

# Propagação do som em misturas binárias de gases rarefeitos via solução numérica do modelo de McCormack para a equação não-estacionária de Boltzmann

Denize Kalempa<sup>1</sup>

Departamento de Ciências Básicas e Ambientais, Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, Lorena, SP

Felix Sharipov<sup>2</sup>

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR

**Resumo.** No presente trabalho o problema de propagação do som em uma mistura binária de gases rarefeitos monoatômicos é investigado numericamente com base no modelo de McCormack para a equação de Boltzmann linearizada. A fonte de ondas sonoras é uma placa plana e infinita que oscila na direção normal ao seu próprio plano com frequência de oscilação arbitrária. As propriedades de equilíbrio da mistura gasosa nas proximidades da placa são perturbadas devido à propagação do som. Consequentemente, os desvios das macrocaracterísticas da mistura tais como velocidade, desvios de temperatura e pressão, etc., dos respectivos valores no estado de equilíbrio são as quantidades de interesse. O problema é resolvido via método de velocidades discretas, assumindo-se reflexão difusa das partículas gasosas na placa oscilatória. Um potencial de interação intermolecular realístico, baseado em dados experimentais para os coeficientes de transporte da mistura, é utilizado. As amplitudes e fases das características macroscópicas da mistura Hélio-Xenônio à temperatura de 300 K são determinadas para um amplo intervalo de parâmetro de rarefação, definido como a razão entre a frequência das colisões intermoleculares e a frequência do som. Uma comparação entre os resultados obtidos para a mistura considerada e no limite correspondendo a um único gás é realizada.

**Palavras-chave.** Propagação do som, misturas de gases rarefeitos, frequência do som arbitrária, equação de Boltzmann, método de velocidades discretas.

## 1 Introdução

O problema de propagação do som em gases rarefeitos é um problema clássico de dinâmica de gases rarefeitos e tem sido investigado a nível teórico e experimental por muitos pesquisadores ao longo dos anos, e.g. [6, 8, 5, 2, 12, 18, 7, 4]. O interesse no estudo da propagação do som em gases rarefeitos é motivado pelo fato de que a teoria clássica de propagação do som em gases, a qual é baseada nas equações da mecânica dos

---

<sup>1</sup>kalempa@usp.br

<sup>2</sup>sharipov@fisica.ufpr.br

meios contínuos, é válida somente nas situações em que (i) a frequência do som é muito menor que a frequência das colisões intermoleculares e (ii) o comprimento característico do sistema gasoso em estudo é muito menor que o livre caminho médio molecular. Se uma dessas condições não for satisfeita, outras abordagens que levem em consideração a natureza molecular do gás devem ser utilizadas para descrever corretamente a propagação do som no meio gasoso. Atualmente, existem vários exemplos de situações nas quais a teoria clássica de propagação do som em gases não é válida, e.g. MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems) com partes móveis que podem oscilar, separação de gases por ondas sonoras, termoacústica, etc. Abordagens baseadas na solução da equação de Boltzmann [3] e no método de simulação direta de Monte Carlo [1] podem ser utilizadas para descrever a propagação do som em gases em todo o intervalo de frequência do som e número de Knudsen, definido como a razão entre o livre caminho médio molecular e o comprimento característico do sistema. Nas Refs. [16, 9, 10], o problema de propagação do som em um único gás foi investigado com base no modelo de Shakhov [14] para a equação de Boltzmann e os resultados obtidos mostraram boa concordância com dados experimentais em um amplo intervalo de frequência do som. Como na prática misturas de gases são mais utilizadas e existem poucos artigos na literatura sobre propagação do som em misturas, no presente trabalho uma metodologia similar à utilizada previamente para gás único [16, 9] é usada para investigar a propagação do som em uma mistura binária de gases rarefeitos monoatômicos. O estudo tem por base o modelo de McCormack [13] para a equação de Boltzmann. Um potencial realístico de interação intermolecular [11], baseado em dados experimentais para os coeficientes de transporte da mistura, é utilizado. O sistema de equações cinéticas é resolvido numericamente através de um método de velocidades discretas, com condições de contorno estabelecidas pelo uso da lei de interação gás-superfície difusa. As amplitudes e as fases de todas as características macroscópicas da mistura Hélio-Xenônio são determinadas para um amplo intervalo de frequência do som e vários valores de concentração da mistura considerada. Uma comparação com os resultados obtidos no limite de gás único é feita para averiguar as peculiaridades inerentes à mistura gasosa.

## 2 Formulação do problema

Considera-se uma mistura binária de gases monoatômicos no espaço semi-infinito  $x' > 0$ . A fonte de ondas sonoras é uma placa plana e infinita, localizada em  $x'=0$ , que oscila harmonicamente na direção  $x'$  normal ao seu próprio plano (plano  $y'z'$ ) com frequência  $\omega$ . A velocidade da placa depende do tempo e é escrita como

$$U_w(t) = \Re[U_m \exp(-i\omega t)], \quad (1)$$

onde  $\Re$  denota a parte real da quantidade complexa,  $i$  é a unidade imaginária e  $U_m$  é a amplitude da velocidade da placa. Assume-se que  $U_m \ll v_m$ , onde  $v_m$  denota a velocidade mais provável das partículas gasosas. A concentração da mistura é definida como  $C_0 = n_{01}/(n_{01} + n_{02})$ , onde as quantidades parciais  $n_{01}$  e  $n_{02}$  denotam as densidades de número de partículas de cada espécie no estado de equilíbrio da mistura.

A oscilação da placa induz ondas sonoras que se propagam na mistura gasosa e afetam as propriedades de equilíbrio da mesma tais como pressão, temperatura, etc. O fluxo de gás induzido pela propagação do som na mistura é considerado como totalmente estabelecido e, conseqüentemente, todas as grandezas macroscópicas que caracterizam o comportamento da mistura são consideradas harmônicas no tempo. A adimensionalização das grandezas macroscópicas da mistura, assim como a notação utilizada no presente trabalho, é a mesma utilizada na Ref. [16] para gás único. Porém, é importante notar que todas as grandezas macroscópicas da mistura estão associadas a grandezas parciais referentes a cada constituinte da mistura, conforme mostrado na Ref. [15].

O regime de propagação do som na mistura gasosa é determinado através de um parâmetro de oscilação,  $\theta$ , definido como a razão entre a frequência das colisões moleculares e a frequência do som. A teoria clássica de propagação do som em gases é válida somente quando  $\theta \gg 1$ . As situações em que  $\theta \ll 1$  e  $\theta \sim 1$  correspondem, respectivamente, aos regimes de moléculas livres e transição. A metodologia utilizada no presente trabalho é válida em todos os regimes de oscilação.

### 3 Equações cinéticas para os constituintes da mistura

A condição  $U_m \ll v_m$  permite linearizar a equação de Boltzmann nas proximidades do estado de equilíbrio, o qual é caracterizado pela função de distribuição Maxwelliana. Para isso, a função de distribuição das velocidades moleculares de cada constituinte da mistura é escrita como

$$f_\alpha(t, x', \mathbf{v}) = f_\alpha^M \left[ 1 + \Re[h_\alpha(x', \mathbf{v})e^{-i\omega t}] \frac{U_m}{v_m} \right], \quad \alpha = 1, 2, \quad (2)$$

onde  $f_\alpha^M$  denota a função Maxwelliana e  $h_\alpha$  é chamada de função perturbação do constituinte  $\alpha$  da mistura.

Substituindo a representação (2) na equação não-estacionária de Boltzmann, e adimensionalizando a coordenada  $x'$  e a velocidade molecular  $\mathbf{v}_\alpha$  do mesmo modo que na Ref. [16], a seguinte equação cinética é obtida para o constituinte  $\alpha$  da mistura:

$$-ih_\alpha + \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} c_{\alpha x} \frac{\partial h_\alpha}{\partial x} = \frac{1}{\omega} \sum_{\beta=1}^2 \hat{L}_{\alpha\beta} h. \quad (3)$$

Nas nossas notações, o operador linearizado de colisões moleculares  $\hat{L}_{\alpha\beta}$  proposto por McCormack é escrito da seguinte forma:

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

$$-\frac{5}{4}\nu_{\alpha\beta}^{(2)}(u_\alpha - u_\beta)\Big]c_{\alpha x}\left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2}\right), \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad (4)$$

onde  $m_{\alpha\beta}$  é massa reduzida da mistura e as quantidades  $\nu_{\alpha\beta}^{(n)}$  dependem do modelo de potencial de interação intermolecular. Os momentos adimensionais que aparecem no operador de colisões são escritos em termos da função perturbação  $h_\alpha$  do seguinte modo:

$$\varrho_\alpha(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int h_\alpha(x, \mathbf{c}) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (5)$$

$$u_\alpha(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int c_{\alpha x} h_\alpha(x, \mathbf{c}) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (6)$$

$$\tau_\alpha(x) = \frac{2}{3\pi^{3/2}} \int \left(c_\alpha^2 - \frac{3}{2}\right) h_\alpha(x, \mathbf{c}) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (7)$$

$$q_\alpha(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sqrt{\frac{m}{m_\alpha}} \int c_{\alpha x} \left(c_\alpha^2 - \frac{5}{2}\right) h_\alpha(x, \mathbf{c}) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha, \quad (8)$$

$$\Pi_{\alpha xx}(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int \left(c_{\alpha x}^2 - \frac{1}{3}c_\alpha^2\right) h_\alpha(x, \mathbf{c}) \exp(-c_\alpha^2) d\mathbf{c}_\alpha. \quad (9)$$

Esses momentos parciais correspondem, respectivamente, ao desvio de densidade, velocidade hidrodinâmica, desvio de temperatura, fluxo de calor e deviante do tensor pressão na direção de propagação do som para o constituinte  $\alpha$  da mistura. As relações entre os momentos dos constituintes e da mistura podem ser encontradas na Ref. [15].

Espalhamento difuso na interface gás-sólido é assumido e, conseqüentemente, a seguinte condição de contorno na fonte sonora é obtida:

$$h_\alpha(0, \mathbf{c}_\alpha) = 2\sqrt{\frac{m_\alpha}{m}}c_{\alpha x} + \nu_{0\alpha}, \quad c_{\alpha x} \geq 0, \quad \alpha = 1, 2. \quad (10)$$

A constante  $\nu_{0\alpha}$  é obtida via condição de impenetrabilidade na parede.

## 4 Método de solução

Primeiramente, um método de redução de variáveis é aplicado a fim de eliminar as componentes  $c_{\alpha y}$  e  $c_{\alpha z}$  da velocidade molecular adimensional que aparecem na Eq. (3). Para isso, duas novas funções de distribuição para o constituinte  $\alpha$  da mistura são introduzidas:

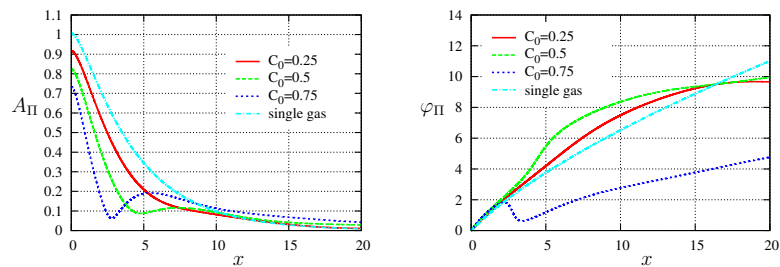
$$\Phi_\alpha(x, c_x) = \frac{1}{\pi} \int h_\alpha(x, \mathbf{c}) \exp(-c_{\alpha y}^2 - c_{\alpha z}^2) dc_{\alpha y} dc_{\alpha z}, \quad (11)$$

e

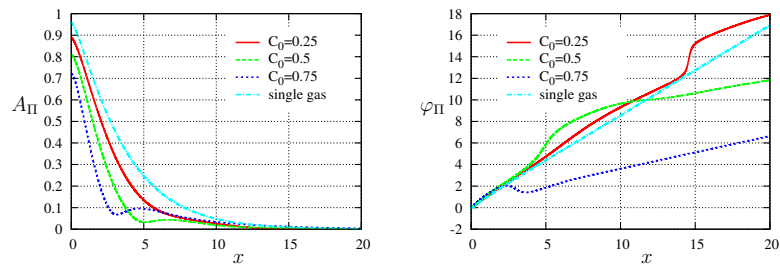
$$\Psi_\alpha(x, c_x) = \frac{1}{\pi} \int (c_{\alpha y}^2 + c_{\alpha z}^2 - 1) h_\alpha(x, \mathbf{c}) \exp(-c_{\alpha y}^2 - c_{\alpha z}^2) dc_{\alpha y} dc_{\alpha z}. \quad (12)$$

Assim, a equação cinética (3) é reescrita em termos de  $\Phi_\alpha$  e também em termos de  $\Psi_\alpha$ , ou seja, duas novas equações são obtidas para o constituinte  $\alpha$  da mistura. Os momentos dados em (5)-(9) e a condição de contorno (10) também são reescritos em termos dessas

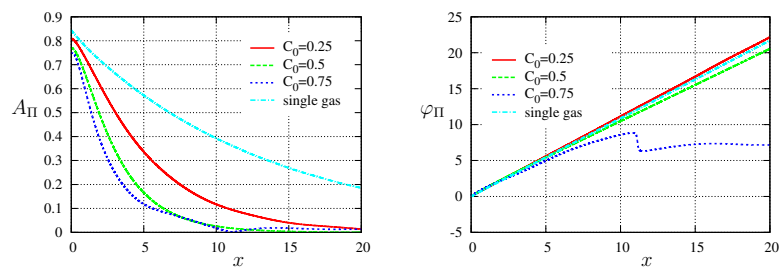
novas funções. Assim, apesar de aumentar o número de equações cinéticas, o número de variáveis no espaço de velocidade molecular é reduzido e isso acarreta uma diminuição no esforço computacional necessário nos cálculos. Conforme mostrado na Ref. [17], nesse tipo de problema a função de distribuição tem um perfil oscilatório na velocidade molecular. Consequentemente, um grande número de pontos no espaço de velocidade  $c_x$  é necessário para atingir uma boa precisão nos cálculos numéricos. Visando diminuir o número de pontos para a velocidade  $c_x$  e assim otimizar os códigos numéricos, um método de divisão da função de distribuição é utilizado. Detalhes do método podem ser encontrados nas Refs. [16, 9] referentes à propagação do som em um único gás. O sistema de equações cinéticas resultante é resolvido através de um método de velocidades discretas com precisão de 0.1% estimada pela variação dos parâmetros de malha.



(a) Oscillation parameter  $\theta=0.1$



(b) Oscillation parameter  $\theta=1$



(c) Oscillation parameter  $\theta=10$

Figura 1: Amplitude  $A_{\Pi}$  e fase  $\varphi_{\Pi}$  da diferença de pressão devida à propagação do som na mistura He-Xe à temperatura de 300 K versus distância  $x$ .

## 5 Resultados

A Figura 1 mostra os perfis da amplitude e da fase da diferença de pressão  $\Pi(x)$  da mistura Hélio-Xenônio. A coordenada adimensional  $x=\omega x'/v_m$ , onde  $v_m/\omega$  corresponde à distância média percorrida pelas moléculas em um ciclo da oscilação. A razão entre as massas dos constituintes da mistura é 32,804 e a temperatura considerada é 300 K. É importante mencionar que a diferença de pressão é a única grandeza medida experimentalmente. Três valores de concentração  $C_0$  foram considerados, assim como três valores para o parâmetro de oscilação  $\theta$ , os quais correspondem aos regimes de moléculas livres, transição e hidrodinâmico. Os perfis da amplitude e fase da diferença de pressão em um único gás, correspondendo aos limites  $C_0 \rightarrow 0$  ou  $C_0 \rightarrow 1$ , também são mostrados.

Dessa figura podemos observar que existe um desvio significativo da amplitude e fase da diferença de pressão em relação aos perfis obtidos para um único gás. Em algumas situações até mesmo o perfil qualitativo é totalmente diferente do perfil para um único gás. Isso ocorre devido à diferença entre as massas dos constituintes da mistura, ou seja, quanto maior a razão entre as massas dos constituintes da mistura, maior o desvio das macrocaracterísticas da mistura em relação aos valores para um único gás. Além disso, esse comportamento também se deve à concentração da mistura de modo que, quanto maior a concentração do constituinte mais leve, maior o desvio observado em relação a um único gás.

## 6 Conclusão

Os resultados mostram que os desvios das características de equilíbrio da mistura devido à propagação do som diferem significativamente dos resultados obtidos para gás único. Os desvios dependem da mistura considerada e da concentração dos seus constituintes. De fato, os desvios estão associados aos fenômenos de transporte em misturas gasosas sujeitas a gradientes de pressão, temperatura e concentração, e.g. difusão e termo-difusão.

## Referências

- [1] G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [2] J. R. Bowler and E. A. Johnson. Anomalous sound propagation and mode degeneracy in noble gas mixtures. *Proc. Royal Society London Series A Math. Phys. Sci.*, 408:79–101, 1986.
- [3] C. Cercignani. *The Boltzmann Equation and its Application*. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [4] A. S. Fernandes and W. Marques. Sound propagation in binary gas mixtures from a kinetic model of the Boltzmann equation. *Physica A*, 332:29–46, 2004.

- [5] J. D. Foch, G. E. Uhlenbeck, and M. F. Losa. Theory of sound propagation in mixtures of monatomic gases. *Phys. Fluid*, 15:1224, 1972.
- [6] M. Greenspan. Propagation of sound in five monatomic gases. *J. Acoust. Soc. Am.*, 28:644–648, 1956.
- [7] N. G. Hadjiconstantinou and O. Simek. Sound propagation at small scales under continuum and non-continuum transport. *J. Fluid Mech.*, 488:399–408, 2003.
- [8] D. Kahn. Sound propagation in rarefied gases. *Phys. Fluids*, 9(9):1867–1869, 1966.
- [9] D. Kalempa and F. Sharipov. Sound propagation through a rarefied gas confined between source and receptor at arbitrary Knudsen number and sound frequency. *Phys. Fluids*, 21:103601.1–14, 2009.
- [10] D. Kalempa and F. Sharipov. Sound propagation through a rarefied gas. Influence of the gas-surface interaction. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 30:190–199, 2012.
- [11] J. Kestin, K. Knierim, E. A. Mason, B. Najafi, S. T. Ro, and M. Waldman. Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixture at low densities. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 13(1):229–303, 1984.
- [12] W. Marques Jr. Dispersion and absorption of sound in monatomic gases: An extended kinetic description. *J. Acoust. Soc. Am.*, 106(6):3282–3288, 1999.
- [13] F. J. McCormack. Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases. *Phys. Fluids*, 16:2095–2105, 1973.
- [14] E. M. Shakhov. Generalization of the Krook kinetic relaxation equation. *Fluid Dynamics*, 3(5):95–96, 1968.
- [15] F. Sharipov and D. Kalempa. Gaseous mixture flow through a long tube at arbitrary Knudsen number. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 20(3):814–822, 2002.
- [16] F. Sharipov and D. Kalempa. Numerical modelling of the sound propagation through a rarefied gas in a semi-infinite space on the basis of linearized kinetic equation. *J. Acoust. Soc. Am.*, 124(4):1993–2001, 2008.
- [17] F. Sharipov and D. Kalempa. Oscillatory Couette flow at arbitrary oscillation frequency over the whole range of the Knudsen number. *Microfluidics and Nanofluidics*, 4(5):363–374, 2008.
- [18] F. Sharipov, W. Marques Jr, and G. M. Kremer. Free molecular sound propagation. *J. Acoust. Soc. Am.*, 112(2):395–401, 2002.