

# TRANSPORTE DE ENERGIA DE MISTURA DE GASES PARA UM AMPLO INTERVALO DO NÚMERO DE KNUDSEN

**Itamar Aparecido Borges**

CESEC, Universidade Federal do Paraná  
itamar@seed.pr.gov.br

**Liliana Madalena Gramani Cumin**

Departamento de Matemática, Universidade Federal do Paraná  
Caixa Postal 19044, 81531-990 Curitiba – PR - Brasil  
gramani@mat.ufpr.br

**Resumo.** Apresenta-se resultados do transporte de energia calculados através do fluxo de calor. O problema consiste de uma mistura binária de gases rarefeitos monoatômicos confinados entre duas placas paralelas suficientemente longas. Inicialmente o sistema encontra-se em equilíbrio, sendo fracamente perturbado através do gradiente de temperatura relativo das placas que caracteriza o transporte de energia. 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. Todas as soluções encontradas são estáveis pois se tratam de problemas lineares. 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: Neônio e Argônio, Hélio e Argônio, Hélio e Xenônio. Calcula-se o fluxo de calor da mistura e de cada constituinte, assim como o desvio na concentração e na densidade da mistura em todo o intervalo do número de Knudsen. As concentrações molares dos gases foram consideradas nas proporções de 10%, 50% e 90%. Foram comparados os resultados obtidos quando se utiliza diferentes potenciais de interação entre as partículas. Também compara-se a solução cinética com a solução hidrodinâmica para o fluxo de calor da mistura.

*Palavras chave:* Fluxo de calor, Mistura binária de gases rarefeitos, Parâmetro de rarefação da mistura

## 1. Introdução

Nos últimos anos o estudo dos fenômenos de transporte no escoamento de gases rarefeitos tem aumentado a sua importância devido às aplicações para o desenvolvimento tecnológico de equipamentos de vácuo, indústria aeronáutica, microengenharia, etc.

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: (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 ( $Kn \cong 1$ ), no qual o livre caminho médio molecular e o comprimento característico do escoamento possuem a mesma ordem de grandeza.

O transporte de energia é um problema que envolve a Mecânica do Contínuo e a Teoria Cinética dos gases. A Mecânica do Contínuo é aplicada somente ao regime hidrodinâmico. Para abranger todo o intervalo de Knudsen é necessário aplicar a Dinâmica dos Gases Rarefeitos. Durante os últimos anos, vários livros e artigos têm sido publicados sobre este tema (Adzumi, 1937; Cercignani, 1975; Chadwick, 1976; Bird, 1994; Ivchenko, Loyalka & Thompson, 1997; Cumin, Sharipov & Kremer, 1998). Na Dinâmica dos Gases Rarefeitos, os métodos se baseiam em: (i) na solução da equação de Boltzmann (Cercignani, 1988; Cercignani, 2000) (ii) ou na simulação de Monte Carlo. Neste trabalho será abordado a solução da equação de Boltzmann para os regimes de moléculas livres, hidrodinâmico e de transição e a solução da Mecânica do Contínuo para o regime hidrodinâmico.

A equação de Boltzmann é uma equação íntegro-diferencial, complexa devido a integral de colisões entre as partículas. O termo que envolve esta integral de colisões é denominado de operador de colisões entre as partículas. Existem alguns trabalhos na literatura, como por exemplo (Aoki, 1991; Onishi 1997), 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 esfera-rígida, requerendo um esforço computacional muito grande. 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, também chamado de modelo cinético 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.

Existem poucas publicações sobre o escoamento de uma mistura para um amplo intervalo do número de Knudsen. Com relação aos trabalhos experimentais sobre o fluxo de uma mistura ao longo de um tubo são citados os artigos (Adzumi, 1937; Bentz, Thompson & Loyalka, 1999; Sharipov & Seleznez, 1998). Os resultados numéricos considerando-se o fluxo de uma mistura através de um canal são encontrados nos trabalhos (Ivchenko, Loyalka & Thompson, 1997; Lang & Muller, 1975; Takata, 2001) e o fluxo de Couette para este mesmo estudo encontra-se em (Marques, Kremer & Sharipov, 2000).

Considerando uma mistura de gases monoatômicos, a diferença entre os constituintes ocorrerá entre as suas massas atômicas, diâmetros moleculares e formas de interação 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  $f_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, n$ ) presente na equação de Boltzmann, para cada um dos  $n$  constituintes da mistura. Então se tem de uma forma geral, que o sistema constitui-se de um sistema de  $n$  equações de Boltzmann acopladas para as  $n$  funções de distribuição.

Neste trabalho, será considerado o fluxo de uma mistura binária de gases ideais monoatômicos confinada entre duas placas paralelas, que será estudado com base no modelo cinético de McCormack (McCormack, 1973) para um amplo intervalo do número de Knudsen.

## 2. Considerações do Problema

Considera-se uma mistura binária de gases ideais monoatômicos confinada entre duas placas paralelas separadas por uma distância  $D$ , infinitamente longa de forma que os efeitos de borda podem ser desprezados. Inicialmente o sistema encontra-se em equilíbrio, ou seja, as placas estão a uma temperatura de equilíbrio inicial  $T_0$  e pode ser introduzida a concentração de equilíbrio molar  $C_0$  da mistura como sendo  $C_0 = n_{01}/(n_{01} + n_{02})$ , onde  $n_{0\alpha}$ , ( $\alpha = 1, 2$ ) são as densidades de equilíbrio dos constituintes  $\alpha$ . O estado de equilíbrio é fracamente perturbado por uma diferença de temperatura  $\Delta T = T_2 - T_1$ , isto é,  $\frac{|\Delta T|}{T_0} \ll 1$ . Então o objetivo do trabalho é estudar o transporte

de energia para uma mistura binária de gases ideais monoatômicos rarefeitos confinada entre duas placas paralelas, ou seja, resolver a equação de Boltzmann com base no modelo cinético proposto por McCormack em seu artigo (McCormack, 1973), para o sistema fora de equilíbrio através do método das velocidades discretas (Sharipov & Sobbotin 1993). Será calculado o fluxo de calor da mistura, o fluxo de calor e a densidade de cada constituinte, para as três misturas binárias: Neônio e Argônio; Hélio e Argônio; e Hélio e Xenônio, dentro de um amplo intervalo do parâmetro de rarefação. Estas 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.

O fluxo de calor de cada constituinte e da mistura serão calculados para um amplo intervalo do número de Knudsen  $0 < Kn < \infty$ , que correspondem na análise dos regimes hidrodinâmico, transição e de moléculas livres. Estes cálculos serão feitos para dois tipos de potenciais intermoleculares: esfera-rígida e o potencial realístico, ambos considerando uma temperatura inicial de 300K. Uma comparação do fluxo de calor da mistura obtido através da equação cinética com a solução hidrodinâmica também será apresentada.

A densidade do número de partículas  $n$  da mistura binária, entre as placas, será função da densidade do número de partículas de cada constituinte da mistura  $n = n_1 + n_2$ . A temperatura da mistura será igual a

$$T = \frac{\sum_{\alpha=1}^2 n_\alpha T_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^2 n_\alpha} = \frac{n_1 T_1 + n_2 T_2}{n_1 + n_2}, \quad (1)$$

e a concentração poderá ser escrita como a razão entre a densidade do número de partículas do constituinte  $\alpha = 1$  e a densidade do número de partículas da mistura,  $C_0 = n_1/n$ .

Será considera a situação em que o estado de equilíbrio é fracamente perturbado através do gradiente de temperatura relativo das placas. Assim a perturbação na temperatura será denotada por  $\Delta T$ , a densidade do número de partículas do constituinte  $\alpha$  é igual a densidade do número de partículas deste constituinte em equilíbrio, acrescida de uma perturbação

$$n_{\alpha} = n_{0\alpha} \left( 1 + \nu_{\alpha} \frac{\Delta T}{T_0} \right), \quad (2)$$

onde  $\nu_{\alpha}$  representa os desvios relativos as densidades.

A temperatura do constituinte  $\alpha$  é igual a temperatura de equilíbrio do sistema  $T_0$ , acrescida de uma perturbação

$$T_{\alpha} = T_0 \left( 1 + \tau_{\alpha} \frac{\Delta T}{T_0} \right), \quad (3)$$

onde  $\tau_{\alpha}$  representa os desvios relativos as temperaturas dos constituintes  $T_{\alpha}$  com  $\alpha = (1, 2)$ . Substituindo a Eq.(2) e a Eq.(3) na Eq.(1), obtém-se a seguinte expressão para a temperatura  $T$

$$T = T_0 \left( 1 + C_0 \tau_1 \frac{\Delta T}{T_0} + (1 - C_0) \tau_2 \frac{\Delta T}{T_0} \right). \quad (4)$$

### 3. Equação Cinética e Condições de Contorno

Para um fluxo estacionário,  $(\partial f_{\alpha} / \partial t = 0)$ , e sem a presença de forças externas,  $(F_i = 0)$ , a equação de Boltzmann para uma mistura binária de gases monoatômicos é

$$\vec{v}'_{\alpha} \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{r}'} = \sum_{\beta=1}^2 Q_{\alpha\beta}(f_{\alpha}, f_{\beta}) \quad (5)$$

com  $\vec{r}' = (x', y', z')$  e  $\vec{v}'_{\alpha} = (v'_{\alpha x}, v'_{\alpha y}, v'_{\alpha z})$ . As grandezas denotadas por uma plica são dimensionais. A Eq. (5) representa uma equação íntegro-diferencial não-linear. A integral de colisões entre as partículas  $\alpha$  e  $\beta$  esta sendo representada pelo operador de colisão quadrática  $Q_{\alpha\beta}(f_{\alpha}, f_{\beta})$ , também denominado de termo de colisão. A principal dificuldade matemática apresentada na equação de Boltzmann está associada com o termo de colisão  $Q_{\alpha\beta}(f_{\alpha}, f_{\beta})$ . 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 têm 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). 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, 1998). Assim o termo de colisão poderá ser substituído por um operador o qual conserva as seguintes propriedades:

$$\int m_{\alpha} Q_{\alpha\beta} d\vec{v}_{\alpha} = 0, \quad (6)$$

$$\int m_{\alpha} v_{\alpha i} Q_{\alpha\beta} d\vec{v}_{\alpha} + \int m_{\beta} v_{\beta i} Q_{\alpha\beta} d\vec{v}_{\beta} = 0, \quad (7)$$

$$\int \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2 Q_{\alpha\beta} d\vec{v}_{\alpha} + \int \frac{1}{2} m_{\beta} v_{\beta}^2 Q_{\alpha\beta} d\vec{v}_{\beta} = 0, \quad (8)$$

que expressam a conservação da massa, do momento linear e da energia de cada colisão de uma partícula  $\alpha$  com uma partícula  $\beta$  sendo  $m_\alpha$  e  $m_\beta$  a massa da partícula dos constituintes  $\alpha$  e  $\beta$ , respectivamente. No modelo cinético utilizado neste trabalho, a expressão do operador de colisão quadrática é dada por

$$Q_{\alpha\beta} = -\nu'_{\alpha\beta}(f_\alpha - f_{\alpha\beta}^R). \quad (9)$$

O sinal negativo acima é devido ao tempo de relaxação.  $\nu'_{\alpha\beta}$  denota a frequência de colisão que independe das velocidades das partículas,  $f_\alpha$  representa a função de distribuição dos constituintes e  $f_{\alpha\beta}^R$  a função de distribuição de referência. Para este problema tem-se para a função de distribuição dos constituintes

$$f_\alpha(\vec{r}', \vec{v}'_\alpha) = f_\alpha^M(\vec{v}'_\alpha) \left[ 1 + h_\alpha(x', \vec{v}'_\alpha) \frac{\Delta T}{T_0} \right], \quad (10)$$

onde  $f_\alpha^M$  é a função de distribuição Maxwelliana (Kremer, 2003) correspondente ao estado de equilíbrio

$$f_\alpha^M = n_{0\alpha} \left( \frac{m_\alpha}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{m_\alpha}{2k T_0} v_\alpha'^2 \right), \quad (11)$$

$h_\alpha(x', \vec{v}'_\alpha)$  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  $\alpha$  entre as placas. É conveniente introduzir quantidades adimensionais para as quantidades da velocidade molecular do constituinte  $\alpha$ ,  $\vec{v}'_\alpha$  e a posição  $\vec{r}'$ . Desta forma a velocidade dimensional  $\vec{v}'_\alpha$  esta relacionada com a velocidade adimensional  $\vec{c}_\alpha$  através do parâmetro  $\beta_{0\alpha} = (m_\alpha / 2kT_0)^{1/2}$ , ou seja,  $\vec{v}'_\alpha = \beta_{0\alpha}^{-1} \vec{c}_\alpha$  e introduz-se a grandeza adimensional  $\vec{r} = \vec{r}' / D$ , onde  $D$  representa a distância entre as placas paralelas. Substituindo-se Eq. (9) – Eq. (11) na Eq. (5), com Eq.(2) – Eq.(4), tem-se a equação linearizada adimensional

$$c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha}{\partial x} = D \left( \frac{m_\alpha}{2kT_0} \right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^2 \hat{L}_{\alpha\beta} h_\alpha - c_{\alpha x} \left( \left( c_\alpha^2 \frac{T_0}{T} - \frac{3}{2} \right) \frac{d \ln T(x)}{dx} + \frac{d \ln n_\alpha}{dx} \right). \quad (12)$$

O modelo cinético proposto por McCormack representa  $\hat{L}_{\alpha\beta} h$  como uma expansão de um polinômio da velocidade adimensional  $\vec{c}_\alpha$ , ou seja,  $\hat{L}_{\alpha\beta} h = -\gamma_{\alpha\beta} h_\alpha + A + A_k c_{\alpha k} + B_{kl} c_{\alpha k} c_{\alpha l} + D_k c_{\alpha k} c_\alpha^2$ . O parâmetro  $\gamma_{\alpha\beta}$  é proporcional a frequência de colisão entre os constituintes  $\alpha$  e  $\beta$  (Cercignani & Sharipov, 1992). Para o problema em questão, o operador de colisões  $\hat{L}_{\alpha\beta} h$  correspondente ao modelo cinético de McCormack é escrito como

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\alpha\beta} h_\alpha &= -\gamma_{\alpha\beta} h_\alpha + \gamma_{\alpha\beta} \nu_\alpha - \left( \frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \nu_{\alpha\beta}^{(2)} \left( q_\alpha - \frac{m_\alpha}{m_\beta} q_\beta \right) c_{\alpha x} \\ &+ \left[ \gamma_{\alpha\beta} \tau_\alpha - 2 \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\beta} (\tau_\alpha - \tau_\beta) \nu_{\alpha\beta}^{(1)} \right] \left( c_\alpha^2 - \frac{3}{2} \right) + 2 \left[ (\gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\beta}^{(3)}) \Pi_{\alpha\alpha x} + \nu_{\alpha\beta}^{(4)} \Pi_{\beta\alpha x} \right] \left[ c_{\alpha x}^2 - \frac{1}{2} (c_{\alpha y}^2 + c_{\alpha z}^2) \right] \\ &+ \frac{8}{10} \left( \frac{m_\alpha}{m} \right)^{1/2} \left[ (\gamma_{\alpha\beta} - \nu_{\alpha\beta}^{(5)}) q_\alpha + \nu_{\alpha\beta}^{(6)} \left( \frac{m_\beta}{m_\alpha} \right)^{1/2} q_\beta \right] c_{\alpha x} \left( c_\alpha^2 - \frac{5}{2} \right), \end{aligned}$$

$$\alpha, \beta = 1, 2, \quad \text{e} \quad \gamma_{\alpha\beta} = \sum_{\beta=1}^2 \nu'_{\alpha\beta} \quad (13)$$

As quantidades  $\nu_{\alpha\beta}^{(N)}$  (Cumin, L. M. G., Sharipov, F., & Kremer, G. M., 1998) representam a frequência de colisões entre os constituintes  $\alpha$  e  $\beta$ . Os momentos adimensionais da função de distribuição são escritos do seguinte modo:

$$\nu_{\alpha}(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int \exp(-c_{\alpha}^2) h_{\alpha}(x, \vec{c}_{\alpha}) d\vec{c}_{\alpha}, \quad (14)$$

$$q_{\alpha}(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int \exp(-c_{\alpha}^2) h_{\alpha}(x, \vec{c}_{\alpha}) c_{\alpha}^2 c_{\alpha x} d\vec{c}_{\alpha}, \quad (15)$$

$$\Pi_{\alpha ii}(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int \exp(-c_{\alpha}^2) h_{\alpha}(x, \vec{c}_{\alpha}) \left( c_{\alpha i}^2 - \frac{1}{3} c_{\alpha}^2 \right) d\vec{c}_{\alpha}, \quad (16)$$

$$\tau_{\alpha}(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int \exp(-c_{\alpha}^2) h_{\alpha}(x, \vec{c}_{\alpha}) \left( \frac{2}{3} c_{\alpha}^2 - 1 \right) d\vec{c}_{\alpha}, \quad (17)$$

onde  $\nu_{\beta}$ ,  $q_{\beta}$ ,  $\Pi_{\beta ii}$  e  $\tau_{\beta}$  são semelhantes as equações (14)-(17), respectivamente bastando trocar  $\alpha$  por  $\beta$ .

As condições de contorno para a perturbação  $h_{\alpha}$  da Eq. (12) são dadas por:

$$h_{\alpha}(x, \vec{c}_{\alpha}) = h_{\alpha}\left(\pm \frac{D}{2}, \vec{c}_{\alpha}\right) = -\nu_{\alpha wall}, \quad \text{para} \quad c_{\alpha x} \leq 0. \quad (18)$$

Assim o fluxo de calor de uma mistura binária de gases ideais monoatômicos é obtido resolvendo a Eq.(12) sujeita às condições de contorno presentes na Eq.(18). Será assumido que existe um pequeno desvio na concentração e este também será calculado. Então usando as relações  $n_{01} = n_0 C_0$  e  $n_{02} = n_0 (1 - C_0)$ , o gradiente de concentração estabelecido por  $\Delta C$  será igual a

$$\Delta C = (1 - C_0)(\nu_1 - \nu_2) \frac{\Delta T}{T_0}. \quad (19)$$

Da mesma forma, o desvio da densidade estabelecido como  $\nu$  é calculado com base na densidade  $n$  da mistura, onde  $\nu = n/n_0 - 1$ ,  $n = n_1 + n_2$  e a expressão sobre o desvio da densidade pode ser escrita como,

$$\nu = (C_0 \nu_1 + (1 - C_0) \nu_2) \frac{\Delta T}{T_0}. \quad (20)$$

#### 4. Método de Solução

A Eq. (12) é função das componentes da velocidade adimensional  $c_{\alpha i} = (c_{\alpha x}, c_{\alpha y}, c_{\alpha z})$ . Com o objetivo de diminuir as variáveis da Eq.(12) e considerando que o fluxo é unidimensional e completamente desenvolvido na direção  $x$ , a solução independe das coordenadas  $y$  e  $z$ . Pode-se então eliminar as variáveis  $c_{\alpha y}$  e  $c_{\alpha z}$  da velocidade  $\vec{c}_{\alpha}$  pela introdução de duas funções:

$$\Phi_{\alpha}(x, \vec{c}_{\alpha}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(c_{\alpha y}^2 + c_{\alpha z}^2)] h_{\alpha}(x, \vec{c}_{\alpha}) dc_{\alpha y} dc_{\alpha z}, \quad (21)$$

$$\Psi_{\alpha} \left( x, \vec{c}_{\alpha} \right) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ - \left( c_{\alpha y}^2 + c_{\alpha z}^2 \right) \right] \left[ c_{\alpha y}^2 + c_{\alpha z}^2 - 1 \right] h_{\alpha} \left( x, \vec{c}_{\alpha} \right) d c_{\alpha y} d c_{\alpha z}, \quad (22)$$

que transformam a Eq. (12) em um sistema de equações para  $\Phi_{\alpha}$  e  $\Psi_{\alpha}$ ,

$$\begin{aligned} c_{\alpha x} \frac{\partial \Phi_{\alpha}}{\partial x} = & \delta_{\alpha} \left\{ -\Phi_{\alpha} + v_{\alpha} - c_{\alpha x} \left( \frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} v_{\alpha \beta}^{*(2)} \left( q_{\alpha} - \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} q_{\beta} \right) \right. \\ & + \left[ \tau_{\alpha} - 2 \frac{m_{\alpha \beta}}{m_{\beta}} (\tau_{\alpha} - \tau_{\beta}) v_{\alpha \beta}^{*(1)} \right] \left( c_{\alpha x}^2 - \frac{1}{2} \right) + 2 \left( (1 - v_{\alpha \alpha}^{*(3)} + v_{\alpha \alpha}^{*(4)} - v_{\alpha \beta}^{*(3)}) \Pi_{\alpha x x} + v_{\alpha \beta}^{*(4)} \Pi_{\beta x x} \right) \left( c_{\alpha x}^2 - \frac{1}{2} \right) \\ & \left. + \frac{8}{10} \left( \frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left[ \left( 1 + v_{\alpha \alpha}^{*(6)} - v_{\alpha \alpha}^{*(5)} - v_{\alpha \beta}^{*(5)} \right) q_{\alpha} + v_{\alpha \beta}^{*(6)} \left( \frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}} \right)^{1/2} q_{\beta} \right] c_{\alpha x} \left( c_{\alpha x}^2 - \frac{3}{2} \right) \right\} - c_{\alpha x} \left( c_{\alpha x}^2 - \frac{3}{2} - \frac{k_T}{T_{\alpha}} \right) \end{aligned} \quad (23)$$

e

$$\begin{aligned} c_{\alpha x} \frac{\partial \Psi_{\alpha}}{\partial y} = & \delta_{\alpha} \left\{ -\Psi_{\alpha} + \tau_{\alpha} - 2 \left( \frac{m_{\alpha \beta}}{m_{\beta}} \right) (\tau_{\alpha} - \tau_{\beta}) v_{\alpha \beta}^{*(1)} - \left( 1 - v_{\alpha \alpha}^{*(3)} + v_{\alpha \alpha}^{*(4)} - v_{\alpha \beta}^{*(3)} \right) \Pi_{\alpha x x} - v_{\alpha \beta}^{*(4)} \Pi_{\beta x x} \right. \\ & \left. + \frac{8}{10} c_{\alpha x} \left( \frac{m_{\alpha}}{m} \right)^{1/2} \left[ \left( 1 + v_{\alpha \alpha}^{*(6)} - v_{\alpha \alpha}^{*(5)} - v_{\alpha \beta}^{*(5)} \right) q_{\alpha} + v_{\alpha \beta}^{*(6)} \left( \frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}} \right)^{1/2} q_{\beta} \right] \right\} - c_{\alpha x}, \quad v_{\alpha \beta}^{*(N)} = v_{\alpha \beta}^{(N)} / \gamma_{\alpha \beta}. \end{aligned} \quad (24)$$

É utilizado com maior frequência o parâmetro de rarefação do constituinte  $\alpha$  da mistura  $\delta_{\alpha}$  ao invés do número de Knudsen  $Kn$ , definido por,  $\delta_{\alpha} = D(m_{\alpha} / 2kT_0)^{1/2} \gamma_{\alpha}$ , onde  $\gamma_{\alpha} = P_{\alpha} / \mu_{\alpha}$  com  $P_{\alpha}$  e  $\mu_{\alpha}$  representando pressão parcial e a viscosidade parcial, respectivamente, (Cercignani & Sharipov, 1992). Este parâmetro aparece somente nas combinações  $\gamma_1 = \gamma_{11} + \gamma_{12}$  e  $\gamma_2 = \gamma_{21} + \gamma_{22}$ . Nas equações (23) e (24) os momentos adimensionais da função de distribuição  $v_{\alpha}, v_{\beta}, q_{\alpha}, q_{\beta}, \Pi_{\alpha}, \Pi_{\beta}, \tau_{\alpha}$  e  $\tau_{\beta}$  descritos nas equações (14)-(17), representam as incógnitas e são escritos em função de  $\Phi_{\alpha}$  e  $\Psi_{\alpha}$ .

O objetivo é resolver este sistema de equações integro-diferenciais (23) e (24) utilizando condições de contorno apropriadas, deduzidas substituindo-se a Eq.(18) em (21) e (22). Este sistema de equações pode ser reduzido a 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  $\delta_{\alpha}$ , que é proporcional ao inverso do número de Knudsen  $Kn$ . Este é um dos motivos pelos quais deve-se usar o método das velocidades discretas (Kogan, 1969) e (Sharipov & Subbotin, 1993).

## 5. Resultados Numéricos e Discussões

O parâmetro  $\delta_{\alpha}$  presente nas equações (23) e (24), corresponde ao parâmetro de rarefação do constituinte  $\alpha$  da mistura. No programa numérico utiliza-se o parâmetro de rarefação da mistura, denotado por  $\delta$ , como um parâmetro de entrada. Consequentemente, 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  $\delta_{\alpha} = \delta (m_{\alpha} / m)^{1/2} (\mu P) / (\mu_{\alpha} P)$  onde  $\mu$  e  $\mu_{\alpha}$  denotam, respectivamente, a viscosidade da mistura e a viscosidade parcial, cujas expressões são dadas em (Sharipov & Kalempa, 2002).  $P$  e  $P_{\alpha}$  representam a pressão da mistura e a pressão parcial, respectivamente. O sistema de equações cinéticas (23) e (24) foram resolvidas numericamente para um amplo intervalo do parâmetro de rarefação  $\delta$ , pelo método das velocidades discretas (Kogan, 1969; Sharipov & Subbotin, 1993) com um erro numérico relativo menor que 0,1%. A precisão numérica foi estimada comparando os resultados obtidos para diferentes grades dos parâmetros, ou seja, utilizou-se uma malha adequada. Os valores considerados para o parâmetro de rarefação  $\delta$  variam de  $0,01 \leq \delta \leq 100$ . Deve-se ressaltar que este

intervalo abrange o regime das moléculas livres para  $\delta \rightarrow 0$  (especificando o intervalo  $0,01 \leq \delta < 1$ ), o regime de transição  $\delta \cong 1$  e o regime hidrodinâmico para  $\delta \rightarrow \infty$  (especificando o intervalo  $\delta \geq 100$ ). Portanto o maior valor considerado para  $\delta$  é 100, o qual já representa com certeza o regime hidrodinâmico. Valores maiores do que 100 não serão considerados devido ao grande tempo de execução do programa numérico. Quanto maior o valor de  $\delta$  maior é o tempo para se atingir a convergência do programa numérico. Conforme se aumenta o parâmetro de rarefação o tempo de rodagem do programa cresce de forma não linear. Uma maneira de amenizar este problema é se utilizar supercomputadores para a rodagem dos programas no caso de grandes valores do parâmetro de rarefação.

Para investigar a influência da lei de interação intermolecular no transporte de energia, dois tipos de potenciais foram usados: o potencial de esfera-rígida e o potencial realístico. Quando trata-se do potencial de esfera-rígida, para calcular os diâmetros moleculares  $d_\alpha$ , utiliza-se a seguinte razão entre suas massas e viscosidades  $d_2/d_1 = (\mu_1/\mu_2)^{1/2} (m_2/m_1)^{1/4}$ . Estas viscosidades são obtidas experimentalmente à uma temperatura de T=300K (Kestin, Knierim, Mason, Najafi, Ro & Waldman, 1984). Como resultado destes dados obtém-se os valores da razão  $d_2/d_1$  como 1,406, 1,665 e 2,226 para as misturas Nêonio e Argônio (Ne-Ar), Hélio e Argônio (He-Ar) e Hélio e Xenônio (He-Xe), respectivamente.

Os resultados numéricos do fluxo de calor  $Q$  da mistura são fornecidos nas tabelas (1)-(2) para o potencial realístico e potencial de esfera-rígida, respectivamente. Da análise numérica destes valores concluí-se que: (i) O fluxo de calor  $Q$  da mistura sempre decresce com o aumento do parâmetro de rarefação  $\delta$ , ou seja, são grandezas inversamente proporcionais. Este era o resultado esperado, pois se tem este mesmo comportamento para o caso de um gás único; (ii) A dependência do fluxo de calor  $Q$  da mistura na concentração  $C_0$  é forte para a mistura com menor razão de massa molecular, He-Xe. A diferença entre o fluxo de calor da mistura entre as concentrações  $C_0 = 0,1$  e  $C_0 = 0,9$  pode passar de 60% para a mistura He-Xe, enquanto que para a mistura Ne-Ar este desvio não excede 1,2%; (iii) O fluxo de calor depende muito pouco da lei de interação intermolecular. Para o caso onde existem estas diferenças, o fluxo de calor sempre apresenta um valor maior para o caso do potencial realístico. A diferença, quando existir, entre os valores de  $Q$  da mistura que correspondem ao potencial realístico e àqueles para o potencial de esfera-rígida não excedem 15%.

Os dados do fluxo de calor de cada constituinte,  $q_1$  e  $q_2$ , para a mistura binária He-Xe são apresentados na Tab. (3) para o potencial realístico. Pode-se observar que o constituinte de menor massa tem um fluxo de calor maior e a medida que o parâmetro de rarefação cresce o fluxo de calor de cada constituinte aumenta. Também pode-se observar que  $C_0 = 0,1$ , representa os maiores valores para  $q_1$ .

Os valores referentes ao desvio na densidade de cada constituinte, considerando potencial realístico, para a mistura He-Xe, são apresentados na Tab.(4). (i) Pode-se observar que em todas as concentrações consideradas  $C_0 = 0,1, C_0 = 0,5$  e  $C_0 = 0,9$  o desvio na densidade foi aumentando à medida que se aumentou o parâmetro de rarefação  $\delta$ ; (ii) Observa-se também que nos valores do desvio na densidade,  $\nu_1$  e  $\nu_2$ , para a mistura considerada, o constituinte de menor massa tem sempre um desvio menor na densidade.

Quanto ao desvio na concentração e na densidade da mistura, estão apresentados na Tab.(5), os valores obtidos para a mistura He-Xe no caso do potencial realístico. Os valores obtidos para a mistura He-Xe no caso de esfera-rígida não são apresentados por serem semelhantes aos das tabelas (3), (4) e (5). Pode-se concluir que as outras misturas, Ne-Ar e He-Ar, apresentam o mesmo tipo de comportamento da mistura He-Xe. Esta última foi escolhida para ser apresentada na Tab.(5) por se tratar da mistura que tem a maior variação de comportamento. Isto é comparado nas tabelas (1) e (2).

Tabela 1: Fluxo de calor  $Q$  da mistura vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e concentração  $C_0$  na distância  $x = 1/2$ , potencial realístico

| $\delta$ | $Q$         |         |         |         |         |         |         |         |         |
|----------|-------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
|          | Ne-Ar       |         |         | He-Ar   |         |         | He-Xe   |         |         |
|          | $C_0 = 0,1$ | 0,5     | 0,9     | 0,1     | 0,5     | 0,9     | 0,1     | 0,5     | 0,9     |
| 0,01     | -0,5690     | -0,5855 | -0,5706 | -0,6506 | -0,8655 | -0,7201 | -0,7854 | -1,3563 | -1,0534 |
| 0,1      | -0,5431     | -0,5591 | -0,5447 | -0,6215 | -0,8289 | -0,6894 | -0,7534 | -1,3091 | -1,0150 |
| 1        | -0,4065     | -0,4191 | -0,4076 | -0,4654 | -0,6252 | -0,5217 | -0,5760 | -1,0292 | -0,7939 |
| 10       | -0,1373     | -0,1420 | -0,1376 | -0,1563 | -0,2123 | -0,0180 | -0,2033 | -0,3863 | -0,2966 |
| 40       | -0,0436     | -0,0451 | -0,0436 | -0,0495 | -0,0676 | -0,0577 | -0,0659 | -0,1288 | -0,0984 |
| 60       | -0,0299     | -0,0310 | -0,0300 | -0,0340 | -0,0465 | -0,0397 | -0,0454 | -0,0892 | -0,0681 |
| 100      | -0,0184     | -0,0191 | -0,0184 | -0,0209 | -0,0286 | -0,0244 | -0,0280 | -0,0552 | -0,0421 |

Tabela 2: Fluxo de calor  $Q$  da mistura vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e concentração  $C_0$  na distância  $x = 1/2$ , potencial de esfera-rígida

| $\delta$ | $Q$         |         |         |         |         |         |         |         |         |
|----------|-------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
|          | Ne-Ar       |         |         | He-Ar   |         |         | He-Xe   |         |         |
|          | $C_0 = 0,1$ | 0,5     | 0,9     | 0,1     | 0,5     | 0,9     | 0,1     | 0,5     | 0,9     |
| 0,01     | -0,5690     | -0,5855 | -0,5706 | -0,6504 | -0,8652 | -0,7201 | -0,7850 | -1,3544 | -1,0534 |
| 0,1      | -0,5430     | -0,5588 | -0,5445 | -0,6203 | -0,8260 | -0,6889 | -0,7500 | -1,3011 | -1,0145 |
| 1        | -0,4058     | -0,4172 | -0,4069 | -0,4587 | -0,6088 | -0,5183 | -0,5582 | -0,9839 | -0,7883 |
| 10       | -0,1364     | -0,1397 | -0,1368 | -0,1496 | -0,1942 | -0,1758 | -0,1834 | -0,3303 | -0,2875 |
| 40       | -0,0432     | -0,0442 | -0,0433 | -0,0469 | -0,0604 | -0,0559 | -0,0577 | -0,1050 | -0,0944 |
| 60       | -0,0295     | -0,0302 | -0,0298 | -0,0321 | -0,0414 | -0,0384 | -0,0396 | -0,0721 | -0,0652 |
| 100      | -0,0181     | -0,0185 | -0,0182 | -0,0197 | -0,0253 | -0,0236 | -0,0243 | -0,0444 | -0,0403 |

Tabela 3: Fluxo de calor de cada constituinte vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e concentração  $C_0$  na distância  $x = 1/2$  para a mistura He-Xe, potencial realístico

| $\delta$ | $C_0 = 0,1$ |         | $C_0 = 0,5$ |         | $C_0 = 0,9$ |         |
|----------|-------------|---------|-------------|---------|-------------|---------|
|          | $q_1$       | $q_2$   | $q_1$       | $q_2$   | $q_1$       | $q_2$   |
| 0,01     | -0,0305     | -0,0053 | -0,0231     | -0,0043 | -0,0115     | -0,0020 |
| 0,1      | -0,2955     | -0,0509 | -0,2233     | -0,0385 | -0,1107     | -0,0191 |
| 10       | -8,7031     | -1,2918 | -6,7245     | -1,0008 | -3,2422     | -0,4837 |
| 40       | -11,4280    | -1,6579 | -8,9785     | -1,3225 | -4,3038     | -0,6404 |
| 60       | -11,8200    | -1,7144 | -9,3256     | -1,3736 | -4,4667     | -0,6646 |
| 100      | -12,1520    | -1,7625 | -9,6230     | -1,4174 | -4,6060     | -0,6854 |

Tabela 4: Densidade de cada constituinte vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e concentração  $C_0$  na distância  $x = 1/2$  para a mistura He-Xe, potencial realístico

| $\delta$ | $C_0 = 0,1$ |          | $C_0 = 0,5$ |          | $C_0 = 0,9$ |          |
|----------|-------------|----------|-------------|----------|-------------|----------|
|          | $\nu_1$     | $\nu_2$  | $\nu_1$     | $\nu_2$  | $\nu_1$     | $\nu_2$  |
| 0,01     | -0,00361    | -0,00505 | -0,00385    | -0,00599 | -0,00451    | -0,00862 |
| 0,1      | -0,3263     | -0,04575 | -0,03499    | -0,05521 | -0,04118    | -0,08110 |
| 10       | -0,7786     | -1,0881  | -0,8790     | -1,4379  | -1,0751     | -2,2709  |
| 40       | -1,0181     | -1,3970  | -1,1702     | -1,9063  | -1,4255     | -3,0143  |
| 60       | -1,0522     | -1,4430  | -1,2145     | -1,9785  | -1,4783     | -3,1279  |
| 100      | -1,0789     | -1,4781  | -1,2502     | -2,0370  | -1,5206     | -3,2238  |

Tabela 5: Desvio na densidade e na concentração de cada constituinte vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e concentração  $C_0$  na distância  $x = 1/2$  para a mistura He-Xe, potencial realístico

| $\delta$ | $C_0 = 0,1$ |          | $C_0 = 0,5$ |          | $C_0 = 0,9$ |          |
|----------|-------------|----------|-------------|----------|-------------|----------|
|          | $\Delta C$  | $\nu$    | $\Delta C$  | $\nu$    | $\Delta C$  | $\nu$    |
| 0,01     | 0,001298    | -0,00490 | 0,001074    | -0,00492 | 0,000411    | 0,000411 |
| 0,1      | 0,01181     | -0,04444 | 0,01011     | -0,04510 | 0,003992    | 0,003992 |
| 10       | 0,2785      | -1,05715 | 0,2795      | -1,15843 | 0,1196      | 0,11958  |
| 40       | 0,3410      | -1,35911 | 0,3680      | -1,53825 | 0,1589      | 0,15888  |
| 60       | 0,3517      | -1,40392 | 0,3820      | -1,59650 | 0,1650      | 0,16496  |
| 100      | 0,3593      | -1,43818 | 0,3934      | -1,64360 | 0,1703      | 0,17032  |

## 6. Solução Hidrodinâmica e Resultados

O objetivo é calcular o transporte de energia, para o mesmo problema, com base nas equações da Mecânica do Contínuo obtendo a solução hidrodinâmica correspondente. À solução encontrada serão aplicadas condições de contorno apropriadas. Esta solução corresponde à determinação do fluxo de calor da mistura.



No regime hidrodinâmico, as equações da Mecânica do Contínuo podem ser aplicadas na solução dos problemas de Dinâmica dos Gases Rarefeitos. O principal parâmetro utilizado na Dinâmica dos Gases Rarefeitos é o número de Knudsen,  $Kn$ , definido como, a razão entre o livre caminho médio molecular e a distância  $D$  entre as placas, que representa o comprimento característico do problema em estudo,  $Kn = \lambda / D$ . Costuma-se utilizar com maior frequência o chamado parâmetro de rarefação do gás,  $\delta$ , que é inversamente proporcional ao número de Knudsen,  $\delta = \sqrt{\pi} / (2Kn)$ . Na teoria cinética dos gases (Ferziger. and Kaper, 1972) pode-se expressar o livre caminho médio

da seguinte forma  $\lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\mu}{P_0} v_0$ , onde  $P_0$  denota a pressão em equilíbrio e  $\mu$  a viscosidade do gás considerado e

$v_0$  é a velocidade molecular característica na temperatura  $T_0$ . Assim obtém-se a seguinte expressão para o parâmetro

de rarefação do gás,  $\delta = \frac{DP_0}{\mu v_0}$ , que também é válida para misturas gasosas já que a pressão  $P_0$  e a viscosidade  $\mu$  são

quantidades mensuráveis.

No regime hidrodinâmico ( $\delta \rightarrow \infty$  ou  $Kn \rightarrow 0$ ) 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. Neste regime, será utilizada a equação de Navier-Stokes (Coimbra, 1978), com as condições de contorno com deslizamento da velocidade, ou seja, a velocidade tangencial do gás na superfície sólida não é assumida como zero.

A razão entre o fluxo de calor por unidade área é proporcional a diminuição da temperatura na distância  $x'$ ,  $q' = -\kappa \frac{dT}{dx}$ , a constante de condutividade  $\kappa$  é a condutividade térmica das placas. Esta equação é unidimensional e

permite calcular o fluxo de calor via lei de Fourier. A temperatura da mistura tem a forma (Sharipov & Seleznez, 1998)  $T(x') = T_1 + Ax' + B$ , onde A e B são constantes a serem determinadas, considerando para o problema em questão,

um gradiente de temperatura e a temperatura da mistura  $T$  definida como  $T = T_1 + \zeta_T l_0 \frac{dT}{dx'}$  em  $x' = 0$ , e

$T = T_2 - \zeta_T l_0 \frac{dT}{dx'}$  em  $x' = D$ , onde  $\frac{dT}{dx'} = A$ , onde  $l_0$  representa o livre caminho médio e  $\zeta_T$  o coeficiente de temperatura.

Então o objetivo é encontrar a forma adimensional para o fluxo de calor  $q'$ . De acordo com (Sharipov & Kalempa,

2003) tem-se a relação adimensional para o fluxo de calor dos constituintes  $q_\alpha$ ,  $q'_\alpha = n_\alpha k T_0 \left( \frac{2kT_0}{m} \right)^{1/2} q_\alpha \frac{\Delta T}{T_0}$ ,

e substituindo as relações anteriores tem-se o fluxo de calor da mistura na forma adimensional escrito como

$$q = -\frac{\kappa}{\mu} \frac{m}{2k} \frac{1}{\delta} \left( 1 + \frac{2\zeta_T}{\delta} \right)^{-1} \quad (25)$$

Os valores do coeficiente de temperatura  $\zeta_T$  são encontrados em (Sharipov & Seleznez, 1998) para um gás único, e em (Ivchenko, Loyalka & Thompson, 1997; Sharipov & Kalempa, 2003) para misturas de gases.

Nas tabelas (6) e (7), são apresentados valores do fluxo de calor  $q$ , para o potencial realístico e esfera-rígida, respectivamente, na distância  $x = 1/2$  em função do parâmetro de rarefação  $\delta$ , conforme a Eq. (25). Os valores  $\frac{\kappa}{\mu} \frac{m}{k}$  são 3,9; 6 e 12 para potencial realístico e 3,9; 5,3 e 9,2 para esfera-rígida, para as misturas Ne-Ar, He-Ar e He-Xe, respectivamente. Estes valores foram obtidos em nosso programa numérico. Da análise numérica das tabelas (6) e (7), pode-se concluir que: (i) O fluxo de calor  $q$  decresce à medida que se aumenta o parâmetro de rarefação  $\delta$ . Pode ser observado o mesmo comportamento tanto para o potencial realístico como para o potencial de esfera-rígida; (ii) Quando se compara a Tab.(6) com a Tab.(7) pode-se observar que mistura Ne-Ar é a que apresenta os melhores resultados, inclusive os valores coincidem a partir de  $\delta$  igual a 60.

Tabela 6. Fluxo de calor  $q$ , Solução hidrodinâmica para  $C_0 = 0,5$  na distância  $x = 1/2$ ,

potencial realístico

| $\delta$ | $q, C_0 = 0,5$             |                            |                            |
|----------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|
|          | Ne-Ar<br>$\zeta_T = 1,991$ | He-Ar<br>$\zeta_T = 2,017$ | He-Xe<br>$\zeta_T = 2,515$ |
|          | Eq.(25)                    | Eq.(25)                    | Eq.(25)                    |
| 0,01     | -0,4884                    | -0,8417                    | -1,1904                    |
| 0,1      | -0,4777                    | -0,8210                    | -1,1695                    |
| 1        | -0,3914                    | -0,6587                    | -0,9950                    |
| 10       | -0,1395                    | -0,2213                    | -0,3863                    |
| 40       | -0,0443                    | -0,0689                    | -0,1288                    |
| 60       | -0,0305                    | -0,0472                    | -0,0892                    |
| 100      | -0,0188                    | -0,0290                    | -0,0552                    |

Tabela 7. Fluxo de calor  $q$ , Solução hidrodinâmica para  $C_0 = 0,5$  na distância  $x = 1/2$ ,

potencial esfera-rígida

| $\delta$ | $q, C_0 = 0,5$            |                            |                            |
|----------|---------------------------|----------------------------|----------------------------|
|          | Ne-Ar<br>$\zeta_T = 1,94$ | He-Ar<br>$\zeta_T = 1,777$ | He-Xe<br>$\zeta_T = 1,992$ |
|          | Eq.(25)                   | Eq.(25)                    | Eq.(25)                    |
| 0,01     | -0,5013                   | -0,7435                    | -1,1517                    |
| 0,1      | -0,4899                   | -0,7252                    | -1,1263                    |
| 1        | -0,3996                   | -0,5819                    | -0,9229                    |
| 10       | -0,1405                   | -0,1955                    | -0,3389                    |
| 40       | -0,0444                   | -0,0608                    | -0,1046                    |
| 60       | -0,0305                   | -0,0417                    | -0,0719                    |
| 100      | -0,0188                   | -0,0256                    | -0,0442                    |

## 7. Conclusões

Foi realizado um estudo do transporte de energia de misturas binárias de gases ideais monoatômicos. O fluxo de calor da mistura e o fluxo de calor de cada constituinte foram calculados. Também foi calculada a densidade de cada constituinte, assim como o desvio na densidade e na concentração de cada constituinte. Os cálculos foram feitos para três misturas de gases nobres, Neônio-Argônio, Hélio-Argônio e Hélio-Xenônio, nos três regimes de escoamento: regime de moléculas livres ( $\delta \rightarrow 0, Kn \rightarrow \infty$ ), transição ( $\delta \cong 1, Kn \cong 1$ ), e hidrodinâmico ( $\delta \rightarrow \infty, Kn \rightarrow 0$ ). Foram usados os potenciais intermoleculares: potencial realístico 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  $\delta$  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  $\delta$  o comportamento do fluxo de calor da mistura pois, no limite do regime cinético para o regime hidrodinâmico, o fluxo de calor da mistura obtido na solução cinética formada pelo sistema de equações (23) e (24), tem que ser aproximadamente igual aos obtidos através da solução hidrodinâmica (25).

Uma comparação dos valores numéricos do fluxo de calor  $Q$  da mistura obtidos na solução cinética com os valores analíticos  $q$  obtidos na solução hidrodinâmica (25), com a utilização do coeficiente de temperatura  $\zeta_T$ , estão mostrados nas tabelas (8) e (9) para o potencial realístico e esfera-rígida, respectivamente. Pode ser visto que no alcance  $1 \leq \delta < 100$  a expressão (25) fornece uma aproximação razoável, ou seja, se aproxima da solução numérica da equação cinética com um erro de no máximo 1,7% para a mistura Ne-Ar para potencial de esfera-rígida. Então, conclui-se que para grandes valores do parâmetro de rarefação  $\delta$ , a solução analítica da equação de Navier-Stokes com a condição de deslizamento na velocidade pode ser aplicada com sucesso se o coeficiente de transporte correspondente for correto. Assim tem-se que para grandes valores de  $\delta$  não precisa-se de modelos cinéticos para descrever o sistema estudado.

Para pequenos valores do parâmetro de rarefação  $\delta$  a solução cinética é válida enquanto que a solução hidrodinâmica não. Então conclui-se que o uso da solução cinética é vantajoso principalmente para valores pequenos de  $\delta$  enquanto que para grandes valores de  $\delta$  é vantajoso se utilizar a solução hidrodinâmica.

Pode-se observar que o fluxo de calor da mistura decresce com o aumento do parâmetro de rarefação  $\delta$ , sendo maior para a mistura He-Xe. Também pode-se verificar que para a mistura He-Xe o resultado numérico coincide com a solução hidrodinâmica quando  $\delta \geq 10$ , para potencial realístico.

Tabela 8. Comparação da solução numérica do fluxo de calor  $Q$  da mistura com a solução analítica (25) para  $C_0 = 0,5$  na distância  $x = 1/2$ , potencial realístico

| $\delta$ | $Q$ e $q$                  |         |                            |         |                            |         |
|----------|----------------------------|---------|----------------------------|---------|----------------------------|---------|
|          | Ne-Ar<br>$\zeta_T = 1,991$ |         | He-Ar<br>$\zeta_T = 2,017$ |         | He-Xe<br>$\zeta_T = 2,515$ |         |
|          | resultado numérico         | Eq (25) | resultado numérico         | Eq (25) | resultado numérico         | Eq (25) |
| 0,01     | -0,5855                    | -0,4884 | -0,8655                    | -0,8417 | -1,3563                    | -1,1904 |
| 0,1      | -0,5591                    | -0,4777 | -0,8289                    | -0,8210 | -1,3091                    | -1,1695 |
| 1        | -0,4191                    | -0,3914 | -0,6252                    | -0,6587 | -1,0292                    | -0,9950 |
| 10       | -0,1420                    | -0,1395 | -0,2123                    | -0,2213 | -0,3863                    | -0,3863 |
| 40       | -0,0451                    | -0,0443 | -0,0676                    | -0,0689 | -0,1288                    | -0,1288 |
| 60       | -0,0310                    | -0,0305 | -0,0465                    | -0,0472 | -0,0892                    | -0,0892 |
| 100      | -0,0191                    | -0,0188 | -0,0286                    | -0,0290 | -0,0552                    | -0,0552 |

Tabela 9. Comparação da solução numérica do fluxo de calor  $Q$  da mistura com a solução analítica (25) para  $C_0 = 0,5$  na distância  $x = 1/2$ , potencial esfera-rígida

| $\delta$ | $Q$ e $q$                 |         |                            |         |                            |         |
|----------|---------------------------|---------|----------------------------|---------|----------------------------|---------|
|          | Ne-Ar<br>$\zeta_T = 1,94$ |         | He-Ar<br>$\zeta_T = 1,777$ |         | He-Xe<br>$\zeta_T = 1,992$ |         |
|          | resultado numérico        | Eq (25) | resultado numérico         | Eq (25) | resultado numérico         | Eq (25) |
| 0,01     | -0,5855                   | -0,5013 | -0,8652                    | -0,7435 | -1,3544                    | -1,1517 |
| 0,1      | -0,5588                   | -0,4899 | -0,8260                    | -0,7252 | -1,3011                    | -1,1263 |
| 1        | -0,4172                   | -0,3996 | -0,6088                    | -0,5819 | -0,9839                    | -0,9229 |
| 10       | -0,1397                   | -0,1405 | -0,1942                    | -0,1955 | -0,3303                    | -0,3389 |
| 40       | -0,4420                   | -0,0444 | -0,0604                    | -0,0608 | -0,1050                    | -0,1046 |
| 60       | -0,0302                   | -0,0305 | -0,0414                    | -0,0417 | -0,0721                    | -0,0719 |
| 100      | -0,0185                   | -0,0188 | -0,2530                    | -0,0256 | -0,0444                    | -0,0442 |

## 8. Agradecimentos

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

## 9. Referências

- Adzumi, H., 1937, "Studies on the flow of gaseous mixture through capillaries I. The viscosity of binary gaseous Mixture", Bull. Chem. Soc. Japan, vol. 12, pp. 199-226.
- Aoki, K., Nishino, K., Sone, Y. and Sugimoto, H., 1991, "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.
- Bentz, J. A., Thompson, R. V. & Loyalka, S. K., 1999, "Viscosity and velocity slip coefficient for gas mixture: measurements with a spinning rotor", J. Vac. Sci. Technol, vol. 17, pp. 235-241.
- Bird, G. A., 1976, "Molecular gas dynamics", Clarendon Press – Oxford.
- Bird, G. A., 1994, "Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows", Oxford University Press, Oxford.
- Cercignani, C., 1975, "Theory and application of the Boltzmann Equation", Scottish Acad. 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", Phys. Fluids, vol.

16, pp. 2095.

- Cercignani, C., 2000, "Rarefied Gas Dynamics". (Cambridge University Press ).
- Chadwick, P., 1976, "Continuum mechanics – concise theory and problems". London George Allen & Unwin Ltd.
- Coimbra, A. L., 1978, "Lição de mecânica do contínuo", Editora da Universidade de São Paulo.
- Cumin, L. M. G., Sharipov, F., & Kremer, G. M., 1998, "Rarefied gas flow between two cylinders caused by the evaporation and condensation on their surfaces", *Phys. Fluids*, vol. 10, pp. 3203-3208.
- Ferziger, J. H. and Kaper, H. G., 1972, "Mathematical theory of transport processes in gases", North-Holland Publishing Company, Amsterdam.
- 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.
- 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.
- Kremer, G. M., 2003, "Uma introdução à Equação de Boltzmann", Departamento de Física, UFPR.
- Lang, H., & Muller, W. J. C., 1975, "Slip effect in mixture of monatomic gases for general surface accommodation", *Z. Naturforsch.*, vol. 30, pp. 855-867.
- Marques, Kremer & Sharipov, 2000, "Couette flow with slip and jump boundary conditions", *Cont. Mech. Thermody.* 12, 379-386.
- McCormack, F. J., 1973, "Construction of linearized kinetic models for gaseous mixtures and molecular gases", *Physics of Fluids*, vol. 16, pp. 2095.
- Onishi, Y., 1997, "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.
- Sharipov, F., & Seleznev, V., 1998, "Data on internal gas flows", *J. Phys. Chem. Ref. Data* 27, pp. 657-706.
- Sharipov, F., & Subbotin, E. A., 1993, "On optimization of the discrete velocity method used in rarefied gas dynamics", *ZAMP*, vol. 44.
- 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", *Phys. Fluids*, vol. 15, n. 6, pp. 1800-1806.
- Takata, S., 2001, "Diffusion slip for a binary mixture of hard-sphere molecular gases: numerical analysis based on the linearized Boltzmann equation, in *Rarefied Gas Dynamics*", T. J. Bartel and M. A. Gallis, eds., (AIP, New York), pp. 22-29.

## 10. Direitos Autorais

# ENERGY TRANSFER OF GASEOUS MIXTURE IN THE WHOLE RANGE OF THE KNUDSEN NUMBER

Itamar Aparecido Borges  
CESEC, Universidade Federal do Paraná  
itamar@seed.pr.gov.br

Liliana Madalena Gramani Cumin  
Departamento de Matemática, Universidade Federal do Paraná  
Gramani@mat.ufpr.br

### Abstract

This work presents the energy transport calculating the heat flow. The problem consists of a binary mixture of monoatomic gases confined between two parallel plates long enough. In the beginning the system is in equilibrium, being slightly disturbed a temperature gradient, between the plates which characterizes the transport of energy. The distribution function for each constituent of the mixture obeys a coupled integral-differential equation system that is based on Boltzmann's equation. All the solutions found are stable, since we are dealing with linear problems. The solutions are studied by using 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 heat flow of mixture and of each constituent were calculated, as well as the deviations in the concentrations and density of mixture 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. It has also compared the kinetic solution with the hydrodynamic solution for the heat flow of the mixture.

Keywords: Heat flow, Binary mixture of rarefied gases, Rarefaction of the mixture parameter