

## UM PROBLEMA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NA DINÂMICA DE GASES RAREFEITOS

**Caio Sarmento Scherer**

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS - Rua Sarmento Leite, 425 - Porto Alegre, RS, 90050-170  
cscherer@mecanica.ufrgs.br

**Liliane Basso Barichello**

Instituto de Matemática - UFRGS - Av. Bento Gonçalves, 9500 - Porto Alegre, RS, 91509-900  
lbaric@mat.ufrgs.br

**Resumo.** Neste trabalho, consideramos o problema relativo à transferência de calor em um gás rarefeito confinado em um microcanal. Em particular, as perturbações de densidade, temperatura e o fluxo de calor são obtidos pela solução em ordenadas discretas desenvolvida para o modelo cinético Gross-Jackson da equação linearizada de Boltzmann. Resultados numéricos são apresentados para diferentes valores do número de Knudsen.

**Palavras chave:** Transferência de calor, Gross-Jackson, Equação linearizada de Boltzmann, Ordenadas discretas, Modelos cinéticos

### 1. Introdução

Neste trabalho, busca-se resolver um problema de transferência de calor associado ao comportamento de um gás contido num canal plano e no regime de transição, cuja perturbação do estado de equilíbrio é causada por temperaturas diferentes nas paredes do canal (Williams, 2001). Estando o gás no regime de transição, o problema é modelado pela equação linearizada de Boltzmann (ELB). Segundo Cercignani (Cercignani, 1988), um dos maiores problemas encontrados ao se trabalhar com a equação de Boltzmann é a complicada estrutura do termo integral associado às colisões. Por essa razão, não é surpresa que uma alternativa proposta para contornar esse problema seja substituir o núcleo de colisão por expressões mais simples. Essas expressões são chamadas de modelos de colisão, e uma equação simplificada de Boltzmann, onde a integral de colisão é substituída por um modelo de colisão, é chamada de equação modelo ou modelo cinético.

Para descrever o processo de colisão entre as partículas do gás no problema mencionado, foram escolhidos os modelos cinéticos BGK, S e Gross-Jackson, os quais são abordados em detalhes nas referências (Bhatnagar *et al.*, 1954; Shakov, 1968; Gross e Jackson, 1959). Assim, pretende-se estabelecer um tratamento unificado para estes três modelos, uma vez que, mediante a escolha apropriada de certos parâmetros, os mesmos podem ser descritos através de uma expressão geral.

Vários trabalhos já foram desenvolvidos com o objetivo de resolver problemas em dinâmica de gases rarefeitos com o método analítico de ordenadas discretas (ADO) (Barichello e Siewert, 1999). Na resolução dos problemas de Poiseuille, "Creep" térmico, Couette, Kramers e Deslizamento térmico, pode-se destacar as referências (Cabrera e Barichello, 2006; Barichello *et al.*, 2001; Siewert, 2002; Camargo e Barichello, 2004). Soluções para os problemas de transferência de calor e do salto de temperatura encontram-se em (Siewert, 1999; Barichello e Siewert, 2000; Barichello *et al.*, 2002; Siewert, 2003; Siewert, 2005; Garcia e Siewert, 2004).

Neste sentido, o problema de transferência de calor é abordado, neste trabalho, segundo o método de analítico de ordenadas discretas, com os modelos S e Gross-Jackson, para os quais ainda não se tinha resultados na literatura, buscando-se, entre outros aspectos, estabelecer comparações com resultados existentes para os demais modelos cinéticos e a equação linearizada de Boltzmann e, em especial, para analisar o fluxo de um gás em um microcanal.

### 2. Formulação Matemática

#### 2.1. Definição dos problemas

O problema de transferência de calor, no regime de transição, pode ser modelado pela equação linearizada de Boltzmann ou por modelos cinéticos, com condições de contorno apropriadas. Pode-se escrever o problema mencionado como

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h(\tau, \mathbf{c}) + \varepsilon h(\tau, \mathbf{c}) = \varepsilon \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h(\tau, \mathbf{c}') F(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) d\mathbf{c}'_x d\mathbf{c}'_y d\mathbf{c}'_z, \quad (1)$$

onde  $h(\tau, \mathbf{c})$  é uma perturbação da distribuição de partículas à partir da distribuição Maxwelliana absoluta e  $F(\mathbf{c}' : \mathbf{c})$  é o núcleo de espalhamento do modelo a ser utilizado. Como neste trabalho serão utilizados os modelos BGK, S e Gross-Jackson

$$F(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = 1 + 2(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}) + (2/3)(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2) + \beta M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) + \varpi N(\mathbf{c}' : \mathbf{c}), \quad (2)$$

onde

$$M(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = (4/5)(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2), \quad (3)$$

$$N(\mathbf{c}' : \mathbf{c}) = 2[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2]. \quad (4)$$

Para obter o núcleo de cada modelo cinético deve-se fazer as escolhas dos parâmetros da seguinte maneira: para o modelo BGK usa-se  $\beta = \varpi = 0$ , para o modelo S,  $\beta = 1/3$  e  $\varpi = 0$ , e para o modelo Gross-Jackson deve-se escolher  $\beta = 5/9$  e  $\varpi = 1/3$  (Scherer, 2005).

Ainda em relação a Eq. (1),  $\tau = x/l$  é a variável espacial adimensionalizada pelo livre caminho médio  $l$  e  $\mathbf{c}$  é o vetor velocidade adimensional com coordenadas retangulares  $(c_x, c_y, c_z)$  e magnitude  $c$ . Assim,  $h(\tau, \mathbf{c}) = h(\tau, c_x, c_y, c_z)$ .

O parâmetro  $\varepsilon$  é dado por

$$\varepsilon = \sigma_0^2 n_0 \pi^{1/2} l, \quad (5)$$

onde  $\sigma_0$  é o diâmetro de colisão das partículas de gás (em esferas rígidas) e  $n_0$  é a densidade das partículas. Como o problema de transferência de calor é um problema em canal plano de largura  $2a$ , tem-se  $\tau \in [-a, a]$ .

## 2.2. Quantidades de Interesse

As quantidades de interesse físico a serem determinadas são as perturbações de densidade e temperatura definidas, respetivamente, como

$$N(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} h(\tau, \mathbf{c}) d\mathbf{c}_x d\mathbf{c}_y d\mathbf{c}_z \quad (6)$$

e

$$T(\tau) = \frac{2}{3} \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 3/2) h(\tau, \mathbf{c}) d\mathbf{c}_x d\mathbf{c}_y d\mathbf{c}_z. \quad (7)$$

Ainda, se deseja determinar o fluxo de calor entre as paredes dado por

$$Q_x = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 5/2) h(\tau, \mathbf{c}) c_x d\mathbf{c}_x d\mathbf{c}_y d\mathbf{c}_z. \quad (8)$$

Nota-se que multiplicando a Eq. (1) por  $c^k e^{-c^2}$  para  $k = 0, 2$ , integrando-se para todo  $c_x, c_y, c_z$ , e usando-se as informações das condições de contorno, obtém-se que o fluxo de calor é constante (Williams, 2001).

## 2.3. Condições de Contorno

As condições de contorno associadas à Eq. (1) são escritas como

$$h(-a, c_x, c_y, c_z) = \alpha_1 \delta_1 (c^2 - 2) + (1 - \alpha_1) h(-a, -c_x, c_y, c_z) + \frac{2\alpha_1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(-a, -c'_x, c'_y, c'_z) c'_x d\mathbf{c}'_x d\mathbf{c}'_y d\mathbf{c}'_z, \quad c_x > 0 \quad (9)$$

e

$$h(a, c_x, c_y, c_z) = \alpha_2 \delta_2 (c^2 - 2) + (1 - \alpha_2) h(a, -c_x, c_y, c_z) + \frac{2\alpha_2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-c'^2} h(a, c'_x, c'_y, c'_z) c'_x d\mathbf{c}'_x d\mathbf{c}'_y d\mathbf{c}'_z, \quad c_x < 0 \quad (10)$$

onde

$$\delta_1 = \frac{T_{\omega 1} - T_0}{T_0} \quad \text{e} \quad \delta_2 = \frac{T_{\omega 2} - T_0}{T_0}. \quad (11)$$

Na Eq. (11),  $T_{\omega 1}$  e  $T_{\omega 2}$  são as temperaturas das paredes localizadas em  $\tau = -a$  e  $\tau = a$ , respectivamente, e  $T_0$  é uma temperatura de referência. Usa-se  $\alpha_1, \alpha_2 \in (0, 1]$  para denotar os coeficientes de acomodação do gás nessas mesmas paredes. A temperatura  $T_0$  não é necessariamente a média entre as temperaturas  $T_{\omega 1}$  e  $T_{\omega 2}$ , mas para que estas temperaturas não sejam negativas e o problema seja fisicamente possível, é necessário que  $\delta_1$  e  $\delta_2$  sejam maiores ou iguais a  $-1$  (Scherer, 2005).

### 3. Formulação vetorial do problema

Observa-se nas Eqs. (6) a (8) que as quantidades de interesse são definidas em termos de integrais que envolvem a função  $h(\tau, \mathbf{c})$ . Dessa forma, ao invés de tratar-se diretamente com a Eq. (1), define-se problemas auxiliares que facilitam a resolução do problema original. Assim, define-se

$$g_1(\tau, c_x) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z \quad (12)$$

e

$$g_2(\tau, c_x) = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (c_y^2 + c_z^2 - 1) e^{-(c_y^2 + c_z^2)} h(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z. \quad (13)$$

Multiplica-se a Eq. (1) por

$$\phi_1(c_y, c_z) = \pi^{-1} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \quad (14)$$

e integra-se para todo  $c_y, c_z$ . Da mesma forma, multiplica-se a Eq. (1) por

$$\phi_2(c_y, c_z) = \pi^{-1} (c_y^2 + c_z^2 - 1) e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \quad (15)$$

e integra-se novamente para todo  $c_y, c_z$ . Fazendo  $c_x = \xi$  obtém-se

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') d\xi', \quad (16)$$

onde  $\mathbf{G}(\tau, \xi)$  é o vetor de dimensão  $2 \times 1$  com componentes  $g_1(\tau, \xi)$  e  $g_2(\tau, \xi)$ ,  $\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2}$  e as componentes do núcleo são dadas por

$$k_{11}(\xi', \xi) = 1 + 2\xi\xi' + (2/3)(\xi^2 - 1/2)(\xi'^2 - 1/2) + (4/5)\beta\xi\xi'(\xi^2 - 3/2)(\xi'^2 - 3/2) + 2\varpi [(2/3)\xi^2\xi'^2 - (1/3)(\xi^2 + \xi'^2) + 1/6], \quad (17)$$

$$k_{12}(\xi', \xi) = (2/3)(\xi^2 - 1/2) + (4/5)\beta\xi\xi'(\xi^2 - 3/2) + 2\varpi [1/6 - (1/3)\xi^2], \quad (18)$$

$$k_{21}(\xi', \xi) = (2/3)(\xi'^2 - 1/2) + (4/5)\beta\xi\xi'(\xi'^2 - 3/2) + 2\varpi [1/6 - (1/3)\xi'^2], \quad (19)$$

e

$$k_{22}(\xi', \xi) = 2/3 + (4/5)\beta\xi\xi' + (1/3)\varpi. \quad (20)$$

Para encontrar-se condições de contorno condizentes com a Eq. (16), repete-se o procedimento acima nas Eqs. (9) e (10) obtendo-se para  $\xi > 0$

$$\mathbf{G}(\mp a, \pm \xi) = (1 - \alpha_j) \mathbf{G}(\mp a, \mp \xi) + 2\alpha_j \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \int_0^{\infty} \mathbf{G}(\mp a, \mp \xi') e^{-\xi'^2} \xi' d\xi' + \alpha_j \delta_j \begin{bmatrix} \xi^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (21)$$

onde  $j = 1, 2$ . Ainda usando-se as Eqs. (12) e (13), encontra-se para as perturbações da densidade e da temperatura, em termos da solução  $\mathbf{G}(\tau, \xi)$ , as expressões

$$N(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi \quad (22)$$

e

$$T(\tau) = \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi, \quad (23)$$

e para o fluxo de calor

$$Q_x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \xi \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi. \quad (24)$$

A fim de se fazer comparações dos resultados deste trabalho com outros, segue-se (Siewert, 2003) e calcula-se o fluxo de calor normalizado definido como

$$q = \frac{1}{Q_{fm}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \xi \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{G}(\tau, \xi) d\xi, \quad (25)$$

onde  $Q_{fm}$  é o fluxo de calor adimensional em condições de moléculas livres dado por

$$Q_{fm} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 (\delta_1 - \delta_2)}{(\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_2) \pi^{1/2}}. \quad (26)$$

#### 4. Solução em ordenadas discretas

Primeiramente notando-se que  $\psi(\xi) = \psi(-\xi)$ , escreve-se o termo integral da Eq. (16) como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \int_0^{\infty} \psi(\xi') [\mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi') + \mathbf{K}(-\xi', \xi) \mathbf{G}(\tau, -\xi')] d\xi'. \quad (27)$$

Introduzindo-se um esquema de quadratura para o intervalo  $[0, \infty)$ , pode-se discretizar a integral da Eq. (27) e escrever a equação resultante na forma

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}(\tau, \xi) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \xi) = \varepsilon \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \xi) \mathbf{G}(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \xi) \mathbf{G}(\tau, -\xi_k)], \quad (28)$$

onde  $\{\xi_k, \omega_k\}$  são os  $N$  pontos e pesos da quadratura. Fazendo-se  $\xi = \pm \xi_i$  na Eq. (28), para  $i = 1, \dots, N$ , obtém-se o sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\pm \xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) + \varepsilon \mathbf{G}(\tau, \pm \xi_i) = \varepsilon \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{G}(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{G}(\tau, -\xi_k)]. \quad (29)$$

Para problemas da forma da Eq. (29) procura-se soluções da forma

$$\mathbf{G}(\tau, \xi) = \Phi(\nu, \xi) e^{-\varepsilon \tau / \nu}, \quad (30)$$

onde  $\Phi(\nu, \xi)$  é o vetor de dimensão  $2 \times 1$  com componentes  $\Phi_1(\nu, \xi)$  e  $\Phi_2(\nu, \xi)$ . Assim, substituindo-se a Eq. (30) na Eq. (29) obtém-se

$$(1 \mp \xi_i / \nu) \Phi(\nu, \pm \xi_i) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) [\mathbf{K}(\xi_k, \pm \xi_i) \Phi(\nu, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm \xi_i) \Phi(\nu, -\xi_k)]. \quad (31)$$

Fazendo  $i = 1, \dots, N$  pode-se escrever matricialmente a Eq. (31) como

$$(\mathbf{I} - \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_+(\nu) = \mathbf{W}(+, +) \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}(-, +) \Phi_-(\nu) \quad (32)$$

e

$$(\mathbf{I} + \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_-(\nu) = \mathbf{W}(+, -) \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}(-, -) \Phi_-(\nu), \quad (33)$$

onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade de dimensão  $2N \times 2N$ ,  $\mathbf{M}$  é a matriz de dimensão  $2N \times 2N$  definida como

$$\mathbf{M} = \text{diag} \{ \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N \}, \quad (34)$$

$\Phi_{\pm}(\nu)$  são vetores  $2N \times 1$  dados por

$$\Phi_{\pm}(\nu) = [ \Phi_1(\nu, \pm \xi_1) \quad \dots \quad \Phi_1(\nu, \pm \xi_N) \quad \Phi_2(\nu, \pm \xi_1) \quad \dots \quad \Phi_2(\nu, \pm \xi_N) ]^T \quad (35)$$

e

$$\mathbf{W}(\pm, \pm) = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{11}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{12}(\pm, \pm) \\ \mathbf{W}_{21}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{22}(\pm, \pm) \end{bmatrix}, \quad (36)$$

onde os elementos da matriz  $2N \times 2N$   $\mathbf{W}(\pm, \pm)$  são submatrizes  $N \times N$  definidas como

$$[\mathbf{W}_{m,n}(\pm, \pm)]_{i,j} = \omega_j \psi(\xi_j) k_{m,n}(\pm \xi_j, \pm \xi_i) \quad (37)$$

para  $m, n = 1, 2$  e  $i, j = 1, \dots, N$ . A matriz  $\mathbf{K}(\xi', \xi)$  apresenta propriedades (Scherer, 2005) que permitem escrever a matriz  $\mathbf{W}(\pm, \pm)$  como

$$\mathbf{W}_+ = \mathbf{W}(+, +) = \mathbf{W}(-, -) \quad \text{e} \quad \mathbf{W}_- = \mathbf{W}(+, -) = \mathbf{W}(-, +). \quad (38)$$

Usando a Eq. (38), as Eqs. (32) e (33) podem ser reescritas como

$$(\mathbf{I} - \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_+(\nu) = \mathbf{W}_+ \Phi_+(\nu) + \mathbf{W}_- \Phi_-(\nu) \quad (39)$$

e

$$(\mathbf{I} + \mathbf{M}\nu^{-1}) \Phi_{-}(\nu) = \mathbf{W}_{-}\Phi_{+}(\nu) + \mathbf{W}_{+}\Phi_{-}(\nu). \quad (40)$$

Agora, seja

$$\mathbf{U} = \Phi_{+}(\nu) + \Phi_{-}(\nu), \quad (41)$$

onde  $\Phi_{+}(\nu)$  e  $\Phi_{-}(\nu)$  são vetores  $2N \times 1$  dados pela Eq. (35). Somando-se e subtraindo-se as Eqs. (39) e (40) e usando-se a Eq. (41) obtém-se o problema de autovalor

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \lambda\mathbf{X}, \quad (42)$$

onde  $\mathbf{A}$  é a matriz de dimensão  $2N \times 2N$ ,  $\mathbf{X}$  é o vetor  $2N \times 1$  dados, respectivamente, por

$$\mathbf{A} = (\mathbf{W}_{+} - \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{W}_{+} + \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1} \quad \text{e} \quad \mathbf{X} = \mathbf{M}\mathbf{U} \quad (43)$$

e os autovalores, que neste caso são reais, são dados por  $\lambda = \nu^{-2}$ . A Eq. (42) gera um conjunto de  $2N$  constantes de separação  $\nu_j$  e  $2N$  autovetores  $\mathbf{X}(\nu_j)$ . Usando as Eqs. (39) e (40) encontra-se as soluções elementares de dimensão  $2N \times 1$

$$\Phi_{+}(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1} [\mathbf{I} - \nu_j(\mathbf{W}_{+} + \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}] \mathbf{X}(\nu_j) \quad (44)$$

e

$$\Phi_{-}(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1} [\mathbf{I} + \nu_j(\mathbf{W}_{+} + \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1}] \mathbf{X}(\nu_j). \quad (45)$$

Determinadas as constantes de separação  $\nu_j$  e as soluções elementares  $\Phi_{+}(\nu_j)$  e  $\Phi_{-}(\nu_j)$ , pode-se então escrever a solução do problema em ordenadas discretas como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \sum_{j=1}^{2N} \left[ A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j} \right]. \quad (46)$$

Ao resolver o problema de autovalor dado pela Eq. (42), encontra-se dois autovalores degenerados e, conseqüentemente, deve-se acrescentar quatro soluções exatas à Eq. (46). Assim, a solução em ordenadas discretas do problema pode ser escrita como

$$\mathbf{G}(\tau, \pm\xi_i) = \mathbf{G}^*(\tau, \pm\xi_i) + \sum_{j=1}^{2N-2} \left[ A_j \Phi(\nu_j, \pm\xi_i) e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \mp\xi_i) e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j} \right], \quad (47)$$

onde

$$\mathbf{G}^*(\tau, \xi) = A_1^* \mathbf{G}_1 + A_2^* \mathbf{G}_2(\xi) + B_1^* \mathbf{G}_3(\xi) + B_2^* \mathbf{G}_4(\tau, \xi). \quad (48)$$

Neste caso, as soluções exatas propostas são

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_2(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_3(\xi) = \begin{bmatrix} \xi \\ 0 \end{bmatrix} \quad (49)$$

e

$$\mathbf{G}_4(\tau, \xi) = \tau \mathbf{H}(\xi) + \mathbf{F}(\xi), \quad \text{onde} \quad \mathbf{H}(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (50)$$

e  $\mathbf{F}(\xi)$  é uma função a ser determinada para que se conheça a função  $\mathbf{G}_4(\tau, \xi)$ . Substituindo-se a Eq. (50) na Eq. (16) obtém-se

$$\mathbf{F}(\xi) = -(\xi/\varepsilon)\mathbf{H}(\xi) + \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{F}(\xi') d\xi'. \quad (51)$$

A função  $\mathbf{F}(\xi)$  pode ser expressa como (Garcia e Siewert, 2004; Siewert, 2005)

$$\mathbf{F}(\xi) = \sum_{\alpha=0}^3 P_{\alpha}(\xi) \mathbf{F}_{\alpha}, \quad (52)$$

onde

$$P_0(\xi) = 1, \quad P_1(\xi) = \xi, \quad P_2(\xi) = \xi^2 - 1/2 \quad \text{e} \quad P_3(\xi) = \xi(\xi^2 - 3/2). \quad (53)$$

Substituindo a Eq. (52) na Eq. (51), multiplicando a equação resultante por  $\psi(\xi)P_k(\xi)$ , para  $k = 0, 1, 2, 3$  e integrando para todo  $\xi$ , obtém-se um sistema linear com oito equações lineares e oito incógnitas, que, ao contrário do obtido no caso de misturas (Siewert, 2005), pode ser resolvido analiticamente para encontrar as componentes dos vetores  $\mathbf{F}_\alpha$ . Resolvendo esse sistema linear, encontra-se

$$\mathbf{F}(\xi) = \frac{\xi}{\varepsilon(\beta - 1)} \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (54)$$

Conhecidas as soluções exatas, o próximo passo é determinar-se os  $4N$  coeficientes  $A_1^*, A_2^*, B_1^*, B_2^*, A_j, B_j$  para  $j = 1, \dots, 2N - 2$  na Eq. (47). Para isso, são necessárias as versões em ordenadas discretas das condições de contorno dadas pela Eq. (21)

$$\mathbf{G}(\mp a, \pm \xi_i) = (1 - \alpha_j)\mathbf{G}(\mp a, \mp \xi_i) + 2\alpha_j \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k \mathbf{G}(\mp a, \mp \xi_k) e^{-\xi_k^2} + \alpha_j \delta_j \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (55)$$

para  $j = 1, 2$ . Nota-se porém, que  $\mathbf{G}_1$  satisfaz a parte homogênea das condições de contorno e, por isso, o coeficiente  $A_1^*$  não pode ser determinado. Apesar disso, aplica-se a Eq. (47) na Eq. (55) e obtém-se o sistema linear com  $4N$  equações e  $4N - 1$  incógnitas

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \left\{ \Phi(\nu_j, \xi_i) - (1 - \alpha_1)\Phi(\nu_j, -\xi_i) - 2\alpha_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{S}_-(\nu_j) \right\} \\ & + \sum_{j=1}^{2N-2} B_j \left\{ \Phi(\nu_j, -\xi_i) - (1 - \alpha_1)\Phi(\nu_j, \xi_i) - 2\alpha_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{S}_+(\nu_j) \right\} e^{-2a\varepsilon/\nu_j} + \alpha_1 \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} A_2^* \\ & + \left[ \begin{array}{c} (2 - \alpha_1)\xi_i + (\alpha_1/2)\pi^{1/2} \\ 0 \end{array} \right] B_1^* + \left\{ \frac{(\alpha_1 - 2)\xi_i}{\varepsilon(1 - \beta)} \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix} - \alpha_1 a \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} \right\} B_2^* = \alpha_1 \delta_1 \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (56)$$

e

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{2N-2} A_j \left\{ \Phi(\nu_j, -\xi_i) - (1 - \alpha_2)\Phi(\nu_j, \xi_i) - 2\alpha_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{S}_+(\nu_j) \right\} e^{-2a\varepsilon/\nu_j} \\ & + \sum_{j=1}^{2N-2} B_j \left\{ \Phi(\nu_j, \xi_i) - (1 - \alpha_2)\Phi(\nu_j, -\xi_i) - 2\alpha_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{S}_-(\nu_j) \right\} + \alpha_2 \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} A_2^* \\ & + \left[ \begin{array}{c} (\alpha_2 - 2)\xi_i - (\alpha_2/2)\pi^{1/2} \\ 0 \end{array} \right] B_1^* + \left\{ \frac{(2 - \alpha_2)\xi_i}{\varepsilon(1 - \beta)} \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix} + \alpha_2 a \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} \right\} B_2^* = \alpha_2 \delta_2 \begin{bmatrix} \xi_i^2 - 1 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (57)$$

para  $i = 1, \dots, N$ , onde  $\Phi(\nu_j, \pm \xi_i)$  são vetores  $2 \times 1$  avaliados nos pontos de quadratura,

$$\mathbf{S}_-(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k e^{-\xi_k^2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \Phi(\nu_j, -\xi_k) \quad \text{e} \quad \mathbf{S}_+(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k e^{-\xi_k^2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \Phi(\nu_j, \xi_k). \quad (58)$$

Aplicando a Eq. (47) nas Eqs. (22) e (23) obtém-se para as perturbações da densidade e da temperatura

$$N(\tau) = A_1^* - B_2^* \tau + \sum_{j=1}^{2N-2} \left[ A_j e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] \mathbf{V}(\nu_j) \quad (59)$$

e

$$T(\tau) = A_2^* + B_2^* \tau + \frac{2}{3} \sum_{j=1}^{2N-2} \left[ A_j e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} + B_j e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j} \right] \mathbf{Y}(\nu_j), \quad (60)$$

onde

$$\mathbf{V}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)] \quad (61)$$

e

$$\mathbf{Y}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} \xi_k^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) + \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (62)$$

Aplicando a Eq. (47) na Eq. (25), obtém-se para o fluxo de calor normalizado

$$q = \frac{1}{Q_{fm}} \left\{ \frac{5}{4\varepsilon(\beta - 1)} B_2^* + \sum_{j=1}^{2N-2} [A_j e^{-\varepsilon(a+\tau)/\nu_j} - B_j e^{-\varepsilon(a-\tau)/\nu_j}] \mathbf{Z}(\nu_j) \right\}, \quad (63)$$

$$\mathbf{Z}(\nu_j) = \sum_{k=1}^N \omega_k \xi_k \psi(\xi_k) \begin{bmatrix} \xi_k^2 - 3/2 \\ 1 \end{bmatrix}^T [\Phi(\nu_j, \xi_k) - \Phi(\nu_j, -\xi_k)]. \quad (64)$$

Observa-se que o problema não possui solução única pois o coeficiente  $A_1^*$  não foi determinado com as condições de contorno. Assim, para determiná-lo, segue-se (Siewert, 1999) e usa-se a condição de normalização sobre a densidade

$$\int_{-a}^a N(\tau) d\tau = 0. \quad (65)$$

Assim, aplicando a Eq. (59) na Eq. (65) encontra-se

$$A_1^* = \frac{1}{2a\varepsilon} \sum_{j=1}^{2N-2} \nu_j (e^{-2a\varepsilon/\nu_j} - 1) (A_j + B_j) \mathbf{V}(\nu_j). \quad (66)$$

Ao fazer a implementação computacional do problema, nota-se que o somatório da Eq. (63) tende a zero à medida que se aumenta a quantidade de pontos de quadratura. Assim aproxima-se a expressão para o fluxo de calor normalizado como

$$q = \frac{5}{4\varepsilon(\beta - 1)Q_{fm}} B_2^*, \quad (67)$$

embora esta equação não possa ser obtida teoricamente.

## 5. Implementação Computacional

Para se obter os resultados numéricos das quantidades de interesse, primeiramente deve-se definir o esquema de quadratura a ser usado na solução em ordenadas discretas. Para isso, usou-se a transformação não linear  $u(\xi) = e^{-\xi}$  para mapear o intervalo  $[0, \infty)$  para o intervalo  $[0, 1]$  e então usa-se a quadratura de Gauss Legendre mapeada linearmente para o intervalo  $[0, 1]$  pela transformação  $v(u) = 2u - 1$ .

Definido o esquema de quadratura, desenvolve-se a implementação em FORTRAN da solução em ordenadas discretas. Calcula-se os autovalores e autovetores da Eq. (42) e depois determina-se as constantes de separação  $\nu_j$  e as soluções elementares  $\Phi_{\pm}(\nu_j)$  definidas pelas Eqs. (44) e (45). Para determinar os coeficientes necessários na Eq. (47), utiliza-se o método de mínimos quadrados para resolver o sistema linear formado pelas Eqs. (56) e (57), que possui uma incógnita a menos que o número de equações. A seguir, calcula-se as quantidades de interesse desejadas.

É importante definir o valor do parâmetro  $\varepsilon$  dado pela Eq. (5), que pode ser determinado utilizando-se o livre caminho médio  $l$  baseado na viscosidade ou na condutividade térmica. Assim, utiliza-se  $\varepsilon_p$  e  $\varepsilon_t$  para denotar o parâmetro  $\varepsilon$  associado, respectivamente, à viscosidade ou à condutividade térmica. Seguindo (Scherer, 2005), para o modelo BGK tem-se  $\varepsilon_p = \varepsilon_t = 1$ , para o modelo S encontra-se  $\varepsilon_p = 1$  e  $\varepsilon_t = 3/2$ , e para o modelo Gross-Jackson usa-se  $\varepsilon_p = 3/2$  e  $\varepsilon_t = 9/4$ .

## 6. Resultados Numéricos

Devido a não existência de resultados numéricos na literatura para o problema com os modelos S e Gross-Jackson não foi possível verificar os resultados obtidos nestes casos. Por isso, buscou-se outros aspectos para dar confiabilidade aos novos resultados. Entre estes aspectos, nota-se que aumentando o número de pontos de quadratura no método ADO

obtem-se convergência nos resultados encontrados. Além disso, para os casos onde já existem resultados numéricos na literatura, os valores encontrados com o modelo BGK se mostram corretos em todos os dígitos apresentados. E ainda, o fato de se ter utilizado um único programa para os três modelos cinéticos, que diferem apenas nos valores dos parâmetros  $\beta$  e  $\varpi$ , aumenta a confiabilidade dos resultados apresentados.

Ainda, a fim de se comparar os resultados obtidos com os já existentes em outros trabalhos, a Tab. (1) apresenta a perturbação de temperatura para o problema de transferência de calor. Resultados para o fluxo de calor normalizado com diferentes valores de  $a$ ,  $\alpha$  e  $\delta$  encontram-se na Tab. (2). Analisando a Tab. (1), observa-se de um modo geral que existe concordância de 1 a 2 dígitos entre os modelos cinéticos BGK, S e Gross-Jackson. Além disso, utilizando-se o livre caminho médio baseado na condutividade térmica ( $\varepsilon_t$ ) os resultados dos modelos cinéticos estão mais próximos um do outro do que com o livre caminho médio baseado na viscosidade ( $\varepsilon_p$ ). Analisando a Tab. (2), observa-se novamente 1 a 2 dígitos de concordância entre os modelos cinéticos e nota-se que em canais com paredes com mesmos coeficientes de acomodação, mesmas temperaturas mas de diferentes larguras, o fluxo de calor normalizado cresce à medida que a largura do canal diminui. Ainda, em todos os casos foram encontrados 7 algarismos significativos utilizando-se 30 pontos de quadratura no método ADO.

Nas Figs. (1) a (3), procura-se analisar o efeito, separadamente, da largura do canal, do tipo de superfície ou dos valores da temperatura do canal. Na Fig. (1), os valores de  $\alpha = 0.20$ ,  $\alpha = 0.67$  e  $\alpha = 0.95$  representam os casos dos gases Hélio, Argônio e Xenônio, respectivamente, em contato com paredes de Molibdênio. Na Fig. (2) está o resultado da perturbação de temperatura em canais com diferentes larguras e a Fig. (3) representa canais onde se aplica variação na temperatura em apenas uma das paredes.

Ainda é importante salientar que todas as figuras foram geradas usando o modelo Gross-Jackson com  $\varepsilon = \varepsilon_t$ . Ainda, "espessura" é a variável espacial adimensionalizada pela largura do canal, isto é,  $\tau/a$ .

Para finalizar, o tempo de execução do programa é de menos de um segundo em um Pentium VI com 2.66 GHz, o que demonstra a eficiência do método ADO.

Tabela 1: Perturbação de Temperatura  $T(\tau)$  com  $2a = 1.0$ ,  $\alpha_1 = 0.7$ ,  $\alpha_2 = 0.3$ ,  $\delta_1 = 1.0$ ,  $\delta_2 = -1.0$

$\tau$	BGK	S ( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	S ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )	GJ ( $\varepsilon = \varepsilon_p$ )	GJ ( $\varepsilon = \varepsilon_t$ )
-0.5	6.268344(-1)	6.135068(-1)	6.357638(-1)	6.231024(-1)	6.438693(-1)
-0.4	5.738182(-1)	5.657401(-1)	5.756469(-1)	5.679494(-1)	5.756599(-1)
-0.3	5.349798(-1)	5.326576(-1)	5.349320(-1)	5.327610(-1)	5.334633(-1)
-0.2	4.996685(-1)	5.032282(-1)	4.988379(-1)	5.023141(-1)	4.971143(-1)
-0.1	4.658477(-1)	4.753425(-1)	4.646728(-1)	4.738430(-1)	4.631650(-1)
0.0	4.324811(-1)	4.479273(-1)	4.311029(-1)	4.459782(-1)	4.299627(-1)
0.1	3.987807(-1)	4.201663(-1)	3.971273(-1)	4.176922(-1)	3.962888(-1)
0.2	3.638978(-1)	3.911806(-1)	3.616651(-1)	3.878747(-1)	3.608223(-1)
0.3	3.265686(-1)	3.596612(-1)	3.230786(-1)	3.548427(-1)	3.215183(-1)
0.4	2.841106(-1)	3.228298(-1)	2.777998(-1)	3.149248(-1)	2.737742(-1)
0.5	2.218489(-1)	2.654875(-1)	2.053238(-1)	2.469719(-1)	1.894219(-1)

Tabela 2: Fluxo de calor normalizado  $q$  com  $\varepsilon = \varepsilon_t$

$2a$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\delta_1$	$\delta_2$	BGK	S	GJ
2.00	0.7	0.3	1.0	8.0	7.722926(-1)	7.677320(-1)	7.640570(-1)
1.00	0.7	0.3	1.0	8.0	8.622379(-1)	8.556544(-1)	8.492411(-1)
0.50	0.7	0.3	1.0	8.0	9.208396(-1)	9.143201(-1)	9.070751(-1)
0.20	0.7	0.3	1.0	8.0	9.642502(-1)	9.597169(-1)	9.540464(-1)
0.10	0.7	0.3	1.0	8.0	9.810851(-1)	9.781734(-1)	9.743014(-1)
0.01	0.7	0.3	1.0	8.0	9.979661(-1)	9.975623(-1)	9.969712(-1)
2.00	0.1	0.9	2.0	5.0	9.008353(-1)	8.985379(-1)	8.966734(-1)
1.00	0.1	0.9	2.0	5.0	9.435911(-1)	9.406100(-1)	9.376895(-1)
0.50	0.1	0.9	2.0	5.0	9.687938(-1)	9.660347(-1)	9.629470(-1)
0.20	0.1	0.9	2.0	5.0	9.862970(-1)	9.844793(-1)	9.821893(-1)
0.10	0.1	0.9	2.0	5.0	9.928340(-1)	9.916953(-1)	9.901712(-1)
0.01	0.1	0.9	2.0	5.0	9.992407(-1)	9.990886(-1)	9.988653(-1)



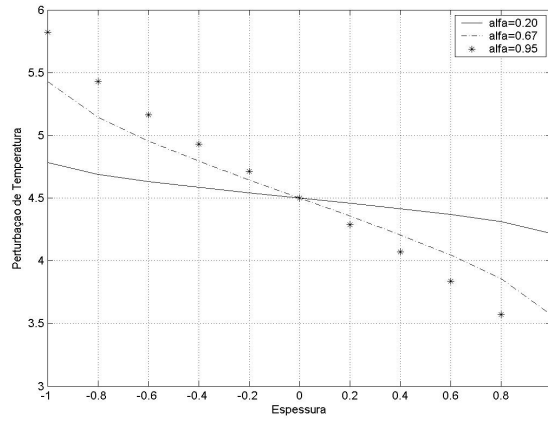


Figura 1: Perturbação de Temperatura  $T(\tau)$  com  $2a = 0.5$ ,  $\delta_1 = 8.0$ ,  $\delta_2 = 1.0$  e  $\alpha = \alpha_1 = \alpha_2$

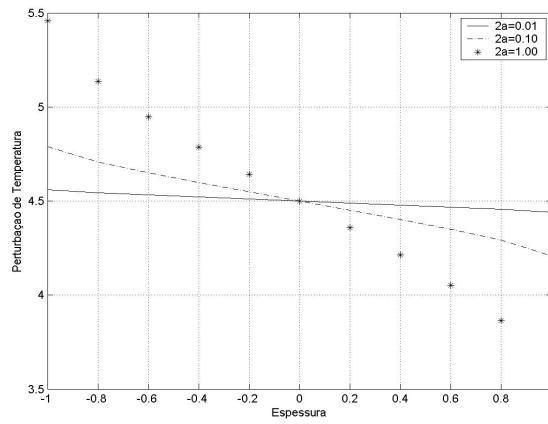


Figura 2: Perturbação de Temperatura  $T(\tau)$  com  $\alpha_1 = 0.5$ ,  $\alpha_2 = 0.5$ ,  $\delta_1 = 8.0$ ,  $\delta_2 = 1.0$  e diferentes larguras de canal

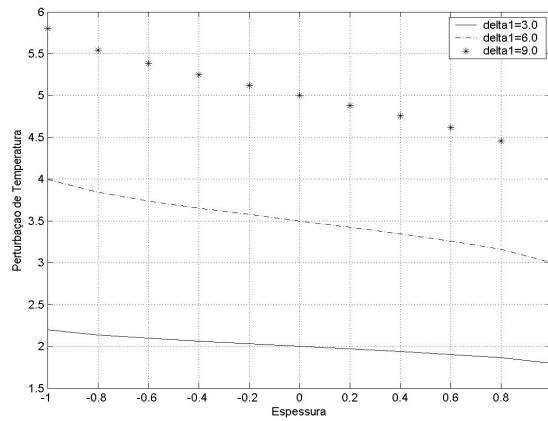


Figura 3: Perturbação de Temperatura  $T(\tau)$  com  $2a = 0.5$ ,  $\alpha_1 = 0.5$ ,  $\alpha_2 = 0.5$ ,  $\delta_2 = 1.0$ , e diferentes temperaturas  $\delta_1$

## 7. Referências

- Barichello, L. B., Bartz, A. C. R., Camargo, M., and Siewert, C. E., 2002, The temperature-jump problem for a variable collision frequency model, “Physics of Fluids”, Vol. 14, pp. 383–391.
- Barichello, L. B., Camargo, M., Rodrigues, P., and Siewert, C. E., 2001, Unified solutions to classical flow problems based on the BGK model, “Z. Angew. Math. Phys.”, Vol. 52, pp. 517–534.
- Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 1999, A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution, “Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer”, Vol. 62, pp. 665–675.
- Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 2000, The temperature-jump problem in rarefied-gas dynamics., “European Journal of Applied Mathematics”, Vol. 11, pp. 353–364.
- Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., and Krook, M., 1954, A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems, “Phys. Rev.”, Vol. 94, pp. 511–525.
- Cabrera, L. C. and Barichello, L. B., 2006, Unified solutions to some classical problems in rarefied gas dynamics based on the S-model equations, “Z. Angew. Math. Phys.”, Vol. 57, pp. 285–312.
- Camargo, M. and Barichello, L. B., 2004, Unified approach for variable collision frequency models in rarefied gas dynamics, “Transp. Theory and Statistical Physics”, Vol. 33, pp. 227–260.
- Cercignani, C., 1988, “The Boltzmann Equation and its Applications”, Ed. Springer Verlag, New York, USA.
- Garcia, R. D. M. and Siewert, C. E., 2004, The McCormack model for gas mixtures: heat transfer in a plane channel, “Physics of Fluids”, Vol. 16, pp. 3393–3402.
- Gross, E. P. and Jackson, E. A., 1959, Kinetic models and the linearized Boltzmann equation, “The Physics of Fluids”, Vol. 2, pp. 432–441.
- Scherer, C. S., 2005, “Modelos Cinéticos da Equação Linearizada de Boltzmann e um Problema de Transferência de Calor em Microescala”, PhD thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brazil.
- Shakov, E. M., 1968, Generalization of the Krook kinetic relaxation equation, “Fluid Dynamics”, Vol. 3, pp. 142–145.
- Siewert, C. E., 1999, A discrete-ordinates solution for heat transfer in a plane channel, “Journal of Computational Physics”, Vol. 152, pp. 251–263.
- Siewert, C. E., 2002, Poiseuille, Thermal Creep and Couette flow: results based on the CES model of the linearized Boltzmann equation, “European Journal of Mechanics B/Fluids”, Vol. 23, pp. 579–597.
- Siewert, C. E., 2003, Heat transfer and evaporation/condensation problems based on the linearized Boltzmann equation, “European Journal of Mechanics B/Fluids”, Vol. 22, pp. 391–408.
- Siewert, C. E., 2005, The McCormack model for gas mixtures: the temperature-jump problem, “Z. Angew. Math. Phys.”, Vol. 56, pp. 273–292.
- Williams, M. M. R., 2001, A review of the rarefied gas dynamics theory associated with some classical problems in flow and heat transfer, “Z. Angew. Math. Phys.”, Vol. 52, pp. 500–516.

## A HEAT TRANSFER PROBLEM IN RAREFIED GAS DYNAMICS

### Caio Sarmiento Scherer

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS - Rua Sarmiento Leite, 425 - Porto Alegre, RS, 90050-170.  
cscherer@mecanica.ufrgs.br

### Liliane Basso Barichello

Instituto de Matemática - UFRGS - Av. Bento Gonçalves, 9500 - Porto Alegre, RS, 91509-900.  
lbaric@mat.ufrgs.br

**Abstract.** *In this work, we consider a problem concerning heat transfer in a rarefied gas confined in a microchannel defined by two parallel plates at which arbitrary and unequal temperature and accommodation are allowed. In particular the temperature and density perturbations and the heat flux as well are obtained by a discrete-ordinates solution developed for a kinetic model, the Gross-Jackson model, of the linearized Boltzmann equation. Numerical results are presented for a wide range of the Knudsen number.*

**Keywords** *Heat transfer, Gross-Jackson, Linearized Boltzmann equation, Discrete-ordinates, Kinetics models*