isto é, o gás se torna mais rarefeito, as condições acima não são mais válidas, pois há um deslizamento da velocidade.

Para avaliar a condição de deslizamento da velocidade escreve-se, de acordo com (Sharipov & Seleznez, 1998) que

$$u'_{x} = \pm \frac{U}{2} \mp \sigma_{P} \frac{\mu v_{0}}{P} \frac{\partial u'_{x}}{\partial v'}, \text{ em} \qquad y' = \pm \frac{D}{2}$$
(10)

onde σ_P é o coeficiente de deslizamento viscoso. A velocidade u_x' é escrita como uma função da posição, sendo representada por

$$u_x' = A + By', \tag{11}$$

onde A e B são constantes a serem determinadas. Substituindo-se as condições de contorno (10) em (11) encontra-se as constantes A e B. Assim, será possível expressar a velocidade u_x' por

$$u_x' = \frac{U}{D} \left(1 + \frac{2\sigma_P}{\delta} \right)^{-1} y' \tag{12}$$

Utilizando-se a Eq. (12) na Eq. (6) tem-se,

$$P'_{xy} = -\mu \frac{U}{D} \left(1 + \frac{2\sigma_P}{\delta} \right)^{-1}. \tag{13}$$

Utilizando-se a Eq.(8) nas equações (12) e (13) obtém-se as equações para a velocidade da mistura e o tensor tensão em termos das quantidades adimensionais como sendo

$$u = \left(1 + \frac{2\sigma_P}{\delta}\right)^{-1} y,\tag{14}$$

e,

$$\Pi = \frac{1}{2\delta + 4\sigma_P}.$$
(15)

Os valores do coeficiente de deslizamento viscoso σ_P são encontrados em (Sharipov & Seleznez, 1998) para um gás único, e em (Cercignani, Lampis & Lentati, 1994; Ivchenko, Loyalka & Thompson, 1997; Ivchenko, Loyalka & Thompson, 2002; Sharipov & Kalempa, 2003) para misturas de gases.

As equações (14) e (15) são equações que expressam a velocidade adimensional da mistura e o tensor tensão da mistura em função do parâmetro de rarefação e o coeficiente de deslizamento viscoso.

Na Tab.(1) são representados valores da velocidade u da mistura na distância y=1/2 e o tensor tensão Π da mistura em função do parâmetro de rarefação δ . Os valores do coeficiente de deslizamento σ_P foram retirados do artigo (Sharipov & Kalempa, 2003) para todas as misturas consideradas.

Tabela 1. Velocidade u da mistura na distância y=1/2 e o tensor tensão Π da mistura vs o parâmetro de rarefação δ

		para as mi	sturas inc-Ai,	TIC-AI C TIC-A	С.	
	Ne	-Ar	Не	-Ar	He-Xe	
	$\sigma_P =$	1,040	$\sigma_P =$	1,150	$\sigma_{P} = 1,259$	
δ	и	П	и	П	и	П
0,4	0,08065	0,2016	0,07407	0,1852	0,06854	0,1714
0,1	0,02294	0,2294	0,02083	0,2083	0,01910	0,1910
1	0,1623	0,1623	0,1515	0,1515	0,1421	0,1421
2	0,2451	0,1225	0,2326	0,1163	0,2213	0,1107
4	0,3289	0,08224	0,3175	0,07937	0,3068	0,07671
10	0,4139	0,04139	0,4065	0,04065	0,3994	0,03994
20	0,4529	0,02264	0,4484	0,02242	0,4441	0,02220
40	0,4753	0,01188	0,4728	0,01182	0,4704	0,01176

4. Modelo Cinético

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

$$v_{\alpha i} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial x_i} = \sum_{\beta=1}^2 Q_{\alpha\beta} (f_{\alpha}, f_{\beta}). \tag{16}$$

A Equação (16) representa uma equação íntegro-diferencial, não-linear para o caso de mistura de gases monoatômicos em regime de escoamento estacionário $\left(\partial f_{\alpha} / \partial t = 0\right)$ e sem a presença de forças externas $(F_i = 0)$. A integral de colisões entre as partículas α e β esta sendo representado pelo operador de colisão quadrática $Q_{\alpha\beta}\left(f_{\alpha},f_{\beta}\right)$, também denominada de termo de colisão. A principal dificuldade matemática apresentada na equação de Boltzmann está associada com o termo de colisão $Q_{\alpha\beta}\left(f_{\alpha},f_{\beta}\right)$. Muitas alternativas são analisadas com o objetivo de simplificar o termo de colisão facilitando assim a solução da equação de Boltzmann. Expressões mais simples para este termo tem sido propostas por diversos autores. Estas são conhecidas como modelo de colisão e a equação de Boltzmann na qual o termo de colisão é substituído por um modelo passa a ser chamada de equação modelo (Bird, 1976; Ohwada, 1998) O objetivo desta substituição é facilitar a resolução da equação de Boltzmann de forma a fornecer resultados satisfatórios, isto é, a equação modelo deve apresentar bons resultados que podem ser comparáveis aos resultados da solução exata da equação de Boltzmann (Sharipov & Seleznez, 1998). Assim o termo de colisão poderá ser substituído por um operador o qual deverá ter a conservação da massa, conservação do momento linear e a conservação da energia de cada colisão de uma partícula α com uma partícula β .

No modelo cinético utilizado neste trabalho, a expressão do operador de colisão que quadrática é dada por

$$Q_{\alpha\beta} = -\upsilon_{\alpha\beta}' (f_{\alpha} - f_{\alpha\beta}^{R}). \tag{17}$$

 $\upsilon_{\alpha\beta}'$ denota a freqüência de colisão independe das velocidades das partículas, f_{α} representa a função de distribuição dos constituintes e $f_{\alpha\beta}^{R}$ a função de distribuição de referência.

Substituindo-se a expressão do operador de colisão quadrática Eq. (17) na Eq. (16) encontra-se a equação modelo

$$v'_{\alpha i} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial x'_{i}} = -\sum_{\beta=1}^{2} v'_{\alpha \beta} \left(f_{\alpha} - f_{\alpha \beta}^{R} \right), \tag{18}$$

Para este problema tem-se para a função de distribuição dos constituintes

$$f_{\alpha}(\overrightarrow{x'}, \overrightarrow{v'_{\alpha}}) = f_{\alpha}^{M}(\overrightarrow{v'_{\alpha}}) \left[1 + h_{\alpha}(y', \overrightarrow{v'_{\alpha}}) \frac{U}{v_{0}} \right], \tag{19}$$

onde f_a^M é a função de distribuição Maxwelliana (Kremer, 2003) correspondente ao estado de equilíbrio

$$f_{\alpha}^{M} = n_{0\alpha} \left(\frac{m_{\alpha}}{2\pi k T_{0}} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_{\alpha}}{2k T_{0}} v_{\alpha}^{\prime 2} \right), \tag{20}$$

 $h_{\alpha}\left(y',v_{\alpha}'\right)$ representa a perturbação da função de distribuição do sistema que obedece a equação de Boltzmann e $n_{0\alpha}$ é a distribuição da densidade em equilíbrio do número de partículas do constituinte α entre as placas. É conveniente introduzir quantidades adimensionais para as quantidades da velocidade molecular do constituinte α , $\overrightarrow{v_{\alpha}'}$ e a posição $\overrightarrow{x'}$. Desta forma a velocidade dimensional $\overrightarrow{v_{\alpha}'}$ esta relacionada com a velocidade adimensional $\overrightarrow{c_{\alpha}}$ através do parâmetro $\beta_{0\alpha} = (m_{\alpha}/2kT_0)^{1/2}$, ou seja

$$\overrightarrow{v_{\alpha}} = \beta_{0\alpha}^{-1} \overrightarrow{c_{\alpha}} \tag{21}$$

e introduz-se a grandeza adimensional

$$\overrightarrow{x} = \frac{\overrightarrow{x'}}{D}.$$
 (22)

Substituindo-se Eq. (19) – Eq. (22) na Eq. (18) tem-se a equação adimensional

$$c_{\alpha y} \frac{\partial h_{\alpha}}{\partial y} = D \left(\frac{m_{\alpha}}{2kT_0} \right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^{2} \hat{L}_{\alpha \beta} h, \quad \alpha = 1, 2,$$
 (23)

O modelo cinético proposto por McCormack representa $\hat{L}_{\alpha\beta}h$ como uma expansão de um polinômio da velocidade adimensional c_{α} , ou seja,

$$\hat{L}_{\alpha\beta}h = -\gamma_{\alpha\beta}h_{\alpha} + A + A_kc_{\alpha k} + B_{kl}c_{\alpha k}c_{\alpha l} + D_kc_{\alpha k}c_{\alpha l}^2. \tag{24}$$

O parâmetro $\gamma_{\alpha\beta}$ é proporcional a frequência de colisão entre os constituintes α e β (Cercignani & Sharipov, 1992).

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

$$\hat{L}_{\alpha\beta}h = -\gamma_{\alpha\beta}h_{\alpha} + 2\left(\frac{m_{\alpha}}{m}\right)^{1/2} \left[\gamma_{\alpha\beta}u_{\alpha} - \upsilon_{\alpha\beta}^{(1)}(u_{\alpha} - u_{\beta}) - \frac{\upsilon_{\alpha\beta}^{(2)}}{2} \left(q_{\alpha} - \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}}q_{\beta}\right)\right] c_{\alpha x}
+ 4\left[\left(\gamma_{\alpha\beta} - \upsilon_{\alpha\beta}^{(3)}\right)\Pi_{\alpha} + \upsilon_{\alpha\beta}^{(4)}\Pi_{\beta}\right] c_{\alpha x} c_{\alpha y} + \frac{4}{5}\left(\frac{m_{\alpha}}{m}\right)^{1/2} \left[\left(\gamma_{\alpha\beta} - \upsilon_{\alpha\beta}^{(5)}\right)q_{\alpha} + \upsilon_{\alpha\beta}^{(6)}\left(\frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}}\right)^{1/2}q_{\beta}\right]
- \frac{5}{4}\upsilon_{\alpha\beta}^{(2)}\left(u_{\alpha} - u_{\beta}\right) c_{\alpha x} \left(c_{\alpha}^{2} - \frac{5}{2}\right), \qquad \alpha, \beta = 1, 2, \tag{25}$$

e as quantidades $\upsilon_{\alpha\beta}^N$, representam a freqüência de colisões entre os constituintes α e β . Os momentos adimensionais da função de distribuição são escritos (Ivchenko, Loyalka & Thompson 2002) do seguinte modo:

$$u_{\alpha}(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\frac{m}{m_{\alpha}} \right)^{1/2} \int \exp\left(-c_{\alpha}^{2}\right) h_{\alpha}\left(y, \overrightarrow{c_{\alpha}}\right) c_{\alpha x} d\overrightarrow{c_{\alpha}}, \tag{26}$$

$$q_{\alpha}(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\frac{m}{m_{\alpha}}\right)^{1/2} \int \exp\left(-c_{\alpha}^{2}\right) h_{\alpha}\left(y, c_{\alpha}^{\dagger}\right) c_{\alpha x}\left(c_{\alpha}^{2} - \frac{5}{2}\right) dc_{\alpha}^{\dagger}, \tag{27}$$

$$\Pi_{\alpha}(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int \exp\left(-c_{\alpha}^{2}\right) h_{\alpha}\left(y, \overrightarrow{c_{\alpha}}\right) c_{\alpha x} c_{\alpha y} d\overrightarrow{c_{\alpha}}, \tag{28}$$

onde u_{β} , q_{β} e Π_{β} são semelhantes as equações (26), (27) e (28), respectivamente bastando trocar α por β . As condições de contorno para a perturbação h_{α} da Eq. (23) são dadas por:

$$h_{\alpha}\left(y,\overrightarrow{c_{\alpha}}\right) = h_{\alpha}\left(\pm\frac{D}{2},\overrightarrow{c_{\alpha}}\right) = \pm\left(\frac{m_{\alpha}}{m}\right)^{1/2} c_{\alpha x}, \text{ para } c_{\alpha x} > \text{ou} < 0.$$
 (29)

4.1. Método de Solução

A Eq. (23) é função das componentes da velocidade adimensional $c_{\alpha i} = (c_{\alpha x}, c_{\alpha y}, c_{\alpha z})$. Como a solução independe das coordenadas x e z, para eliminar as variáveis $c_{\alpha x}$ e $c_{\alpha z}$ da Eq. (23) duas funções são introduzidas:

$$\Phi_{\alpha} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\left(c_{\alpha x}^2 + c_{\alpha z}^2\right)\right] h_{\alpha} c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z}, \tag{30}$$

$$\Psi_{\alpha} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\left(c_{\alpha x}^{2} + c_{\alpha z}^{2}\right)\right] \left[c_{\alpha x}^{2} + c_{\alpha z}^{2} - 2\right] h_{\alpha} c_{\alpha x} dc_{\alpha x} dc_{\alpha z}, \tag{31}$$

Para se escrever a Eq. (23) em função de Φ_{α} e Ψ_{α} deve-se multiplicá-la pelos respectivos fatores $c_{\alpha x}e^{-(c_{\alpha x}^2+c_{\alpha z}^2)}/\pi$ e $c_{\alpha x}[c_{\alpha x}^2+c_{\alpha z}^2-2]e^{-(c_{\alpha x}^2+c_{\alpha z}^2)}/\pi$ e depois integrar este sistema de equações em todo o intervalo da velocidade, em relação a $dc_{\alpha x}$ e $dc_{\alpha z}$ que transformam a Eq. (23) em um sistema de equações para Φ_{α} e Ψ_{α} ,

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

$$+2\left[\left(1-\frac{\upsilon_{\alpha\alpha}^{(3)}+\upsilon_{\alpha\alpha}^{(4)}-\upsilon_{\alpha\beta}^{(3)}}{\gamma_{\alpha\beta}}\right)\Pi_{\alpha}+\frac{\upsilon_{\alpha\beta}^{(4)}}{\gamma_{\alpha\beta}}\Pi_{\beta}\right]c_{\alpha y}$$

$$+\left(\frac{m_{\alpha}}{m}\right)^{1/2}\left[\frac{4}{5}\left(\left(1+\frac{\upsilon_{\alpha\alpha}^{(6)}-\upsilon_{\alpha\alpha}^{(5)}-\upsilon_{\alpha\beta}^{(5)}}{\gamma_{\alpha\beta}}\right)q_{\alpha}+\frac{\upsilon_{\alpha\beta}^{(6)}}{\gamma_{\alpha\beta}}\left(\frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}}\right)^{1/2}q_{\beta}\right)\right]$$

$$-\frac{\upsilon_{\alpha\beta}^{(2)}}{\gamma_{\alpha\beta}}\left(u_{\alpha}-u_{\beta}\right)\left[\frac{1}{2}\left(c_{\alpha y}^{2}-\frac{1}{2}\right)\right], \qquad e$$

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

$$-\frac{\upsilon_{\alpha\beta}^{(2)}}{\gamma_{\alpha\beta}}\left(u_{\alpha}-u_{\beta}\right)\right]. \tag{33}$$

É utilizado com maior frequência o parâmetro de rarefação do constituinte α da mistura δ_{α} ao invés do número de Knudsen Kn , definido por,

$$\delta_{\alpha} = D \left(\frac{m_{\alpha}}{2kT_0} \right)^{1/2} \gamma_{\alpha}, \tag{34}$$

onde $\gamma_{\alpha}=P_{\alpha}/\mu_{\alpha}$ com P_{α} e μ_{α} representando a pressão parcial e a viscosidade parcial, respectivamente, (Cercignani & Sharipov, 1992). Nas equações (32) e (33) os momentos adimensionais da função de distribuição u_{α} , u_{β} , q_{α} , q_{β} , Π_{α} e Π_{β} são descritos nas equações (34)-(36) e representam as incógnitas. Estes momentos escritos em função de Φ_{α} e Ψ_{α} são:

$$u_{\alpha}(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{m_{\alpha}}\right)^{1/2} \int \exp\left(-c_{\alpha y}^{2}\right) \Phi_{\alpha} dc_{\alpha y}, \qquad (35)$$

$$q_{\alpha}(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{m_{\alpha}} \right)^{1/2} \int \left[\Psi_{\alpha} + \Phi_{\alpha} \left(c_{\alpha y}^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \exp\left(-c_{\alpha y}^2 \right) dc_{\alpha y}, \tag{36}$$

$$\Pi_{\alpha}(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int \exp\left(-c_{\alpha y}^2\right) c_{\alpha y} \Phi_{\alpha} dc_{\alpha y}, \qquad (37)$$

onde u_{β} , q_{β} e Π_{β} são semelhantes as equações (35), (36) e (37), respectivamente bastando trocar α por β .

O objetivo é resolver este sistema de equações íntegro-diferenciais (32) e (33) e nas quais utilizando Eq. (29) em Eqs. (30) e (31), se obtém as respectivas condições de contorno. Este sistema de equações pode ser reduzido à um sistema de equações de integrais para os momentos da função de distribuição. Entretanto, este método requer um grande tempo computacional, especialmente para grandes valores do parâmetro de rarefação δ , que é o inverso do número de Knudsen Kn. Este é um dos motivos pelos quais deve-se usar o método das velocidades discretas (Kogan, 1969; Sharipov & Subbotin, 1993).

4.2. Resultados Numéricos e Discussões

O parâmetro δ_{α} presente nas equações (40) e (41), corresponde ao parâmetro de rarefação do constituinte α da mistura. No programa numérico utiliza-se o parâmetro de rarefação da mistura, denotado por δ , como um parâmetro de entrada. Conseqüentemente, é necessário estabelecer uma relação entre os parâmetros de rarefação da mistura e dos constituintes. Esta relação (Cercignani & Sharipov, 1992; Sharipov & Kalempa, 2003) é dada por

$$\delta_{\alpha} = \frac{\mu}{\mu_{\alpha}} \frac{P_{\alpha}}{P} \left(\frac{m_{\alpha}}{m}\right)^{1/2} \delta, \tag{38}$$

onde μ e μ_{α} denotam, respectivamente, a viscosidade da mistura e a viscosidade parcial, cujas expressões são dadas em (Sharipov & Kalempa, 2002). P e P_{α} representam a pressão da mistura e a pressão parcial, respectivamente.

O sistema de equações cinéticas (32) e (33) foram resolvidas numericamente para um amplo intervalo do parâmetro de rarefação δ , pelo método das velocidades discretas (Kogan, 1969; Sharipov & Subbotin, 1993) com um erro numérico relativo menor que 0,1%. Os valores considerados para o parâmetro de rarefação δ variam de $0,01 \le \delta \le 40$. Deve-se ressaltar que este intervalo abrange o regime das moléculas livres para $\delta \to 0$ (especificando o intervalo $0,01 \le \delta < 1$), o regime de transição $\delta \cong 1$ e o regime hidrodinâmico para $\delta \to \infty$ (especificando o intervalo $\delta \ge 40$). Portanto o maior valor considerado para $\delta \in 40$, o qual já representa com certeza o regime hidridinâmico. Todos os cálculos foram feitos para um amplo intervalo do parâmetro de rarefação δ , isto é, 0,01 à 40. Foram considerados três valores de concentração C_0 , isto é, 10%, 50% e 90%, em relação ao primeiro constituinte da mistura. variam de $0,01 \le \delta \le 40$.

Para investigar a influência da lei de interação intermolecular no tensor tensão e velocidade, dois tipos de potenciais foram usados: o potencial de esfera-rígida e o potencial Lennard-Jones.

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

$$\frac{d_2}{d_1} = \left(\frac{\mu_1}{\mu_2}\right)^{1/2} \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{1/4}.$$
(39)

Estas viscosidades são obtidas experimentalmente à uma temperatura de T=300K (Kestin, Knierim, Mason, Najafi, Ro & Waldman, 1984). Estes diâmetros d_{α} aparecem nas integrais de Chapman-Cowling.

Pode-se expressar a razão entre os parâmetros de rarefação dos constituintes em termos das pressões e das massas de cada constituinte utilizando-se a Eq. (38). Usando a expressão $P_{\alpha}=n_{\alpha}kT_{\alpha}$, obtem-se a razão entre os parâmetros de rarefação dos constituintes em função das densidades e dos diâmetros, ou seja,

$$\frac{\delta_1}{\delta_2} = \left(\frac{n_1}{n_2}\right)^{1/2} \left(\frac{d_1}{d_2}\right)^2. \tag{40}$$

Os valores dos parâmetros δ_1 e δ_2 são apresentados nas tabelas (2)-(4) para as concentrações 0,1, 0,5 e 0,9, respectivamente. Observa-se que para $0,01 \le \delta < 1$ os constituintes encontram-se no regime de moléculas livres. Para $\delta \cong 1$ tem-se duas situações: os constituintes encontram-se no regime das moléculas livres ou um deles encontra-se no regime de transição e o outro no regime de moléculas livres. Para $\delta \to \infty$ ambos se encontram no regime hidrodinâmico. Os resultados numéricos do tensor tensão Π da mistura são fornecidos nas tabelas (5)-(6) para o potencial de Lennard-Jones e esfera-rígida, respectivamente. Da análise numérica destes valores concluí-se que:

- i) O tensor tensão Π da mistura sempre decresce com o aumento do parâmetro de rarefação δ .
- ii) Os dados do tensor tensão de cada constituinte, Π_1 e Π_2 , para a mistura binária He-Xe são apresentadas nas tabelas (7)-(8) para o potencial Lennard-Jones e o de esfera-rígida, respectivamente. Pode-se observar que o constituinte de maior massa tem um tensor tensão maior e a medida que o parâmetro de rarefação cresce o tensor

tensão de cada constituinte decresce. Então Π_{α} diminui com o aumento de δ e o gás mais pesado apresenta maior Π_{α} pois o transporte é maior e é proporcional a massa.

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

- i) O perfil da velocidade de cada constituinte, isto é, u_1 e u_2 , são praticamente funções lineares de coordenada y. Assim, é suficiente analisar somente a velocidade perto do plano superior, isto é em y=1/2. Neste ponto as velocidades variam de 0 para 1/2 quando o parâmetro de rarefação δ varia de 0 para ∞ , pois as placas foram movidas com uma velocidade relativa de U/2. Os valores da velocidade de cada constituinte, perto do plano superior (y=1/2), para a mistura Ne-Ar, são dadas na Tab. (9) para o potencial Lennard-Jones. Pode ser visto que para $C_0=0,1$ e 0,5, o constituinte de massa menor tem uma velocidade menor. Em $C_0=0,9$ as velocidades dos constituintes são praticamente iguais. Tem-se este mesmo comportamento para as outras duas misturas He-Xe e He-Ar.
- ii) Na Tab. (10) tem-se os valores da velocidade V das misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe para o potencial Lennard-Jones em função de y. Para o caso de mistura binária, a velocidade dimensional da mistura $V' = \sum_{i=1}^2 \mathbf{u}_{\alpha}$, que adimensionalmente é dada por $V = (m_1 u_1 + m_2 u_2)/(m_1 + m_2)$. Esta velocidade V é tomada como a média ponderada entre as velocidades u_1 e u_2 que são grandezas adimensionais dadas pela Eq. (35).
- iii) As placas foram movidas com uma velocidade relativa de U/2. Em y=0, $u_1=u_2=0$ e a velocidade da mistura é nula.
- iv) O perfil da velocidade V da mistura é linear e simétrico em relação a origem, conforme a Fig. (1), para o potencial de esfera-rígida. Este mesmo comportamente se obtém para o potencial Lennard-Jones e independente do parâmetro de rarefação e concentração utilizados, ou seja, as três misturas apresentam o mesmo comportamento e velocidades praticamente iguais. Assim basta analisar os dados apenas entre uma das seguintes razões, $-\frac{D}{2} \le y \le 0$ ou $0 \le y \le \frac{D}{2}$.
- v) Nota-se também que para o perfil da velocidade positiva, as partículas que se encontram mais próximas das placas apresentam uma velocidade maior enquanto que esta velocidade vai diminuindo chegando a zero no ponto v = 0.

Tabela 2. Análise de δ_1 e δ_2 para misturas binárias e concentração $C_0=0,1$

	1 2 -										
	$C_0 = 0.1$										
	Ne-	-Ar	Не	-Ar	He	-Xe					
δ	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2					
0,01	0,0081	0,01	0,0076	0,0099	0,0059	0,0098					
0,1	0,081	0,1	0,076	0,099	0,059	0,098					
1	0,81	1	0,76	0,99	0,59	0,98					
2	1,62	2	1,52	1,98	1,18	1,96					
4	3,24	4	3,04	3,96	2,36	3,92					
10	8,1	10	7,6	9,9	5,9	9,8					
20	16,2	20	15,2	19,8	11,8	19,6					
40	32,4	40	30,4	39,6	23,6	39,2					

Tabela 3. Análise de δ_1 e δ_2 para misturas binárias e concentração $C_0=0.5$

	$C_{0} = 0.5$										
	Ne-	-Ar	Не	-Ar	Не	-Xe					
δ	δ_1 δ_2		δ_1	δ_2	δ_1	δ_2					
0,01	0,0088	0,011	0,0078	0,0093	0,006	0,0087					
0,1	0,088	0,11	0,078	0,093	0,06	0,087					
1	0,88	1,1	0,78	0,93	0,6	0,87					
2	1,76	2,2	1,56	1,86	1,2	1,74					
4	3,52	4,4	3,12	3,72	2,4	3,48					

10	8,8	11	7,8	9,3	6	8,7
20	17,6	22	15,6	18,6	12	17,4
40	32,2	44	31,2	37,2	24	34,8

Tabela 4. Análise de $\,\delta_{1}\,$ e $\,\delta_{2}\,$ para misturas binárias e concentração $\,C_{0}=0.9\,$

	$C_0 = 0.9$										
	Ne-	-Ar	Не	-Ar	Не	-Xe					
δ	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2	δ_1	δ_2					
0,01	0,0097	0,012	0,0088	0,0089	0,0073	0,0071					
0,1	0,097	0,11	0,088	0,089	0,073	0,071					
1	0,97	1,2	0,88	0,89	0,73	0,71					
2	1,94	2,4	1,76	1,78	1,46	1,42					
4	3,88	4,8	3,52	3,56	2,92	2,84					
10	9,7	12	8,8	8,9	7,3	7,1					
20	19,4	24	17,6	17,8	14,6	14,2					
40	38,8	48	35,2	35,6	29,2	28,4					

Tabela 5. Tensor tensão $\,\Pi\,$ da mistura vs o parâmetro de rarefação $\,\delta\,$ e concentração $\,C_0\,$, Potencial Lennard-Jones

		П										
	Ne-Ar				He-Ar			He-Xe				
δ	$C_0 = 0,1$	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9			
0,01	0,2866	0,3220	0,3744	0,2931	0,3773	0,6419	0,2943	0,3902	0,7857			
0,1	0,2660	0,2983	0,3429	0,2736	0,3541	0,6039	0,2753	0,3683	0,7498			
1	0,1663	0,1873	0,2089	0,1766	0,2356	0,4081	0,1796	0,2519	0,5439			
4	0,07857	0,09031	0,09988	0,08602	0,1190	0,2092	0,08852	0,1309	0,3012			
10	0,03870	0,04527	0,05008	0,04298	0,06080	0,1073	0,04448	0,06781	0,1610			
40	0,01096	0,01304	0,01445	0,01230	0,01777	0,03147	0,01278	0,02002	0,04856			

Tabela 6. Tensor tensão Π da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , Potencial esfera-rígida

		Π										
	Ne-Ar				He-Ar			He-Xe				
δ	$C_0 = 0,1$	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9			
0,01	0,2783	0,2758	0,2778	0,2731	0,2484	0,2471	0,2701	0,2292	0,2019			
0,1	0,2583	0,2577	0,2598	0,2549	0,2336	0,2326	0,2525	0,2164	0,1919			
1	0,1614	0,1678	0,1699	0,1643	0,1568	0,1572	0,1648	0,1485	0,1361			
4	0,07591	0,08256	0,08406	0,07990	0,07965	0,08055	0,08115	0,07729	0,07394			
10	0,03742	0,04143	0,04230	0,03985	0,04067	0,04134	0,04075	0,04004	0,03935			
40	0,01051	0,01188	0,01216	0,01138	0,01182	0,01206	0,01169	0,01177	0,01183			

Tabela 7. Tensor tensão de cada constituinte para a mistura He-Xe, Potencial Lennard-Jones

	$C_0 = 0.1$		$C_0 =$	= 0,5	$C_0 = 0.9$		
δ	Π_1	Π_2	Π_1	Π_2	Π_1	Π_2	
0,01	0,05146	0,2701	0,06817	0,2292	0,1371	0,2019	
0,1	0,04859	0,2526	0,06462	0,2164	0,1300	0,1920	
1	0,03312	0,1650	0,04511	0,1485	0,09111	0,1364	
4	0,01676	0,08134	0,02374	0,07730	0,04880	0,07404	
10	0,008380	0,04087	0,01226	0,04404	0,02582	0,03934	
40	0,002282	0,01173	0,003502	0,01176	0,007717	0,01180	

Tabela 8. Tensor tensão de cada constituinte para a mistura He-Xe, potencial esfera-rígida

						, r		
		$C_0 = 0.1$		$C_0 =$	= 0,5	$C_0 = 0.9$		
	δ	Π_1	Π_2	Π_1	Π_2	Π_1	Π_2	
•	0,01	0,05137	0,2944	0,06808	0,3903	0,1370	0,7860	
	0,1	0,04787	0,2753	0,06391	0,3690	0,1295	0,7528	

1	0,03072	0,1797	0,04259	0,2544	0,08941	0,5564
4	0,01476	0,08853	0,02157	0,1330	0,04726	0,3141
10	0,007130	0,04449	0,01092	0,06915	0,02492	0,1692
40	0,001652	0,01281	0,002895	0,02064	0,007407	0,05163

Tabela 9. Velocidade de cada constituinte na distância y = 1/2 para a mistura Ne-Ar, potencial Lennard-Jones

	C_0 =	= 0,1	$C_0 =$	= 0,5	$C_0 = 0.9$		
δ	u_1	u_2	u_1	u_2	u_1	u_2	
0,01	0,01080	0,01297	0,01074	0,01385	0,01188	0,01120	
0,1	0,06544	0,07627	0,06529	0,07872	0,07033	0,08942	
1	0,2385	0,2627	0,2371	0,2624	0,2469	0,2735	
4	0,3765	0,3914	0,3732	0,3883	0,3789	0,3934	
10	0,4393	0,4467	0,4365	0,4441	0,4393	0,4466	
40	0,4830	0,4849	0,4819	0,4839	0,4826	0,4846	

Tabela 10. Velocidade V da mistura vs o parâmetro de rarefação δ e concentração C_0 , potencial Lennard-Jones

		V										
	Ne-Ar				He-Ar		He-Xe					
δ	$C_0 = 0,1$	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9	0,1	0,5	0,9			
0,01	0,01224	0,01281	0,01541	0,01227	0,01148	0,01150	0,01216	0,01055	0,008709			
0,1	0,07263	0,07421	0,08301	0,07234	0,06859	0,06802	0,07166	0,06665	0,05592			
1	0,2546	0,2539	0,2646	0,2519	0,2420	0,2383	0,2496	0,2330	0,2114			
4	0,3864	0,3832	0,3885	0,3829	0,3739	0,3704	0,3807	0,3664	0,3475			
10	0,4442	0,4416	0,4441	0,4417	0,4358	0,4338	0,4403	0,4311	0,4191			
40	0,4843	0,4833	0,4839	0,4834	0,4813	0,4807	0,4829	0,4797	0,4757			

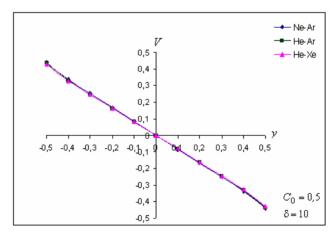


Figura 2. Distância y vs a velocidade V da mistura e concentração $C_0=0.5\,$ para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, potencial esfera-rígida, $\delta=10\,$

5. Conclusões

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

No regime cinético o parâmetro de rarefação δ pode assumir valores muito pequenos enquanto que no regime hidrodinâmico este mesmo parâmetro poderá assumir valores muito grandes. Portanto o objetivo é poder comparar

através da variação do parâmetro de rarefação δ o comportamento do tensor tensão e a velocidade hidrodinâmica da mistura pois, no limite do regime cinético para o regime hidrodinâmico, o tensor tensão e a velocidade hidrodinâmica da mistura obtidos na solução cinética formada pelo sistema de equações (32) e (33), tem que ser aproximadamente igual aos obtidos através da solução hidrodinâmica de equações (14) e (15).

Uma comparação dos valores numéricos do tensor tensão Π da mistura obtidos na solução cinética com os valores analíticos obtidos na solução hidrodinâmica (15) na condição de deslizamento estão mostrados na Tab. (11). Pode ser visto que para $\delta \geq 10$ a solução analítica (15) coincide com a solução numérica da equação cinética dentro da precisão numérica. No alcance $1 \leq \delta < 10$ a solução (15) fornece uma boa aproximação. Para $0,01 \leq \delta < 1$ a solução analítica e a solução cinética não coincidem pois se está no regime de escoamento de moléculas livres. Concluí-se que para grandes valores do parâmetro de rarefação δ , a solução analítica da equação de Navier-Stokes com a condição de deslizamento na velocidade pode ser aplicada com sucesso se o coeficiente de deslizamento viscoso correspondente for correto.

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

A Tab. (12) mostra os valores numéricos da velocidade V, da mistura obtidos na solução cinética com os valores analíticos obtidos na solução hidrodinâmica (14) na condição de deslizamento. Pode ser visto que para $\delta=40\,$ a solução (14) se aproxima da solução numérica da equação cinética. Percebe-se que a diferença entre os valores da velocidade hidrodinâmica da solução (14) com a solução numérica para a mistura Ne-Ar são menores, enquanto que para a mistura He-Xe a diferença entre os valores são maiores. Pode-se observar que a velocidade hidrodinâmica cresce com o aumento do parâmetro de rarefação.

Tabela 11. Comparação da solução numérica do tensor tensão Π da mistura com a solução analítica (15) para $C_0=0.5$, Lennard-Jones

· ·											
	Π										
	Ne-Ar		Ne-Ar		Ne-Ar						
	$\sigma_P = 1,040$		$\sigma_{P} = 1,150$		$\sigma_{P} = 1,259$						
δ	resultado	Eq (15)	resultado	Eq (15)	resultado	Eq (15)					
	numérico		numérico		numérico						
0,1	0,2660	0,2294	0,2983	0,2083	0,3429	0,1910					
1	0,1663	0,1623	0,1873	0,1515	0,2089	0,1421					
4	0,07857	0,08224	0,09031	0,07937	0,09988	0,07671					
10	0,03870	0,04139	0,04527	0,04065	0,05008	0,03994					
40	0,01096	0,01188	0,01304	0,01182	0,01445	0,01176					

Tabela 12. Comparação da solução numérica da velocidade V da mistura com a solução analítica (14) para $\,C_0=0.5\,$,

Lennard-Jones										
	Π									
	Ne-Ar		Ne-Ar		Ne-Ar					
	$\sigma_{P} = 1,040$		$\sigma_{P} = 1,150$		$\sigma_{P} = 1,259$					
δ	resultado	Eq (14)	resultado	Eq (14)	resultado	Eq (14)				
	numérico		numérico		numérico					
0,1	0,07263	0,02294	0,07421	0,02083	0,08301	0,01910				
1	0,2546	0,1623	0,2539	0,1515	0,2646	0,1421				
4	0,3864	0,3289	0,3832	0,3175	0,3885	0,3068				
10	0,4442	0,4139	0,4416	0,4065	0,4441	0,3994				
40	0,4843	0,4753	0,4833	0,4728	0,4839	0,4704				

Acknowledgements

Os autores agradecem ao Dr. G. M. Kremer por sua discussões sobre este artigo. Os autores também agradecem a Fundação Araucária pelo suporte a esta pesquisa.

6. Referências

Bird, G. A., 1976, "Molecular gas dynamics", Clarendon Press – Oxford. Cercignani, C., 1988, "The Boltzmann Equation and its Application",(Springer, New York).

Cercignani, C., & Sharipov, F., 1992, "Gaseous mixture slit flow at intermediate Knudsen numbers", Fhys. Fluids, vol. 16, pp. 2095.

Cercignani, C., Lampis, M., & Lentati, A., 1994, "Calculation of the slip coefficient for a mixture. in: B.D. Shizgal, D.P. Weaver (Eds.), Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulation", 18th. Symp., Vancuver, Canada, Progr. Astron. Aeron., AIP, Washington, vol. 159, pp. 565-573.

Cercignani, C., 2000, "Rarefied Gas Dynamics". (Cambridge University Press).

Chadwick, P., 1976, "Continuum mechanics - concise theory and problems", London George Allen & Unwin Ltd.

Ivchenko, I. N., Loyalka, S. K., & Thompson, R. V., 1997, "Slip coefficients for binary gas mixture", J. Vac. Sci. Technol. A, vol. 15, pp. 2375-2381.

Ivchenko, I. N., Loyalka, S. K., & Thompson, R. V., 2002, "Boundary slip phenomena in a binary gas mixture", Z. Angew. Math. Phys, vol. 53, n. 1, pp. 58-72.

Kestin, J., Knierim, K., Mason, E. A., Najafi, B., Ro, S. T., & Waldman, M., 1984, "Equilibrium and Transport Properties of the Noble Gases and Their Mixtures at Low Density", J. Phys. Chem. Ref. Data, vol. 13, n. 1.

Kogan, M. N., 1969, "Rarefied Gas Dynamics". (Plenum, New York).

Kremer, G. M., 2003, "Uma introdução à Equação de Boltzmann". Departamento de Física, UFPR.

Landau, L. D., & Lifshitz, E. M., 1976, "Theoretical physics", Statistical Physics, Part 1 (Nauka, Moscow) ch. XII, 5.

McCormack, F. J., 1973, "Construction of linearized kinetic models for gaseous mixtures and molecular gases", Physics of Fluids, vol. 16, pp. 2095.

Ohwada, T., 1998, "Higher order approximation methods for the Boltzmann Equation", J. of Computational Physics, vol. 139, n. 1.

Sharipov, F., & Subbotin, E. A., 1993, "On optimization of the discrete velocity method used in rarefied gas dynamics", ZAMP, vol. 44.

Sharipov, F., & Seleznez, V., 1998, "Data on internal gas flows", J. Phys. Chem. Ref. Data 27, pp. 657-706.

Sharipov, F., & Kalempa, D., 2002, "Gaseous mixture flow through a long tube at arbitrary Knudsen number", J. Vac. Sci Technol, vol. 20, n. 3.

Sharipov, F., & Kalempa, D., 2003, "Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous slip coefficient", Fhys. Fluids, vol. 15, n. 6, pp. 1800-1806.

7. Direitos Autorais

HYDRODYNAMICAL SOLUTION AND KINETIC MODEL FOR BINARY MIXTURES

Coqueiro Valdete dos Santos

vcoqueiro@yahoo.com.br

Liliana Madalena Gramani Cumin

 $\label{eq:continuous} Department of Mathematics - UFPr - Postbox \ 19044, PC \ 81531-990 - Curitiba - Paraná - Brasil gramani@mat.ufpr.br$

Abstract

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

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