

O Problema do Reverso de Temperatura com o Modelo McCormack

C. S. SCHERER

Recebido em 22 de novembro de 2022 / Aceito em 20 de dezembro de 2023

RESUMO. Uma versão analítica do método de ordenadas discretas (ADO) é usada para determinar uma solução precisa e consistente para o problema do Reverso de Temperatura em misturas binárias de gases rarefeitos. As equações cinéticas usadas são baseadas no modelo cinético McCormack. Apresenta-se o desenvolvimento completo de uma solução analítica na variável espacial, além de resultados numéricos para os valores críticos do calor latente para a inversão de sentido do gradiente de temperatura e do fluxo de calor de cada gás nas misturas Neônio-Argônio e Hélio-Xenônio. O algoritmo é considerado simples de ser elaborado e o código desenvolvido (em FORTRAN) requer em torno de um segundo para ser executado em um computador com processador Intel Core i3 - 2.30 GHz.

Palavras-chave: reverso de temperatura, método ADO, modelo McCormack.

1 INTRODUÇÃO

Ao investigar um problema de evaporação em um canal plano, em 1971 Pao [19] verificou a possibilidade da existência de um inesperado fenômeno chamado posteriormente de *Reverso de Temperatura*. O problema estudado por Pao consiste em um gás, em estado de rarefação, mantido entre duas interfaces líquidas com diferentes temperaturas. Essa diferença entre as temperaturas das fases condensadas faz com que o gás evapore na interface quente e condense na interface fria, gerando assim um fluxo de massa entre elas. Além disso, no interior do canal é esperado que a temperatura do gás aumente a medida que se aproxime da interface quente e se afaste da interface fria. Porém, Pao [19] previu que a temperatura do gás no interior do canal pode ter um comportamento diferente do esperado. Segundo ele, dependendo do calor latente do gás na fase de transição, a temperatura deste gás poderá aumentar ao se aproximar da interface fria e diminuir próximo à interface quente, ou seja, o seu gradiente de temperatura terá o sentido contrário ao da diferença de temperaturas imposta pelas interfaces.

Continuando, Pao [19] obteve um critério formal para a existência deste gradiente de temperatura invertido. Tal critério consiste em um valor mínimo para o calor latente do gás na fase de transição. Dessa forma, em situações onde este calor latente for maior que o valor estimado por Pao, a inversão de sentido do gradiente de temperatura do gás ocorrerá.

O resultado de Pao [19] foi obtido usando o modelo cinético proposto por Bhatnagar, Gross e Krook (BGK) [2] da equação linearizada de Boltzmann (ELB) [5, 28] e um complexo método matemático envolvendo equações integrais, transformada de Fourier e aproximações assintóticas. Em 1974 Thomas Jr., Chang e Siewert [13] obtiveram um resultado melhor que o encontrado por Pao [19] usando novamente o modelo BGK, mas resolvendo o problema do Reverso de Temperatura com o método das soluções elementares, proposto por Case e Zweifel [4], e encontrando, dessa forma, um resultado exato. Anos depois, em 1991 Sone, Ohwada e Aoki [27] usaram um esquema de diferenças finitas para resolver o problema do Reverso de Temperatura usando a ELB e considerando que as moléculas do gás colidem como esferas rígidas. O resultado encontrado na Ref. [27] se aproxima do resultado obtido na Ref. [13].

Com a evolução dos métodos matemáticos para problemas em dinâmica de gases rarefeitos, o método analítico de ordenadas discretas (ADO) [1] começou a ser usado para resolver as equações íntegro-diferenciais. Desde então este método tem se mostrado consistente, preciso, fácil de ser implementado e eficiente sob o ponto de vista computacional. Assim, usando o método ADO, em 2003 Siewert [23] resolveu o problema do Reverso de Temperatura usando a ELB, considerando colisões como esferas rígidas, e em 2010 Scherer e Barichello [20] determinaram uma solução unificada para este problema com os modelos cinéticos BGK, S [21], Gross-Jackson [12] e MRS [11] da ELB. Entretanto, em todos os trabalhos mencionados até aqui considerou-se apenas uma única espécie de gás envolvida.

O objetivo deste trabalho foi resolver o problema do Reverso de Temperatura com o modelo cinético proposto em 1973 por McCormack [16] para misturas de duas espécies de gases rarefeitos. Assim, foi construída uma solução analítica na variável espacial utilizando o método ADO e os aspectos analíticos e computacionais desta solução são evidenciados. Além disso são apresentados alguns resultados numéricos para as misturas Neônio–Argônio e Hélio–Xenônio.

Com relação à aplicações para estes gases, misturas de Neônio com Argônio são frequentemente utilizadas na forma de plasma em estudos e pesquisas que buscam melhorias e evoluções nas áreas que envolvem esta tecnologia [3, 17]. Já misturas de Hélio com Xenônio vêm sendo usadas como fluido de resfriamento para turbinas a gás [15] e reatores nucleares [15, 30, 31].

No decorrer das últimas décadas o modelo McCormack e o método ADO já foram utilizados para resolução de vários problemas em dinâmica de gases rarefeitos. Pode-se citar a Ref. [26] onde foram resolvidos os problemas de Poiseuille, Creep Térmico e da Difusão, a Ref. [25] para os problemas do Deslizamento Viscoso e do Creep Térmico em semi-espaço, a Ref. [10] para o problema de Couette, as Refs. [24] e [14] para o problema do Salto de Temperatura e a Ref. [9] para o problema de Transferência de Calor. Em todos estes trabalhos o método ADO apresentou os bons aspectos mencionados anteriormente e obteve resultados numéricos com precisão de vários dígitos.

Este trabalho está organizado da seguinte forma: Na Seção 2 é apresentada a formulação matemática do problema. Na Seção 3 é feita uma reformulação em termos de equações vetoriais e a solução em ordenadas discretas é apresentada na Seção 4. Os resultados numéricos e os aspectos

computacionais são apresentados e discutidos na Seção 5 e algumas conclusões são apontadas na Seção 6.

2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

A derivação das equações para misturas de dois gases apresentada neste trabalho está baseada no modelo McCormack descrito na Ref. [16]. Além disso, utiliza-se a notação usada na Ref. [24], pois ela é adequada para desenvolver a solução apresentada aqui.

Assim, considera-se as funções h_α para os dois tipos de partículas ($\alpha = 1$ e $\alpha = 2$) que denotam perturbações nas distribuições Maxwellianas de cada espécie de gás, ou seja,

$$f_\alpha(x, \mathbf{v}) = f_{\alpha,0}(v)[1 + h_\alpha(x, \mathbf{v})], \quad (2.1)$$

onde

$$f_{\alpha,0}(v) = n_\alpha(\lambda_\alpha/\pi)^{3/2}e^{-\lambda_\alpha v^2}, \quad \lambda_\alpha = m_\alpha/(2kT_0). \quad (2.2)$$

Aqui k é a constante de Boltzmann, m_α e n_α são respectivamente as massas e densidades de equilíbrio da espécie α , x é a variável espacial (medida, por exemplo, em centímetros), \mathbf{v} , com componentes v_x, v_y, v_z e magnitude v , é o vetor velocidade das partículas e T_0 é uma temperatura de referência. Segundo McCormack [16], as perturbações h_α satisfazem (para o caso de variações espaciais apenas na direção x) as equações

$$c_x \frac{\partial}{\partial x} h_\alpha(x, \mathbf{c}) + \omega_\alpha \gamma_\alpha h_\alpha(x, \mathbf{c}) = \omega_\alpha \gamma_\alpha \mathcal{L}_\alpha\{h_1, h_2\}(x, \mathbf{c}), \quad \alpha = 1, 2, \quad (2.3)$$

onde o vetor \mathbf{c} , com componentes c_x, c_y, c_z e magnitude c , é a velocidade adimensionalizada,

$$\omega_\alpha = [m_\alpha/(2kT_0)]^{1/2} \quad (2.4)$$

e as frequências de colisão γ_α são definidas posteriormente. O operador integral é escrito como

$$\mathcal{L}_\alpha\{h_1, h_2\}(x, \mathbf{c}) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_{\beta=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c'^2} h_\beta(x, \mathbf{c}') K_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) dc'_x dc'_y dc'_z, \quad (2.5)$$

e os elementos do núcleo de colisão $K_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c})$ estão listados explicitamente no Apêndice A deste trabalho. Na obtenção da Eq. (2.3) a velocidade \mathbf{c} foi adimensionalizada de forma diferente nas duas equações, ou seja, para o caso $\alpha = 1$ usa-se $\mathbf{c} = \omega_1 \mathbf{v}$ enquanto que para $\alpha = 2$ usa-se $\mathbf{c} = \omega_2 \mathbf{v}$. Para a variável espacial utiliza-se a expressão

$$\tau = \frac{x}{l_0}, \quad \text{onde} \quad l_0 = \frac{\mu v_0}{P_0} \quad (2.6 \text{ a, b})$$

é o livre caminho médio (baseado na viscosidade) proposto por Sharipov e Kalempa [22]. Aqui valem as definições

$$v_0 = \left(\frac{2kT_0}{m} \right)^{1/2} \quad \text{e} \quad m = \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{n_1 + n_2}. \quad (2.7 \text{ a, b})$$

Continuando, a viscosidade μ da mistura, em termos das pressões parciais P_α e das frequências de colisão γ_α , é expressa, de acordo com a Ref. [22], como

$$\mu = \frac{P_1}{\gamma_1} + \frac{P_2}{\gamma_2}, \quad \text{onde} \quad \frac{P_\alpha}{P_0} = \frac{n_\alpha}{n_1 + n_2}, \quad (2.8 \text{ a, b})$$

$$\gamma_1 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - v_{1,2}^{(4)} v_{2,1}^{(4)}}{\Psi_2 + v_{1,2}^{(4)}} \quad \text{e} \quad \gamma_2 = \frac{\Psi_1 \Psi_2 - v_{1,2}^{(4)} v_{2,1}^{(4)}}{\Psi_1 + v_{2,1}^{(4)}}. \quad (2.9 \text{ a, b})$$

Aqui

$$\Psi_1 = v_{1,1}^{(3)} + v_{1,2}^{(3)} - v_{1,1}^{(4)}, \quad \Psi_2 = v_{2,2}^{(3)} + v_{2,1}^{(3)} - v_{2,2}^{(4)} \quad (2.10 \text{ a, b})$$

e as expressões dos parâmetros $v_{i,j}^{(k)}$ estão definidas no Apêndice A. Agora, definindo

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \omega_\alpha l_0 \quad (2.11)$$

ou, mais explicitamente,

$$\sigma_\alpha = \gamma_\alpha \frac{n_1/\gamma_1 + n_2/\gamma_2}{n_1 + n_2} (m_\alpha/m)^{1/2}, \quad (2.12)$$

a Eq. (2.3) pode ser reescrita em termos da variável τ como

$$c_x \frac{\partial}{\partial \tau} h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) + \sigma_\alpha h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) = \sigma_\alpha \mathcal{L}_\alpha \{h_1, h_2\}(\tau, \mathbf{c}). \quad (2.13)$$

Para completar a formulação matemática do problema do Reverso de Temperatura deve-se suplementar a Eq. (2.13) com condições de contorno apropriadas. Considera-se neste trabalho que a mistura de gases é mantida entre duas interfaces líquidas com diferentes temperaturas, definindo dessa forma um canal plano com largura $2a$. Portanto, a solução da Eq. (2.13) precisa ser válida para todo $\tau \in (-a, a)$. A mistura evapora na interface com maior temperatura e condensa na outra. Assim, considera-se que a interface localizada em $\tau = -a$ é mantida com temperatura $T_0(1 - \delta)$ enquanto que a interface em $\tau = a$ possui temperatura $T_0(1 + \delta)$, para um δ pequeno e positivo. Além disso, a densidade de cada espécie de gás também é diferente em cada interface. Considera-se que a espécie α possui densidade $n_\alpha(1 - \rho_\alpha)$ na interface em $\tau = -a$ e densidade $n_\alpha(1 + \rho_\alpha)$ na interface em $\tau = a$. Dessa forma, seguindo Siewert [23] e Scherer e Barichello [20], as condições de contorno para este problema são

$$h_\alpha(-a, c_x, c_y, c_z) = -\rho_\alpha - (c^2 - 3/2)\delta \quad (2.14 \text{ a})$$

e

$$h_\alpha(a, -c_x, c_y, c_z) = \rho_\alpha + (c^2 - 3/2)\delta, \quad (2.14 \text{ b})$$

para $\alpha = 1, \alpha = 2, c_x > 0$ e todo c_y e c_z . Aqui os parâmetros ρ_α e δ são usados para especificar os desvios de densidade e temperatura em relação aos valores de equilíbrio da mistura.

Com relação às condições de contorno dadas pelas Eqs. (2.14), como elas se referem à interfaces líquidas não há uma classificação ou nomenclatura específica para as mesmas. Se fossem necessárias condições de contorno que representassem a interação da mistura de gases com

paredes sólidas poderiam ser utilizadas as condições de contorno de Maxwell [29] ou as de Cercignani-Lampis [6], mas não é o que ocorre no problema abordado aqui.

De acordo com Pao [19], a equação de Clausius-Clapeyron pode ser usada para relacionar os desvios de densidade e temperatura nas interfaces como

$$\rho_\alpha = [L_\alpha/(kT_0) - 1]\delta, \quad (2.15)$$

onde L_α é o calor latente da espécie α na fase de transição e na temperatura T_0 . Definido o parâmetro

$$\beta_\alpha = L_\alpha/(kT_0) - 1, \quad (2.16)$$

para $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$, reescreve-se as condições de contorno dadas pelas Eqs. (2.14) como

$$h_\alpha(-a, c_x, c_y, c_z) = -(\beta_\alpha + c^2 - 3/2)\delta \quad (2.17 \text{ a})$$

e

$$h_\alpha(a, -c_x, c_y, c_z) = (\beta_\alpha + c^2 - 3/2)\delta \quad (2.17 \text{ b})$$

para $c_x > 0$ e todo c_y e c_z .

As quantidades de interesse físico para cada espécie de gás podem ser calculadas através de integrais das funções h_α . Seguindo a Ref. [24], a perturbação de temperatura para cada espécie α é dada por

$$T_\alpha(\tau) = \frac{2}{3}\pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 3/2) h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) dc_x dc_y dc_z \quad (2.18)$$

e, seguindo a Ref. [9], o fluxo de calor para cada espécie α é dado por

$$Q_\alpha(\tau) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2} (c^2 - 5/2) h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) c_x dc_x dc_y dc_z. \quad (2.19)$$

Assim como no caso de uma única espécie de gás investigado por Pao [19], existem valores para os parâmetros β_α (para $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$) que fazem com que a declividade da perturbação de temperatura de cada gás na mistura esteja em oposição à diferença de temperaturas imposta pelas interfaces. Portanto, deseja-se determinar para quais valores de β_α este fenômeno é observado e, para isso, segue-se o procedimento utilizado nas Refs. [20, 23] e divide-se o problema definido pela Eq. (2.13), com condições de contorno dadas pelas Eqs. (2.17), em dois novos problemas. Assim, define-se

$$h_\alpha(\tau, \mathbf{c}) = [(\beta_\alpha - 3/2)h_\alpha^1(\tau, \mathbf{c}) + h_\alpha^2(\tau, \mathbf{c})]\delta, \quad (2.20)$$

onde as funções h_α^1 e h_α^2 devem ambas satisfazer a Eq. (2.13) com condições de contorno dadas respectivamente por

$$h_\alpha^1(\mp a, \pm c_x, c_y, c_z) = \mp 1 \quad \text{e} \quad h_\alpha^2(\mp a, \pm c_x, c_y, c_z) = \mp c^2 \quad (2.21 \text{ a, b})$$

para $c_x > 0$ e todo c_y e c_z . Conforme proposto na decomposição dada pela Eq. (2.20), em termos dos dois novos problemas encontra-se para a perturbação de temperatura

$$T_\alpha(\tau) = [(\beta_\alpha - 3/2)T_\alpha^1(\tau) + T_\alpha^2(\tau)]\delta, \quad (2.22)$$

onde $T_\alpha^l(\tau)$, para $l = 1$ e $l = 2$, são dadas pela Eq. (2.18), com $h_\alpha = h_\alpha^l$. Da mesma forma o fluxo de calor é dado por

$$Q_\alpha(\tau) = [(\beta_\alpha - 3/2)Q_\alpha^1(\tau) + Q_\alpha^2(\tau)]\delta, \tag{2.23}$$

onde $Q_\alpha^l(\tau)$, para $l = 1$ e $l = 2$, são definidos pela Eq. (2.19) com $h_\alpha = h_\alpha^l$.

Como o objetivo aqui é conhecer em que casos o gradiente de temperatura e o fluxo de calor (de cada espécie de gás) mudam de sentido no centro do canal, é preciso determinar quais são os valores limites de β_α para que estes fenômenos sejam observados. Assim, deriva-se a Eq. (2.22) em relação a τ , iguala-se a equação resultante (calculada em $\tau = 0$) a zero e, resolvendo para β_α , encontra-se

$$\beta_\alpha^T = 3/2 - \frac{d}{d\tau}T_\alpha^2(0)/\frac{d}{d\tau}T_\alpha^1(0), \tag{2.24}$$

que é o valor limite para ocorrer a inversão de sentido do gradiente de temperatura. Portanto, se $\beta_\alpha > \beta_\alpha^T$ o gradiente de temperatura da espécie α estará com sentido oposto à diferença de temperaturas entre as interfaces. Agora, aplica-se $\tau = 0$ na Eq. (2.23), iguala-se a equação resultante a zero e, resolvendo para β_α , encontra-se

$$\beta_\alpha^Q = 3/2 - Q_\alpha^2(0)/Q_\alpha^1(0), \tag{2.25}$$

que é o valor limite para ocorrer a inversão de sentido do fluxo de calor. Dessa forma, se $\beta_\alpha > \beta_\alpha^Q$ o fluxo de calor da espécie α terá o mesmo sentido da diferença de temperaturas entre as interfaces.

Analisando as Eqs. (2.16), (2.24) e (2.25) nota-se que a inversão de sentido do gradiente de temperatura e do fluxo de calor da espécie α ocorrem, respectivamente, quando o seu calor latente L_α for maior que $(\beta_\alpha^T + 1)kT_0$ ou maior que $(\beta_\alpha^Q + 1)kT_0$.

Uma aparente explicação para este inesperado comportamento da temperatura de gases em situações de grande calor latente é apresentada por Thomas Jr., Chang e Siewert [13]. Segundo eles, para grandes valores de β_α a evaporação é tão rápida que a transferência de energia pelo fluxo de massa precisa ser contrabalanceada pela condução de calor na direção oposta ao escoamento. O objetivo deste trabalho é apresentar uma solução matemática para este problema. O embasamento teórico e a viabilidade física do mesmo não serão tratados.

Na próxima seção será introduzida uma notação matricial para simplificar a formulação do problema.

3 REFORMULAÇÃO EM EQUAÇÕES VETORIAIS

Como os valores limites de β_α^T e β_α^Q (nas Eqs. (2.24) e (2.25)) dependem, respectivamente, das perturbações de temperatura e dos fluxos de calor que, por sua vez, são definidos em termos de integrais das funções h_α^l , serão construídos problemas mais simples que facilitam a resolução do problema original. Assim, seguindo as Refs. [24] e [9], define-se as projeções

$$g_{2\alpha-1}^l(\tau, c_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(c_y, c_z)h_\alpha^l(\tau, c_x, c_y, c_z)dc_ydc_z \tag{3.1 a}$$

e

$$g_{2\alpha}^l(\tau, c_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(c_y, c_z) h_{\alpha}^l(\tau, c_x, c_y, c_z) dc_y dc_z, \tag{3.1 b}$$

para $\alpha = 1, \alpha = 2, l = 1$ e $l = 2$, onde

$$\phi_1(c_y, c_z) = \pi^{-1} e^{-(c_y^2 + c_z^2)} \tag{3.2 a}$$

e

$$\phi_2(c_y, c_z) = \pi^{-1} (c_y^2 + c_z^2 - 1) e^{-(c_y^2 + c_z^2)}. \tag{3.2 b}$$

Dessa forma multiplica-se a Eq. (2.13) (considerando $h_{\alpha} = h_{\alpha}^l$) primeiro por $\phi_1(c_y, c_z)$ e depois por $\phi_2(c_y, c_z)$ e integra-se as equações resultantes para todo c_y e c_z . Introduzindo a notação $c_x = \xi$, obtém-se para $l = 1$ e $l = 2$ quatro equações de balanço acopladas que são escritas na forma matricial como

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}^l(\tau, \xi) + \mathbf{\Gamma} \mathbf{G}^l(\tau, \xi) = \mathbf{\Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\Psi}(\xi') \mathbf{K}(\xi', \xi) \mathbf{G}^l(\tau, \xi') d\xi', \tag{3.3}$$

onde $\mathbf{G}^l(\tau, \xi)$ possui componentes $g_{\alpha}^l(\tau, \xi)$, para $\alpha = 1, 2, 3, 4$,

$$\mathbf{\Gamma} = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_2\} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\Psi}(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2}. \tag{3.4 a, b}$$

Os elementos $k_{m,n}(\xi', \xi)$, para $m, n = 1, 2, 3, 4$, da matriz do núcleo de colisão $\mathbf{K}(\xi', \xi)$ estão listados no Apêndice B deste trabalho. Para encontrar condições de contorno vetoriais para h_{α}^1 e h_{α}^2 , multiplica-se cada uma das Eqs. (2.21) por $\phi_1(c_y, c_z)$ e $\phi_2(c_y, c_z)$ e integra-se as equações resultantes para todo c_y e c_z . Usando novamente as Eqs. (3.1) encontra-se para \mathbf{G}^1 e \mathbf{G}^2 as condições de contorno

$$\mathbf{G}^1(\mp a, \pm \xi) = \mp \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{G}^2(\mp a, \pm \xi) = \mp \begin{bmatrix} \xi^2 + 1 \\ 1 \\ \xi^2 + 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{3.5 a, b}$$

para $\xi > 0$. Usando novamente as projeções dadas pelas Eqs. (3.1), as quantidades de interesse também são expressas na forma vetorial. Dessa forma a solução do problema \mathbf{G}^l dado pela Eq. (3.3), para cada um dos dois conjuntos de condições de contorno dadas pelas Eqs. (3.5), é usada para calcular na Eq. (2.18), considerando $h_{\alpha} = h_{\alpha}^l$, as perturbações de temperatura

$$\mathbf{T}^l(\tau) = \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\Psi}(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi^2 - 1/2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{G}^l(\tau, \xi) d\xi \tag{3.6}$$

e, na Eq. (2.19), considerando $h_{\alpha} = h_{\alpha}^l$, os fluxos de calor

$$\mathbf{Q}^l(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\Psi}(\xi) \begin{bmatrix} \xi^2 - 3/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi^2 - 3/2 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{G}^l(\tau, \xi) \xi d\xi, \tag{3.7}$$

onde os vetores $\mathbf{T}^l(\tau)$ e $\mathbf{Q}^l(\tau)$ possuem, respectivamente, as componentes $T_{\alpha}^l(\tau)$ e $Q_{\alpha}^l(\tau)$ para $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$.

Na próxima seção será apresentada a solução pelo método ADO para o problema do Reverso de Temperatura.

4 SOLUÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS

Primeiramente, notando na Eq. (3.4 b) que $\psi(\xi)$ é uma função par e introduzindo um esquema de quadratura para o intervalo $[0, \infty)$, pode-se aproximar o termo integral da Eq. (3.3) da forma

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{G}^l(\tau, \xi) + \Gamma \mathbf{G}^l(\tau, \xi) = \Gamma \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) \left[\mathbf{K}(\xi_k, \xi) \mathbf{G}^l(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \xi) \mathbf{G}^l(\tau, -\xi_k) \right]. \quad (4.1)$$

Aqui ξ_k e w_k são, respectivamente, os N pontos e pesos de um esquema (arbitrário) de quadratura. Calculando a Eq. (4.1) em $\xi = \pm \xi_i$, para $i = 1, \dots, N$, obtém-se a versão em ordenadas discretas da Eq. (3.3)

$$\pm \xi_i \frac{d}{d\tau} \mathbf{G}^l(\tau, \pm \xi_i) + \Gamma \mathbf{G}^l(\tau, \pm \xi_i) = \Gamma \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) \left[\mathbf{K}(\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{G}^l(\tau, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm \xi_i) \mathbf{G}^l(\tau, -\xi_k) \right], \quad (4.2)$$

para a qual procura-se soluções exponenciais da forma

$$\mathbf{G}^l(\tau, \xi) = \Phi(\mathbf{v}, \xi) e^{-\tau/\mathbf{v}}, \quad (4.3)$$

onde $\Phi(\mathbf{v}, \xi)$ possui componentes $\Phi_\alpha(\mathbf{v}, \xi)$, para $\alpha = 1, 2, 3, 4$. Assim, substituindo a Eq. (4.3) na Eq. (4.2) obtém-se, para $i = 1, \dots, N$,

$$\left(\mathbf{I} \mp \frac{\xi_i}{\mathbf{v}} \Gamma^{-1} \right) \Phi(\mathbf{v}, \pm \xi_i) = \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) \left[\mathbf{K}(\xi_k, \pm \xi_i) \Phi(\mathbf{v}, \xi_k) + \mathbf{K}(-\xi_k, \pm \xi_i) \Phi(\mathbf{v}, -\xi_k) \right] \quad (4.4)$$

e escreve-se a equação acima na forma matricial como

$$(\mathbf{I} - \mathbf{M}\mathbf{v}^{-1}) \Phi_+(\mathbf{v}) = \mathbf{W}(+, +) \Phi_+(\mathbf{v}) + \mathbf{W}(-, +) \Phi_-(\mathbf{v}) \quad (4.5 \text{ a})$$

e

$$(\mathbf{I} + \mathbf{M}\mathbf{v}^{-1}) \Phi_-(\mathbf{v}) = \mathbf{W}(+, -) \Phi_+(\mathbf{v}) + \mathbf{W}(-, -) \Phi_-(\mathbf{v}), \quad (4.5 \text{ b})$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade $4N \times 4N$, \mathbf{M} é a matriz $4N \times 4N$ definida como

$$\mathbf{M} = \text{diag} \left\{ \frac{\xi_1}{\sigma_1}, \dots, \frac{\xi_N}{\sigma_1}, \frac{\xi_1}{\sigma_1}, \dots, \frac{\xi_N}{\sigma_1}, \frac{\xi_1}{\sigma_2}, \dots, \frac{\xi_N}{\sigma_2}, \frac{\xi_1}{\sigma_2}, \dots, \frac{\xi_N}{\sigma_2} \right\} \quad (4.6)$$

e $\Phi_\pm(\mathbf{v})$ são os vetores $4N$

$$\Phi_\pm(\mathbf{v}) = [\Phi_{1\pm}(\mathbf{v}) \ \Phi_{2\pm}(\mathbf{v}) \ \Phi_{3\pm}(\mathbf{v}) \ \Phi_{4\pm}(\mathbf{v})]^T, \quad (4.7)$$

com componentes que são os subvetores

$$\Phi_{\alpha\pm}(\mathbf{v}) = [\Phi_{\alpha}(\mathbf{v}, \pm\xi_1), \dots, \Phi_{\alpha}(\mathbf{v}, \pm\xi_N)]^T, \tag{4.8}$$

para $\alpha = 1, 2, 3, 4$. Continuando, T denota a operação de transposição, $\mathbf{W}(\pm, \pm)$ são as matrizes $4N \times 4N$

$$\mathbf{W}(\pm, \pm) = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{11}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{12}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{13}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{14}(\pm, \pm) \\ \mathbf{W}_{21}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{22}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{23}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{24}(\pm, \pm) \\ \mathbf{W}_{31}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{32}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{33}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{34}(\pm, \pm) \\ \mathbf{W}_{41}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{42}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{43}(\pm, \pm) & \mathbf{W}_{44}(\pm, \pm) \end{bmatrix}, \tag{4.9}$$

com componentes que são submatrizes $N \times N$ definidas como

$$[\mathbf{W}_{mn}(\pm, \pm)]_{i,j} = w_j \psi(\xi_j) k_{m,n}(\pm\xi_j, \pm\xi_i) \tag{4.10}$$

para $m, n = 1, 2, 3, 4$ e $i, j = 1, \dots, N$. De acordo com as Eqs. (B.1) a (B.20) do Apêndice B nota-se que as componentes $k_{m,n}(\xi', \xi)$ da matriz do núcleo de colisão satisfazem as condições de simetria

$$k_{m,n}(\xi', \xi) = k_{m,n}(-\xi', -\xi) \quad \text{e} \quad k_{m,n}(-\xi', \xi) = k_{m,n}(\xi', -\xi). \tag{4.11 a, b}$$

Assim, definindo as matrizes

$$\mathbf{W}_+ = \mathbf{W}(+, +) = \mathbf{W}(-, -) \quad \text{e} \quad \mathbf{W}_- = \mathbf{W}(+, -) = \mathbf{W}(-, +), \tag{4.12 a, b}$$

reescreve-se as Eqs. (4.5) como

$$(\mathbf{I} - \mathbf{M}\mathbf{v}^{-1}) \Phi_+(\mathbf{v}) = \mathbf{W}_+ \Phi_+(\mathbf{v}) + \mathbf{W}_- \Phi_-(\mathbf{v}) \tag{4.13 a}$$

e

$$(\mathbf{I} + \mathbf{M}\mathbf{v}^{-1}) \Phi_-(\mathbf{v}) = \mathbf{W}_- \Phi_+(\mathbf{v}) + \mathbf{W}_+ \Phi_-(\mathbf{v}). \tag{4.13 b}$$

Agora, somando e subtraindo as Eqs. (4.13) encontra-se o problema de autovalor

$$\Lambda \mathbf{X} = \lambda \mathbf{X}, \tag{4.14}$$

onde Λ é a matriz $4N \times 4N$

$$\Lambda = (\mathbf{W}_+ - \mathbf{W}_- - \mathbf{I}) \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{W}_+ + \mathbf{W}_- - \mathbf{I}) \mathbf{M}^{-1} \tag{4.15}$$

e os autovalores e autovetores são dados, respectivamente, por

$$\lambda = 1/\mathbf{v}^2 \quad \text{e} \quad \mathbf{X} = \mathbf{M}(\Phi_+(\mathbf{v}) + \Phi_-(\mathbf{v})). \tag{4.16 a, b}$$

Usando os $4N$ autovalores (constantes de separação \mathbf{v}_j) e os $4N$ autovetores $\mathbf{X}(\mathbf{v}_j)$ dados pela Eq. (4.14) pode-se expressar as soluções elementares, escritas na Eq. (4.7), como

$$\Phi_+(\mathbf{v}_j) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} \left[\mathbf{I} - \mathbf{v}_j (\mathbf{W}_+ + \mathbf{W}_- - \mathbf{I}) \mathbf{M}^{-1} \right] \mathbf{X}(\mathbf{v}_j) \tag{4.17 a}$$

e

$$\Phi_{-}(v_j) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} \left[\mathbf{I} + v_j(\mathbf{W}_{+} + \mathbf{W}_{-} - \mathbf{I})\mathbf{M}^{-1} \right] \mathbf{X}(v_j), \tag{4.17 b}$$

onde os vetores $\Phi_{+}(v_j)$ correspondem a $\Phi(v_j, \xi_i)$ na Eq. (4.3), para $i = 1, \dots, N$. Analogamente $\Phi_{-}(v_j)$ correspondem a $\Phi(v_j, -\xi_i)$, para $i = 1, \dots, N$. Dessa forma escreve-se a solução geral em ordenadas discretas do problema dado pela Eq. (4.2) como

$$\mathbf{G}^l(\tau, \pm \xi_i) = \sum_{j=1}^{4N} \left[A_j^l \Phi(v_j, \pm \xi_i) e^{-(a+\tau)/v_j} + B_j^l \Phi(v_j, \mp \xi_i) e^{-(a-\tau)/v_j} \right]. \tag{4.18}$$

Um aspecto que merece ser destacado em relação ao problema de autovalor encontrado neste trabalho é que ele tem a mesma forma do problema de autovalor construído na Ref. [20] para o caso de uma única espécie de gás, exceto pelas dimensões das matrizes. Também é importante salientar que o problema de autovalor obtido aqui possui uma expressão matemática muito mais simples que o encontrado nas Refs. [9, 14, 24], onde foram resolvidos os problemas do Salto de Temperatura e de Transferência de Calor com o modelo McCormack. Nestas referências a equação cinética utilizada é a mesma que a encontrada aqui, mas o problema de autovalor construído nelas possui uma complexidade matemática muito maior que o problema dado pela Eq. (4.14).

Continuando, como estes problemas são conservativos, de acordo com Case e Zweifel [4] sabe-se que alguns autovalores se aproximam de zero (constantes de separação tendem ao infinito) quando N tende ao infinito. Assim como ocorre nas Refs. [9, 14, 24], encontra-se três autovalores com este comportamento. Por isso é necessário acrescentar seis soluções exatas à solução em ordenadas discretas dada pela Eq. (4.18) e então reescrevê-la como

$$\mathbf{G}^l(\tau, \pm \xi_i) = \mathbf{G}_*^l(\tau, \pm \xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} \left[A_j^l \Phi(v_j, \pm \xi_i) e^{-(a+\tau)/v_j} + B_j^l \Phi(v_j, \mp \xi_i) e^{-(a-\tau)/v_j} \right], \tag{4.19}$$

para $i = 1, \dots, N$, onde

$$\mathbf{G}_*^l(\tau, \xi) = A_1^l \mathbf{G}_1 + A_2^l \mathbf{G}_2 + A_3^l \mathbf{G}_3(\xi) + B_1^l \mathbf{G}_4(\xi) + B_2^l \mathbf{G}_5(\tau, \xi) + B_3^l \mathbf{G}_6(\tau, \xi). \tag{4.20}$$

Como a equação cinética (Eq. (3.3)) para o problema tratado aqui é a mesma obtida nas Refs. [9, 14, 24], pode-se utilizar também as soluções exatas mostradas nestas referências. Assim, na Eq. (4.20) tem-se

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_3(\xi) = \begin{bmatrix} \xi^2 - 1/2 \\ 1 \\ \xi^2 - 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_4(\xi) = \begin{bmatrix} r\xi \\ 0 \\ \xi \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{4.21 a-d}$$

onde $r = (m_1/m_2)^{1/2}$,

$$\mathbf{G}_5(\tau, \xi) = \tau \mathbf{H}_1(\xi) + \mathbf{F}_1(\xi) \quad \text{e} \quad \mathbf{G}_6(\tau, \xi) = \tau \mathbf{H}_2(\xi) + \mathbf{F}_2(\xi). \tag{4.22 a, b}$$

Aqui

$$\mathbf{H}_1(\xi) = \begin{bmatrix} -1 + c_1(\xi^2 - 1/2) \\ c_1 \\ c_1(\xi^2 - 1/2) \\ c_1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}_2(\xi) = \begin{bmatrix} c_2(\xi^2 - 1/2) \\ c_2 \\ -1 + c_2(\xi^2 - 1/2) \\ c_2 \end{bmatrix}, \quad (4.23 \text{ a, b})$$

onde $c_1 = n_1/(n_1 + n_2)$, $c_2 = n_2/(n_1 + n_2)$ e $\mathbf{F}_1(\xi)$ e $\mathbf{F}_2(\xi)$ são funções a serem determinadas. Seguindo Siewert [24], estas duas funções podem ser escritas como

$$\mathbf{F}_1(\xi) = \xi \mathbf{U}_1 + \xi (\xi^2 - 3/2) \mathbf{V}_1 \quad (4.24 \text{ a})$$

e

$$\mathbf{F}_2(\xi) = \xi \mathbf{U}_2 + \xi (\xi^2 - 3/2) \mathbf{V}_2, \quad (4.24 \text{ b})$$

onde os vetores constantes \mathbf{U}_1 , \mathbf{V}_1 , \mathbf{U}_2 e \mathbf{V}_2 são as soluções dos sistemas lineares (com posto 8) definidos por

$$(\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{U}_1 - \mathbf{C}\mathbf{V}_1 = \begin{bmatrix} c_2/\sigma_1 & -c_1/\sigma_1 & -c_1/\sigma_2 & -c_1/\sigma_2 \end{bmatrix}^T \quad (4.25 \text{ a})$$

$$(\mathbf{I} - \mathbf{D})\mathbf{V}_1 - \mathbf{B}\mathbf{U}_1 = \begin{bmatrix} -c_1/\sigma_1 & 0 & -c_1/\sigma_2 & 0 \end{bmatrix}^T \quad (4.25 \text{ b})$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{U}_1 = 0 \quad (4.25 \text{ c})$$

e

$$(\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{U}_2 - \mathbf{C}\mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} -c_2/\sigma_1 & -c_2/\sigma_1 & c_1/\sigma_2 & -c_2/\sigma_2 \end{bmatrix}^T \quad (4.26 \text{ a})$$

$$(\mathbf{I} - \mathbf{D})\mathbf{V}_2 - \mathbf{B}\mathbf{U}_2 = \begin{bmatrix} -c_2/\sigma_1 & 0 & -c_2/\sigma_2 & 0 \end{bmatrix}^T \quad (4.26 \text{ b})$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{U}_2 = 0. \quad (4.26 \text{ c})$$

Aqui \mathbf{I} é a matriz identidade $4N \times 4N$ e as matrizes \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} e \mathbf{D} estão definidas no Apêndice C deste trabalho. Estabelecidas as soluções exatas, o próximo passo é determinar, nas Eqs. (4.19) e (4.20), os $16N$ coeficientes A_j^l e B_j^l , para $l = 1, l = 2$ e $j = 1, \dots, 4N$.

Devido à decomposição proposta na Eq. (2.20) é necessário resolver de fato dois problemas. Assim, aplica-se a solução geral em ordenadas discretas dada pela Eq. (4.19) nas condições de contorno dadas pelas Eqs. (3.5). Para cada um dos dois problemas ($l = 1$ e $l = 2$) encontra-se um sistema linear de dimensão $8N \times 8N$, onde as $4N$ primeiras equações são

$$A_1^l \mathbf{G}_1 + A_2^l \mathbf{G}_2 + A_3^l \mathbf{G}_3(\xi_i) + B_1^l \mathbf{G}_4(\xi_i) + B_2^l \mathbf{G}_5(-a, \xi_i) + B_3^l \mathbf{G}_6(-a, \xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} \left[A_j^l \Phi(v_j, \xi_i) + B_j^l \Phi(v_j, -\xi_i) e^{-2a/v_j} \right] = \mathbf{G}^l(-a, \xi_i) \quad (4.27 \text{ a})$$

e as últimas $4N$ equações são

$$A_1^l \mathbf{G}_1 + A_2^l \mathbf{G}_2 + A_3^l \mathbf{G}_3(\xi_i) + B_1^l \mathbf{G}_4(-\xi_i) + B_2^l \mathbf{G}_5(a, -\xi_i) + B_3^l \mathbf{G}_6(a, -\xi_i) + \sum_{j=4}^{4N} \left[A_j^l \Phi(v_j, -\xi_i) e^{-2a/v_j} + B_j^l \Phi(v_j, \xi_i) \right] = \mathbf{G}^l(a, -\xi_i), \quad (4.27 \text{ b})$$

para $l = 1, l = 2$ e $i = 1, \dots, N$. Ainda, $\mathbf{G}^l(-a, \xi_i)$ e $\mathbf{G}^l(a, -\xi_i)$ são dadas pelas Eqs. (3.5) com $\xi = \xi_i$.

A solução em ordenadas discretas para os dois problemas definidos pela Eq. (3.3) com condições de contorno dadas, respectivamente, pelas Eqs. (3.5 a) e (3.5 b) está agora completamente estabelecida. O próximo passo é determinar as perturbações de temperatura, os fluxos de calor e os valores limites de β_α^T e β_α^Q .

Assim, aplicando a Eq. (4.19) na Eq. (3.6) encontra-se as perturbações de temperatura

$$\mathbf{T}^l(\tau) = [A_3^l + (c_1 B_2^l + c_2 B_3^l) \tau] \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{3} \sum_{j=4}^{4N} \left[A_j^l e^{-(a+\tau)/v_j} + B_j^l e^{-(a-\tau)/v_j} \right] \mathbf{Y}(v_j), \quad (4.28)$$

onde

$$\mathbf{Y}(v_j) = \sum_{k=1}^N w_k \Psi(\xi_k) \begin{bmatrix} \xi_k^2 - 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_k^2 - 1/2 & 1 \end{bmatrix} [\Phi(v_j, \xi_k) + \Phi(v_j, -\xi_k)], \quad (4.29)$$

e aplicando a Eq. (4.19) na Eq. (3.7) encontra-se os fluxos de calor

$$\mathbf{Q}^l(\tau) = \mathbf{Q}_*^l + \sum_{j=4}^{4N} \left[A_j^l e^{-(a+\tau)/v_j} - B_j^l e^{-(a-\tau)/v_j} \right] \mathbf{Z}(v_j), \quad (4.30)$$

onde

$$\mathbf{Z}(v_j) = \sum_{k=1}^N w_k \xi_k \Psi(\xi_k) \begin{bmatrix} \xi_k^2 - 3/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_k^2 - 3/2 & 1 \end{bmatrix} [\Phi(v_j, \xi_k) - \Phi(v_j, -\xi_k)] \quad (4.31)$$

e

$$\mathbf{Q}_*^l = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} (B_2^l \mathbf{U}_1 + B_3^l \mathbf{U}_2) + \frac{3}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} (B_2^l \mathbf{V}_1 + B_3^l \mathbf{V}_2). \quad (4.32)$$

A Eq. (4.28) pode ser usada para calcular os valores limites de β_α^T , dados pela Eq. (2.24), pois

$$\frac{d}{d\tau} \mathbf{T}^l(0) = (c_1 B_2^l + c_2 B_3^l) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{2}{3} \sum_{j=4}^{4N} (A_j^l - B_j^l) \frac{e^{-a/v_j}}{v_j} \mathbf{Y}(v_j). \quad (4.33)$$

Continuando, a Eq. (4.30) é usada para calcular os valores limites de β_α^Q , mostrados na Eq. (2.25), uma vez que

$$\mathbf{Q}^l(0) = \mathbf{Q}_*^l + \sum_{j=4}^{4N} (A_j^l - B_j^l) e^{-a/v_j} \mathbf{Z}(v_j). \quad (4.34)$$

Na próxima seção alguns aspectos computacionais e resultados numéricos serão discutidos e apresentados.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Para implementar a solução em ordenadas discretas e determinar as quantidades de interesse o primeiro passo é definir o esquema de quadratura a ser utilizado. Dessa forma, utiliza-se a transformação não linear

$$u(\xi) = e^{-\xi} \quad (5.1)$$

para mapear o intervalo $[0, \infty)$ no intervalo $[0, 1]$, onde usa-se a quadratura de Gauss-Legendre com a mudança de variáveis

$$v(u) = 2u - 1. \quad (5.2)$$

Assim, após ter definido os N pontos ξ_k e pesos w_k de quadratura, a solução é rápida e fácil de implementar. As etapas desta implementação são as seguintes:

- (i) Resolver o problema de autovalor dado pela Eq. (4.14) para obter as constantes de separação v_j e as soluções elementares $\Phi_{\pm}(v_j)$;
- (ii) Resolver os sistemas lineares dados pelas Eqs. (4.25) e (4.26) para obter os vetores \mathbf{U}_1 , \mathbf{V}_1 , \mathbf{U}_2 e \mathbf{V}_2 e determinar as soluções exatas $\mathbf{G}_5(\tau, \xi)$ e $\mathbf{G}_6(\tau, \xi)$;
- (iii) Resolver os sistemas lineares dados pelas Eqs. (4.27) para determinar os coeficientes A_j^I e B_j^I ;
- (iv) Calcular as perturbações de temperatura dadas pela Eq. (4.28), os fluxos de calor dados pela Eq. (4.30) e os valores limites de β_{α}^T e β_{α}^Q dados pelas Eqs. (2.24) e (2.25).

A fim de gerar resultados numéricos considera-se os casos de misturas de gases definidos por Sharipov e Kalempa na Ref. [22]:

- (a) Neônio–Argônio: $m_1 = 20.183$, $m_2 = 39.948$ e $d_2/d_1 = 1.406$;
- (b) Hélio–Xenônio: $m_1 = 4.0026$, $m_2 = 131.30$ e $d_2/d_1 = 2.226$.

Seguindo Siewert [24] e Garcia e Siewert [9], tabula-se os resultados para as duas misturas em termos da concentração molar definida em termos do primeiro tipo de partícula como

$$C = \frac{n_1/n_2}{1 + n_1/n_2}. \quad (5.3)$$

Assim, as Tabelas 1 e 2 mostram alguns resultados numéricos dos valores limites de β_{α}^T e β_{α}^Q para os dois casos de misturas considerados. O código computacional utilizado foi desenvolvido em FORTRAN e é capaz de gerar apenas ordens pares de pontos e pesos da quadratura de Gauss-Legendre. Com o intuito de apresentar resultados com precisão de vários dígitos, variou-se a ordem da quadratura entre $N = 80$ e $N = 200$ pontos, com incrementos de 20, e, dessa forma, todos os dígitos mostrados nas tabelas são preservados (com a tolerância de mais ou menos 1 no último dígito). O tempo computacional para resolver o problema e obter os resultados apresentados, para um dos casos de mistura, com um único valor de C e usando $N = 80$ pontos de quadratura, é de aproximadamente 1 segundo em um PC com processador Intel Core i3 - 7020U - 2.30 GHz e 4.0 Gbytes de memória RAM.

Continuando, os resultados apresentados aqui não foram obtidos na literatura e por isso não foi possível fazer uma comparação. Assim, para testar a solução ADO e a confiabilidade do programa, pode-se verificar se os resultados encontrados com o modelo McCormack, considerando uma única espécie de gás, aproximam-se dos resultados para o modelo S (com $\varepsilon = \varepsilon_p$) apresentados na Ref. [20]. Analisando as Eqs. (A.1) a (A.33), a particularização para o caso de uma única espécie de gás pode ser obtida de três formas:

- (i) Se $n_1 = 0$ os resultados das quantidades com subscrito 2 correspondem a uma única espécie de gás;
- (ii) Se $n_2 = 0$ os resultados das quantidades com subscrito 1 correspondem a uma única espécie de gás;
- (iii) Se $m_1 = m_2$ e $d_1 = d_2$ os resultados das quantidades com subscritos 1 e 2 correspondem a uma única espécie de gás.

Para os três casos acima os resultados encontrados pelo modelo McCormack foram iguais aos resultados do modelo S (com $\varepsilon = \varepsilon_p$) apresentados na Ref. [20].

Analisando as Tabelas 1 e 2 observa-se que, para diferentes valores de a , as variações dos resultados de β_α^T e β_α^Q são maiores na mistura Hélio–Xenônio do que na mistura Neônio–Argônio. Uma aparente explicação para este comportamento dos resultados está no fato de que tanto a diferença entre as massas m_1 e m_2 , como a razão entre os diâmetros das partículas d_2/d_1 é maior na mistura Hélio–Xenônio do que na mistura Neônio–Argônio. Porém, este comportamento dos resultados não poderia ser previsto na formulação matemática apresentada aqui, pois nela não há evidências para o mesmo.

Tabela 1: Valores limites de β_α^T e β_α^Q para a mistura Neônio-Argônio.

a	$C = 0.3$				$C = 0.8$			
	β_1^T	β_2^T	β_1^Q	β_2^Q	β_1^T	β_2^T	β_1^Q	β_2^Q
0.1	4.25972	3.94438	3.64321	3.61291	4.09996	3.79411	3.63476	3.57029
0.5	5.16536	4.37786	3.81130	3.69401	4.74929	4.04327	3.76934	3.57962
1.0	5.16065	4.33324	3.82879	3.71279	4.70091	4.04985	3.78588	3.61904
1.5	4.94568	4.23991	3.79649	3.73238	4.53992	4.04296	3.77552	3.68680
2.0	4.72926	4.16141	3.75245	3.75612	4.39314	4.03226	3.76180	3.75806
2.5	4.55015	4.10196	3.70844	3.78113	4.27690	4.01855	3.74957	3.82254
5.0	4.10371	3.96903	3.55906	3.87818	3.99995	3.94943	3.71786	4.00528
9.0	3.95080	3.92851	3.48329	3.93266	3.90759	3.90268	3.70755	4.06444
13.0	3.92581	3.92156	3.46768	3.94264	3.89175	3.89114	3.70607	4.06766
15.0	3.92215	3.92021	3.46551	3.94344	3.88920	3.88897	3.70588	4.06655

Tabela 2: Valores limites de β_α^T e β_α^Q para a mistura Hélio–Xenônio.

a	$C = 0.3$				$C = 0.8$			
	β_1^T	β_2^T	β_1^Q	β_2^Q	β_1^T	β_2^T	β_1^Q	β_2^Q
0.1	5.23502	3.87788	3.61875	3.54806	4.50875	3.48036	3.60843	3.27077
0.5	8.38807	4.20858	3.78125	3.46330	6.15376	3.19991	3.75215	2.62062
1.0	1.05464(1)	4.10165	3.83102	3.35670	6.94395	2.96023	3.79488	2.25725
1.5	1.16850(1)	3.98969	3.83330	3.30563	7.25373	2.90725	3.79986	2.11909
2.0	1.21901(1)	3.92610	3.81424	3.29815	7.35574	2.96477	3.79146	2.09746
2.5	1.23068(1)	3.90792	3.78277	3.32316	7.36283	3.09138	3.77749	2.14718
5.0	1.10054(1)	4.23072	3.55352	3.73711	7.11468	4.15523	3.69811	2.92426
9.0	9.04903	5.26380	3.22012	4.82324	6.88899	5.72766	3.62225	4.65893
13.0	8.15475	6.22628	3.02862	5.87780	6.82702	6.45015	3.59200	5.85857
15.0	7.92182	6.58502	2.97258	6.28792	6.81603	6.60631	3.58458	6.18857

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho uma versão analítica do método de ordenadas discretas foi usada para desenvolver uma solução para o problema do Reverso de Temperatura, em dinâmica de gases rarefeitos, baseado no modelo McCormack para misturas binárias. Os valores limites de β_α^T e β_α^Q para que ocorram as inversões de sentido do gradiente de temperatura e do fluxo de calor de cada gás em um canal plano foram determinados com precisão de 6 dígitos significativos. Como a solução apresentada requer somente a solução de um problema de autovalor e de alguns sistemas lineares, o algoritmo é extremamente eficiente, rápido e fácil de ser implementado. Mais uma vez o método ADO mostrou-se muito preciso e eficiente para resolver um problema em dinâmica de gases rarefeitos.

ABSTRACT. An analytical version of the discrete ordinates method (ADO) is used to establish a concise and accurate solution for the Reverse Temperature Gradient problem in rarefied gas binary mixtures. The kinetic equations used are based in the McCormack kinetic model. It presents the complete development of an analytical solution in the spatial variable, in addition to numerical results for the critical values of latent heat for inversion from the direction of the temperature gradient and the heat flux of each gas in the mixtures Neon–Argon and Helium–Xenon. The algorithm is considered simple to elaborate and the code developed (in FORTRAN) requires around the one second to execute in a computer with Intel Core i3 - 2.30 GHz processor.

Keywords: reverse temperature gradient, ADO method, McCormack model.

REFERÊNCIAS

- [1] L.B. Barichello & C.E. Siewert. A Discrete-Ordinates Solution for a Non-Grey Model with Complete Frequency Redistribution. *JQSRT*, **62** (1999), 665–675.
- [2] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross & M. Krook. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Phys. Rev.*, **94** (1954), 511–525.
- [3] A. Bouchikhi. Physical Proprieties of DC Glow Discharges in a Neon–Argon Gas Mixture. *Can. J. Phys.*, **96** (2018), 62–70.
- [4] K.M. Case & P.F. Zweifel. “Linear Transport Theory”. Addison-Wesley, Reading (1967).
- [5] C. Cercignani. “The Boltzmann Equation and its Applications”. Springer-Verlag, New York (1988).
- [6] C. Cercignani & M. Lampis. Kinetic Models for Gas-Surface Interactions. *TTSP*, **1** (1971), 101–114.
- [7] S. Chapman & T.G. Cowling. “The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases”. Cambridge University Press, Cambridge (1970).
- [8] J.H. Ferziger & H.G. Kaper. “Mathematical Theory of Transport Processes in Gases”. North-Holland, Amsterdam (1972).
- [9] R.D.M. Garcia & C.E. Siewert. The McCormack Model for Gas Mixtures: Heat Transfer in a Plane Channel. *Physics of Fluids*, **16** (2004), 3393–3402.
- [10] R.D.M. Garcia & C.E. Siewert. The McCormack Model for Gas Mixtures: Plane Couette Flow. *Physics of Fluids*, **17** (2005), 037102(1)–037102(6).
- [11] R.D.M. Garcia & C.E. Siewert. The Linearized Boltzmann Equation: Sound-Wave Propagation in a Rarefied Gas. *Z. Angew. Math. Phys.*, **57** (2006), 94–122.
- [12] E.P. Gross & E.A. Jackson. Kinetic Models and the Linearized Boltzmann Equation. *Physics of Fluids*, **2** (1959), 432–441.
- [13] J. R. Thomas Jr., T.S. Chang & C.E. Siewert. Reverse Temperature Gradient in the Kinetic Theory of Evaporation. *Physical Review Letters*, **33** (1974), 680–682.
- [14] R.F. Knackfuss & L.B. Barichello. On the Temperature-Jump Problem in Rarefied Gas Dynamics: The Effect of the Cercignani-Lampis Boundary Condition. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, **66** (2006), 2149–2186.
- [15] M.S. Makarov & V.S. Naumkin. Heat Transfer in Helium-Xenon Mixture Flowing in Straight and Twisted Tubes with Square Cross-Section. *Journal of Physics: Conference Series*, **1128** (2018), 012020.
- [16] F.J. McCormack. Construction of Linearized Kinetic Models for Gaseous Mixtures and Molecular Gases. *Physics of Fluids*, **16** (1973), 2095–2105.
- [17] J. Muñoz, R. Rincón, C. Melero, M.S. Dimitrijević, C. González & M.D. Calzada. Validation of the Van der Waals Broadening Method for the Determination of Gas Temperature in Microwave Discharges Sustained in Argon–Neon Mixtures. *JQSRT*, **206** (2018), 135–141.

- [18] S. Pan & T.S. Storvick. Kinetic Theory Calculations of Pressure Effects of Diffusion. *Journal of Chemical Physics*, **97** (1992), 2671–2681.
- [19] Y. Pao. Application of Kinetic Theory to the Problem of Evaporation and Condensation. *Physics of Fluids*, **14** (1971), 306–312.
- [20] C.S. Scherer & L.B. Barichello. An Analytical Approach to the Unified Solution of Kinetic Equations in Rarefied Gas Dynamics. III. Evaporation and Condensation Problems. *Z. Angew. Math. Phys.*, **61** (2010), 95–117.
- [21] E.M. Shakhov. Generalization of the Krook Kinetic Relaxation Equation. *Fluid Dynamics*, **3** (1968), 95–96.
- [22] F. Sharipov & D. Kalempa. Velocity Slip and Temperature Jump Coefficients for Gaseous Mixtures. I. Viscous Slip Coefficient. *Physics of Fluids*, **15** (2003), 1800–1806.
- [23] C.E. Siewert. Heat Transfer and Evaporation/Condensation Problems Based on the Linearized Boltzmann Equation. *Euro. J. Mechanics B/Fluids*, **22** (2003), 391–408.
- [24] C.E. Siewert. The McCormack Model for Gas Mixtures: The Temperature-Jump Problem. *Z. Angew. Math. Phys.*, **56** (2005), 273–292.
- [25] C.E. Siewert & D. Valougeorgis. Concise and Accurate Solutions to Half-Space Binary-Gas Flow Problems Defined by the McCormack Model and Specular-Diffuse Wall Conditions. *Euro. J. Mechanics B/Fluids*, **23** (2004), 709–726.
- [26] C.E. Siewert & D. Valougeorgis. The McCormack Model: Channel Flow of a Binary Gas Mixture Driven by Temperature, Pressure and Density Gradients. *Euro. J. Mechanics B/Fluids*, **23** (2004), 645–664.
- [27] Y. Sone, T. Ohwada & K. Aoki. Evaporation and Condensation of a Rarefied Gas Between its Two Parallel Plane Condensed Phases with Different Temperatures and Negative Temperature-Gradient Phenomenon - Numerical Analysis of the Boltzmann Equation for Hard-Sphere Molecules. In “Mathematical Aspects of Fluid and Plasma Dynamics”. Springer-Verlag, Berlin (1991).
- [28] M.M.R. Williams. “Mathematical Methods in Particle Transport Theory”. Butterworth, London (1971).
- [29] M.M.R. Williams. A Review of the Rarefied Gas Dynamics Theory Associated with Some Classical Problems in Flow and Heat Transfer. *Z. Angew. Math. Phys.*, **52** (2001), 500–516.
- [30] B. Zhou, J. Sun, Y. Sun & Y. Ji. CFD Simulations of the Helium-Xenon Mixture Flow and Heat Transfer. *The Proceedings of the International Conference on Nuclear Engineering (ICONE)*, **2019.27** (2019), 1960.
- [31] B. Zhou, H. Zhang, Y. Ji, J. Sun & Y. Sun. Numerical Investigation on Turbulent Flow and Heat Transfer of Helium-Xenon Gas Mixture in a Circular Tube. *Science and Technology of Nuclear Installations*, **2021** (2021), 1–12.

APÊNDICE A: ELEMENTOS PARA DEFINIÇÃO DE EQUAÇÕES

Aqui são listados os resultados necessários para definir algumas equações no texto deste trabalho. Primeiro, em relação à Eq. (2.5), os elementos do núcleo de colisão são

$$K_{\beta,\alpha}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = K_{\beta,\alpha}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + K_{\beta,\alpha}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + K_{\beta,\alpha}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) + K_{\beta,\alpha}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}), \quad \alpha, \beta = 1, 2, \tag{A.1}$$

onde

$$K_{1,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{1,2}^{(1)}] - \eta_{1,2}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \tag{A.2}$$

$$K_{1,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2r^* \eta_{1,2}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \tag{A.3}$$

$$K_{1,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_1[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \tag{A.4}$$

$$K_{1,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\Delta_1(c'^2 - 5/2) - \eta_{1,2}^{(2)}](c^2 - 5/2) \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \tag{A.5}$$

$$K_{2,1}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = r\{2\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(2)}[r^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \tag{A.6}$$

$$K_{2,1}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)r^* \eta_{1,2}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \tag{A.7}$$

$$K_{2,1}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{1,2}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \tag{A.8}$$

$$K_{2,1}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2) \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \tag{A.9}$$

$$K_{2,2}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 1 + \{2[1 - \eta_{2,1}^{(1)}] - \eta_{2,1}^{(2)}(c'^2 - 5/2)\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \tag{A.10}$$

$$K_{2,2}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (2/3)[1 - 2s^* \eta_{2,1}^{(1)}](c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \tag{A.11}$$

$$K_{2,2}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\varpi_2[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2], \tag{A.12}$$

$$K_{2,2}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = [(4/5)\Delta_2(c'^2 - 5/2) - \eta_{2,1}^{(2)}](c^2 - 5/2) \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \tag{A.13}$$

$$K_{1,2}^{(1)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = s\{2\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(2)}[s^2(c'^2 - 5/2) + c^2 - 5/2]\} \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}, \tag{A.14}$$

$$K_{1,2}^{(2)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/3)s^* \eta_{2,1}^{(1)}(c'^2 - 3/2)(c^2 - 3/2), \tag{A.15}$$

$$K_{1,2}^{(3)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = 2\eta_{2,1}^{(4)}[(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c})^2 - (1/3)c'^2 c^2] \tag{A.16}$$

e

$$K_{1,2}^{(4)}(\mathbf{c}', \mathbf{c}) = (4/5)\eta_{2,1}^{(6)}(c'^2 - 5/2)(c^2 - 5/2) \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}. \tag{A.17}$$

Aqui foi usado

$$r = (m_1/m_2)^{1/2} \quad e \quad s = (m_2/m_1)^{1/2} \tag{A.18}$$

com

$$r^* = r^2/(1+r^2) \quad e \quad s^* = s^2/(1+s^2). \tag{A.19}$$

Ainda,

$$\varpi_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(4)} - \eta_{1,1}^{(3)} - \eta_{1,2}^{(3)}, \quad \varpi_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(4)} - \eta_{2,2}^{(3)} - \eta_{2,1}^{(3)}, \tag{A.20}$$

$$\Delta_1 = 1 + \eta_{1,1}^{(6)} - \eta_{1,1}^{(5)} - \eta_{1,2}^{(5)}, \quad \Delta_2 = 1 + \eta_{2,2}^{(6)} - \eta_{2,2}^{(5)} - \eta_{2,1}^{(5)}, \tag{A.21}$$

onde

$$\eta_{i,j}^{(k)} = v_{i,j}^{(k)} / \gamma_i. \tag{A.22}$$

Seguindo McCormack [16],

$$v_{\alpha,\beta}^{(1)} = \frac{16}{3} \frac{m_{\alpha,\beta}}{m_{\alpha}} n_{\beta} \Omega_{\alpha,\beta}^{11}, \tag{A.23}$$

$$v_{\alpha,\beta}^{(2)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^2 n_\beta \left(\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \frac{5}{2}\Omega_{\alpha,\beta}^{11}\right), \tag{A.24}$$

$$v_{\alpha,\beta}^{(3)} = \frac{16}{5} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3}\Omega_{\alpha,\beta}^{11} + \frac{m_\beta}{m_\alpha}\Omega_{\alpha,\beta}^{22}\right), \tag{A.25}$$

$$v_{\alpha,\beta}^{(4)} = \frac{16}{5} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^2 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \left(\frac{10}{3}\Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \Omega_{\alpha,\beta}^{22}\right), \tag{A.26}$$

$$v_{\alpha,\beta}^{(5)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^3 \frac{m_\alpha}{m_\beta} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} \tag{A.27}$$

e

$$v_{\alpha,\beta}^{(6)} = \frac{64}{15} \left(\frac{m_{\alpha,\beta}}{m_\alpha}\right)^3 \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta}\right)^{3/2} n_\beta \Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)} \tag{A.28}$$

com

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(5)} = \Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \left(\frac{15m_\alpha}{4m_\beta} + \frac{25m_\beta}{8m_\alpha}\right)\Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \left(\frac{m_\beta}{2m_\alpha}\right)\left(5\Omega_{\alpha,\beta}^{12} - \Omega_{\alpha,\beta}^{13}\right) \tag{A.29}$$

e, após correção feita por Pan e Storvick [18],

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(6)} = -\Omega_{\alpha,\beta}^{22} + \frac{55}{8}\Omega_{\alpha,\beta}^{11} - \frac{5}{2}\Omega_{\alpha,\beta}^{12} + \frac{1}{2}\Omega_{\alpha,\beta}^{13}. \tag{A.30}$$

Continuando,

$$m_{\alpha,\beta} = m_\alpha m_\beta / (m_\alpha + m_\beta) \tag{A.31}$$

e as funções Ω são as integrais de Chapman-Cowling [7,8] que, para o caso de colisões como esferas rígidas, possuem a forma

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{12} = 3\Omega_{\alpha,\beta}^{11}, \quad \Omega_{\alpha,\beta}^{13} = 12\Omega_{\alpha,\beta}^{11} \quad \text{e} \quad \Omega_{\alpha,\beta}^{22} = 2\Omega_{\alpha,\beta}^{11} \tag{A.32}$$

com

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{11} = \frac{1}{4} \left(\frac{\pi k T_0}{2m_{\alpha,\beta}}\right)^{1/2} (d_\alpha + d_\beta)^2. \tag{A.33}$$

Aqui, conforme em todo texto do trabalho, k é a constante de Boltzmann, T_0 é a temperatura de referência e d_1 e d_2 são os diâmetros dos dois tipos de partículas.

APÊNDICE B: ELEMENTOS DO NÚCLEO DE COLISÃO

As componentes da matriz do núcleo de colisão $\mathbf{K}(\xi', \xi)$ na Eq. (3.3) são as seguintes:

$$k_{1,1}(\xi', \xi) = 1 + f_{1,1}(\xi', \xi)\xi'\xi + (2/3)[1 - 2r^*\eta_{1,2}^{(1)} + 2\omega_1](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \tag{B.1}$$

$$k_{1,2}(\xi', \xi) = [(4/5)\Delta_1(\xi^2 - 3/2) - \eta_{1,2}^{(2)}]\xi'\xi + (2/3)[1 - 2r^*\eta_{1,2}^{(1)} - \omega_1](\xi^2 - 1/2), \tag{B.2}$$

$$k_{1,3}(\xi', \xi) = f_{1,3}(\xi', \xi)\xi'\xi + (4/3)[r^*\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \tag{B.3}$$

$$k_{1,4}(\xi', \xi) = [r^3\eta_{1,2}^{(2)} + (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(\xi^2 - 3/2)]\xi'\xi + (2/3)[2r^*\eta_{1,2}^{(1)} - \eta_{1,2}^{(4)}](\xi^2 - 1/2), \tag{B.4}$$

$$k_{2,1}(\xi', \xi) = [(4/5)\Delta_1(\xi'^2 - 3/2) - \eta_{1,2}^{(2)}]\xi'\xi + (2/3)[1 - 2r^*\eta_{1,2}^{(1)} - \omega_1](\xi'^2 - 1/2), \tag{B.5}$$

$$k_{2,2}(\xi', \xi) = (2/3)[1 - 2r^*\eta_{1,2}^{(1)}] + (1/3)\omega_1 + (4/5)\Delta_1\xi'\xi, \tag{B.6}$$

$$k_{2,3}(\xi', \xi) = [r\eta_{1,2}^{(2)} + (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}(\xi'^2 - 3/2)]\xi'\xi + (2/3)[2r^*\eta_{1,2}^{(1)} - \eta_{1,2}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2), \tag{B.7}$$

$$k_{2,4}(\xi', \xi) = (4/5)\eta_{1,2}^{(6)}\xi'\xi + (1/3)[4r^*\eta_{1,2}^{(1)} + \eta_{1,2}^{(4)}], \tag{B.8}$$

$$k_{3,1}(\xi', \xi) = f_{3,1}(\xi', \xi)\xi'\xi + (4/3)[s^*\eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(4)}](\xi'^2 - 1/2)(\xi^2 - 1/2), \tag{B.9}$$

$$k_{3,2}(\xi', \xi) = [s^3 \eta_{2,1}^{(2)} + (4/5) \eta_{2,1}^{(6)} (\xi^2 - 3/2)] \xi' \xi + (2/3) [2s^* \eta_{2,1}^{(1)} - \eta_{2,1}^{(4)}] (\xi^2 - 1/2), \tag{B.10}$$

$$k_{3,3}(\xi', \xi) = 1 + f_{3,3}(\xi', \xi) \xi' \xi + (2/3) [1 - 2s^* \eta_{2,1}^{(1)} + 2\omega_2] (\xi'^2 - 1/2) (\xi^2 - 1/2), \tag{B.11}$$

$$k_{3,4}(\xi', \xi) = [(4/5) \Delta_2 (\xi^2 - 3/2) - \eta_{2,1}^{(2)}] \xi' \xi + (2/3) [1 - 2s^* \eta_{2,1}^{(1)} - \omega_2] (\xi^2 - 1/2), \tag{B.12}$$

$$k_{4,1}(\xi', \xi) = [s \eta_{2,1}^{(2)} + (4/5) \eta_{2,1}^{(6)} (\xi'^2 - 3/2)] \xi' \xi + (2/3) [2s^* \eta_{2,1}^{(1)} - \eta_{2,1}^{(4)}] (\xi'^2 - 1/2), \tag{B.13}$$

$$k_{4,2}(\xi', \xi) = (4/5) \eta_{2,1}^{(6)} \xi' \xi + (1/3) [4s^* \eta_{2,1}^{(1)} + \eta_{2,1}^{(4)}], \tag{B.14}$$

$$k_{4,3}(\xi', \xi) = [(4/5) \Delta_2 (\xi'^2 - 3/2) - \eta_{2,1}^{(2)}] \xi' \xi + (2/3) [1 - 2s^* \eta_{2,1}^{(1)} - \omega_2] (\xi'^2 - 1/2) \tag{B.15}$$

e

$$k_{4,4}(\xi', \xi) = (2/3) [1 - 2s^* \eta_{2,1}^{(1)}] + (1/3) \omega_2 + (4/5) \Delta_2 \xi' \xi. \tag{B.16}$$

Aqui foi usado

$$f_{1,1}(\xi', \xi) = 2[1 - \eta_{1,2}^{(1)}] - \eta_{1,2}^{(2)} (\xi'^2 + \xi^2 - 3) + (4/5) \Delta_1 (\xi'^2 - 3/2) (\xi^2 - 3/2), \tag{B.17}$$

$$f_{1,3}(\xi', \xi) = 2r \eta_{1,2}^{(1)} + r \eta_{1,2}^{(2)} [r^2 (\xi'^2 - 3/2) + \xi^2 - 3/2] + (4/5) \eta_{1,2}^{(6)} (\xi'^2 - 3/2) (\xi^2 - 3/2), \tag{B.18}$$

$$f_{3,1}(\xi', \xi) = 2s \eta_{2,1}^{(1)} + s \eta_{2,1}^{(2)} [s^2 (\xi'^2 - 3/2) + \xi^2 - 3/2] + (4/5) \eta_{2,1}^{(6)} (\xi'^2 - 3/2) (\xi^2 - 3/2) \tag{B.19}$$

e

$$f_{3,3}(\xi', \xi) = 2[1 - \eta_{2,1}^{(1)}] - \eta_{2,1}^{(2)} (\xi'^2 + \xi^2 - 3) + (4/5) \Delta_2 (\xi'^2 - 3/2) (\xi^2 - 3/2). \tag{B.20}$$

APÊNDICE C: MATRIZES DOS SISTEMAS LINEARES

As matrizes dos sistemas lineares dados pelas Eqs. (4.25) e (4.26) são as seguintes:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 - \eta_{1,2}^{(1)} & -(1/2) \eta_{1,2}^{(2)} & r \eta_{1,2}^{(1)} & (r^3/2) \eta_{1,2}^{(2)} \\ -(1/2) \eta_{1,2}^{(2)} & (2/5) \Delta_1 & (r/2) \eta_{1,2}^{(2)} & (2/5) \eta_{1,2}^{(6)} \\ s \eta_{2,1}^{(1)} & (s^3/2) \eta_{2,1}^{(2)} & 1 - \eta_{2,1}^{(1)} & -(1/2) \eta_{2,1}^{(2)} \\ (s/2) \eta_{2,1}^{(2)} & (2/5) \eta_{2,1}^{(6)} & -(1/2) \eta_{2,1}^{(2)} & (2/5) \Delta_2 \end{bmatrix}, \tag{C.1}$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} -(1/2) \eta_{1,2}^{(2)} & (2/5) \Delta_1 & (r/2) \eta_{1,2}^{(2)} & (2/5) \eta_{1,2}^{(6)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ (s/2) \eta_{2,1}^{(2)} & (2/5) \eta_{2,1}^{(6)} & -(1/2) \eta_{2,1}^{(2)} & (2/5) \Delta_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{C.2}$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} -(3/4) \eta_{1,2}^{(2)} & 0 & (3r^3/4) \eta_{1,2}^{(2)} & 0 \\ (3/5) \Delta_1 & 0 & (3/5) \eta_{1,2}^{(6)} & 0 \\ (3s^3/4) \eta_{2,1}^{(2)} & 0 & -(3/4) \eta_{2,1}^{(2)} & 0 \\ (3/5) \eta_{2,1}^{(6)} & 0 & (3/5) \Delta_2 & 0 \end{bmatrix} \tag{C.3}$$

e

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} (3/5) \Delta_1 & 0 & (3/5) \eta_{1,2}^{(6)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ (3/5) \eta_{2,1}^{(6)} & 0 & (3/5) \Delta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{C.4}$$

How to cite

C. S. Scherer. O Problema do Reverso de Temperatura com o Modelo McCormack. *Trends in Computational and Applied Mathematics*, **25**(2024), e01725. doi: 10.5540/tcam.2024.025.e01725.

